

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS
INSTITUTO DE FÍSICA
PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA DA MATÉRIA CONDENSADA

MESSIAS DE OLIVEIRA SALES

PROPRIEDADES DE TRANSPORTE DE CARGAS E MAGNONS EM
SISTEMAS COM DESORDEM, INTERAÇÃO ELÉTRON-FÔNON E
NÃO-LINEARIDADE

Maceió
2016

MESSIAS DE OLIVEIRA SALES

PROPRIEDADES DE TRANSPORTE DE CARGAS E MAGNONS EM
SISTEMAS COM DESORDEM, INTERAÇÃO ELÉTRON-FÔNON E
NÃO-LINEARIDADE

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

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

Maceió
2016

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

Bibliotecária Responsável: Helena Cristina Pimentel do Vale

S163p Sales, Messias de Oliveira.
Propriedade de transporte de cargas e magnons em sistemas com desordem,
interação elétron-fônon e não-linearidade / Messias de Oliveira Sales. – 2016.
190 f. : il.

Orientador: Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura.
Tese (doutorado em Física da Matéria Condensada) – Universidade Federal
de Alagoas. Instituto de Física. Maceió, 2012.

Bibliografia: f. 162-190.

1. Ornstein-Uhlenberg – Desordem. 3. Não-linearidade. Elétron-fônon. I. Título.

CDU: 539.935+539.951



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

***“Propriedades de transporte de cargas e magnons em
sistemas com desordem, interação elétron-fônon e não-
linearidade”***

por

Messias de Oliveira Sales

A Banca Examinadora composta pelos professores Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura (orientador), do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, Samuel Silva de Albuquerque, da Universidade Federal de Alagoas no Campus Arapiraca, Uriel Medeiros de Souza Costa, da Universidade Estadual de Alagoas, Wandearley da Silva Dias, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, e Rodrigo de Paula Almeida Lima, do Instituto de Física da Universidade Federal de Alagoas, consideram o candidato **aprovado com grau** “A”.

Maceió, 18 de julho de 2016


Prof. Dr. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura


Prof. Dr. Samuel Silva de Albuquerque


Prof. Dr. Uriel Medeiros de Souza Costa


Prof. Dr. Wandearley da Silva Dias


Prof. Dr. Rodrigo de Paula Almeida Lima

Ao meu filho, Heitor, que esta a caminho de vir ao mundo.

AGRADECIMENTOS

Esta é a etapa final de uma fase em minha vida, que por sua vez, foi difícil de ser concluída. Porém, acrescentou uma evolução espetacular em minha vida como pessoa e como profissional na carreira de físico. Essa longa caminhada teve um grande apoio de meus pais, Manoel e Tânia, que foram meus pilares nesta árdua vida de doutorando. Além de meus pais, eu devo a conclusão desta etapa de minha vida, ao meu amigo e orientador Francisco Fidelis. E com fundamental importância, nestes últimos anos de doutorado, gostaria de agradecer a minha esposa, Paula Mireli, que me apoiou e apoia em meus objetivos. Mesmo nas horas difíceis, ela está sempre me apoiando e me ajudando em minhas batalhas. Agradeço ainda aos meus irmãos pelas palavras de incentivo, e pela preciosa companhia. Por fim, tenho de agradecer aos meus amigos e colegas de doutorado, José Leandro, Leônade, Adhemar, Valdemir, Jessica, e todos os outros, pelas boas conversas que tivemos neste anos.

Além, do suporte pessoal e profissional. Gostaria de prestar meus sinceros agradecimentos as fontes financeiras de formação acadêmica: Capes, o CNPQ, e à Fapeal.

RESUMO

Neste trabalho de doutorado estudamos em linhas gerais propriedades de transporte de energia, partículas e quasi-partículas em sistemas unidimensionais. Estudamos diversos modelos e, através de técnicas distintas, obtivemos um longo espectro de novos resultados. Fizemos um rápido estudo em uma cadeia eletrônica ternária 1- d com distribuição *on-site* construída a partir de um processo estocástico conhecido por Ornstein-Uhlenbeck (OU). Através de diagonalização exata calculamos o espectro de absorção ótica e a distribuição de espaçamentos entre níveis para este modelo ternário. De modo geral, demonstramos que é possível controlar a posição dos picos de absorção regulando a distribuição ternária. Em um segundo momento, apresentamos os resultados obtidos para sistemas com a dinâmica eletrônica acoplada às vibrações da rede. Neste sentido, realizamos três trabalhos distintos: a princípio, estudamos a dinâmica de um elétron em uma cadeia anarmônica na presença da interação elétron-rede. Esta rede anarmônica foi construída utilizando o formalismo de Fermi-Pasta-Ulam com o potencial cúbico. Fizemos uso também da aproximação *tight-binding* para tratar o transporte eletrônico, e um formalismo clássico para descrever as vibrações longitudinais. Em nossos estudos, a interação elétron-rede foi considerada de tal forma que a integral de transferência entre os átomos vizinhos seja dependente da distância efetiva entre os átomos vizinhos (modelo de aproximação Su-Schrieffer-Heeger *SSH*). Nossos resultados sugerem um tipo de controle do modo solitônico sobre a dinâmica eletrônica ao longo da rede não-linear adotada. Indicando portanto, um tipo de estado elétron-sóliton se movendo ao longo da cadeia. Esta aparente mobilidade do par elétron-sóliton se mostra com velocidade aparentemente constante e pode ser um ingrediente crucial no transporte de cargas em cadeias não-lineares. Em nossa segunda abordagem investigamos a dinâmica de um estado eletrônico se movendo em uma cadeia de DNA contendo N bases, em que consideramos além da distribuição de desordem DNA intrínseca, o efeito das vibrações do DNA. Novamente, o termo elétron-rede foi considerado de tal forma que a energia de *hopping* eletrônica pudesse depender da distância efetiva entre as bases mais próximas do DNA. Os principais resultados obtidos revelam que o acoplamento elétron-fônon pode transpor a localização de Anderson, promovendo o aparecimento de uma dinâmica sub-difusiva para tempos longos. Em nosso trabalho, verificamos também o papel do tipo de acoplamento atômico (forças harmônicas, cúbicas ou interação tipo Morse) dentro do contexto do transporte eletrônico na presença de acoplamento elétron-fônon. Outro ponto que investigamos foi a interação com ondas acústicas bombeadas ao longo da rede (uma maneira simplificada de considerar ondas acústicas de superfície também chamadas de *SAW* ou Surface Acoustic Waves). Em um contexto magnético realizamos uma investigação sobre a dinâmica de um magnon em sistemas ferromagnéticos de Heisenberg na presença de interações magnon-fônon. Nossos resultados apontam que a propagação da onda de *spin* segue um regime super-difusivo para todos os valores de intensidade de acoplamento magnon-rede considerados.

Palavras-chave: Desordem Ornstein-Uhlenbeck; não-linearidade; elétron-fônon.

ABSTRACT

In this doctoral work, we study in general transport properties for one-dimensional systems. We have studied various models and through different techniques, we obtained a long range of new results. We did a quick study of a ternary electronic chain in which the on-site distribution it was built from a stochastic process called Ornstein-Uhlenbeck (OU). by using exact diagonalizes we calculate the spectrum of optical absorption and distribution of spacings between the levels for this ternary model. In general, we demonstrate that it is possible to control the position of the absorption peaks controlling the ternary distribution. In a second stage, we present the results for systems with electronic dynamics coupled to lattice vibrations. In this sense, we conducted three separate studies: First, we study the dynamics of an electron in a unharmonic chain in the presence of electron-network interaction. We built the non-linear network using the formalism of Fermi-Pasta-Ulam with the cubic potential. We use the tight-binding approach for treating the electronic transport and a classical formalism to describe the longitudinal vibrations. In our studies the electron-network interaction was considered so that the integral transfer between neighboring atoms and is dependent on the actual distance between the atoms (the Su-Schrieffer-Heeger *SSH mode*). Our results suggest the existence of a conjugate movement of the solitonic mode and the electronic wave-packet. Our results indicate therefore a kind of state electron-soliton moving along the chain. This mobile pair exhibits constant velocity and can be a crucial ingredient within the context of transport in non-linear chains. In our second approach we investigate the dynamics of an electronic wave-packet moving in a DNA chain containing N bases. We consider beyond their intrinsic DNA disorder, the effect of DNA's vibrations. Once time again, the electron-lattice interaction was considered by assuming the hopping directly dependent on the distance between the nearest bases of DNA. The main results show that the electron-phonon coupling can *win* the Anderson localization, promoting the emergence of a sub-diffusive dynamics for long time. In our work we also investigated the role of the type of atomic interaction (harmonic forces, cubical or Morse type interactions) within the context of electronic transport in the presence of coupling electron-phonon. Another point that was investigated it was the interaction with acoustic waves pumped over the network (a simplified way to consider surface acoustic wave, also called SAW). In a magnetic context we investigated the dynamics of a magnon in a ferromagnetic Heisenberg chain in the presence of magnon-phonon interactions. Our results show that the propagation of spin waves follows a super-diffusive regime for all values of magnon-lattice coupling considered.

Keywords: Ornstein-Uhlenbeck disorder; nonlinearity; electron-phonon.

Lista de Figuras

FIGURA 1.1 – Representação esquemática do potencial cristalino como uma superposição dos potenciais atômicos, localizados nos sítios da rede t_n . Na aproximação <i>tight-binding</i> , a interação entre os orbitais atômicos vizinhos ψ_a de energia E_a leva a formação das bandas de energia.	23
FIGURA 1.2 – Energia de banda $E(k) = E_0 + 2\gamma \cos ka$ para um modelo <i>tight-binding</i> com um único orbital por sítio e interações entre os primeiros vizinhos, onde tem-se $E_0 = -1eV$ e $\gamma = -0.2eV$	25
FIGURA 1.3 – Representação gráfica da forma mais geral da hamiltoniana tridiagonal. Os elementos de matriz diagonal são a_n , e os <i>hopping</i> fora da diagonal são b_n	26
FIGURA 1.4 – Densidade de estados ($\rho(E)$) do modelo de Anderson tridimensional para uma distribuição desordenada de energias ε_n em caixa (a) e de Gauss (b). Onde são destacados os valores críticos de desordem $W_c = 16.5$ para uma caixa com distribuição de energias desordenadas e $W_c = 6.1$ para uma distribuição de energias desordenadas de Gauss.	28
FIGURA 1.5 – (a) Densidade de estados para um modelo de Anderson bidimensional desordenado. Notar a singularidade típica da densidade de estados no centro da banda de energia para a hamiltoniana <i>tight-binding</i> não perturbado ($W = 0$) (MARKOS, 2006). (b) Limite de mobilidade, onde E_c divide os estados localizados na calda da banda de energia e os estados condutores (deslocalizados) em torno de $E = 0$	29
FIGURA 1.6 – Comportamento qualitativo da $\beta(g)$ para sistemas de $d = 1, 2, 3$ dimensões na teoria de escala idealizada por (ABRAHAMS <i>et al.</i> , 1979).	36
FIGURA 1.7 – Formação do <i>polaron</i>	42

FIGURA 1.8 – Cadeias de <i>trans</i> -poliacetileno perfeitamente dimerizadas mostrando a coordenada de dimerização u_n para os dois estados ligados degenerados: fase A Fig. 1.8-(a) e fase B Fig. 1.8-(b).	47
FIGURA 1.9 – Média espacial da função de onda eletrônica $\overline{\psi_n}$ versus n para o estado ligado de um elétron presente em uma banda de condução.	49
FIGURA 1.10 – Medida da evolução temporal da distribuição do parâmetro de ordem escalonado, para dois <i>polarons</i> sob a influência de um campo elétrico $E_0 = 1.5mV/\text{Å}$ e <i>spin</i> paralelo (a) e antiparalelo (b). Em (c), tem-se um <i>polaron</i> sujeito a um campo elétrico $E_0 = 1.0mV/\text{Å}$. E finalmente (d), é mostrado a dependência temporal de r_n para o espalhamento <i>polaron-bipolaron</i> em um campo elétrico externo $E_0 = 0.8 \times 10^5V/cm$	51
FIGURA 1.11 – Modelos para redes unidimensionais. Na descrição analítica foi considerado $u_n = y_n$	54
FIGURA 1.12 – Potencial exponencial $F(s)$ versus s , para $a, b > 0$. Onde é possível identificar o comportamento da função $F(s)$ descrita na Eq. 1.57.	58
FIGURA 1.13 – Arranjo esquemático de ondas de Rayleigh.	62
FIGURA 1.14 – Ilustração de ondas de Gulyaev-Bleustein.	63
FIGURA 1.15 – Esquema de um biosensor SAW básico, onde se nota uma amostra líquida envolvendo o cristal piezoelétrico, as ondas acústicas de superfície, bem como, outras partes necessárias à construção do dispositivo.	65
FIGURA 1.16 – (A) Ilustração esquemática de um dispositivo microfluídico sendo atingido por SAW. (B) Um padrão de SAW geradas por dispositivos com duas frequências f_1 e f_2 distintas.	66
FIGURA 1.17 – a) Estrutura ilustrada para ondas de cisalhamento, e ondas <i>Love</i> b).	67
FIGURA 1.18 – Ondas se propagando em um prato elástico isotrópico livre.	68

FIGURA 1.19 – Deslocamento q_i variando com a rede i e o tempo t para um pulso *Harmônico* (a), (b) e (c). E para um bombeamento *Gaussiano* (d), (e) e (f). Os resultados sugerem no geral, que o pulso *Gaussiano* tende a ser dominante na dinâmica acústica em relação ao pulso *Harmônico*. Além disso, a onda acústica gerada por um pulso *Gaussiano* se mostra pouco sensível à baixas frequências ($\omega = 0.02$ e 0.2) e tende a ficar mais espalhada e com menor intensidade para tempo longo ($t \rightarrow 800$) no caso de $\omega = 2.0$. Já no caso de um bombeamento *Harmônico*, o comportamento da onda acústica se mostra altamente sensível à variação da frequência ω como era de se esperar. Identificamos a formação de vários picos para $\omega = 0.02$ e 0.04 ((a) e (b), respectivamente) de intensidade similar, e a formação de um pico dominante para o caso $\omega = 0.08$ (c), sugerindo a presença de uma onda solitária. 74

FIGURA 2.1 – Cálculos numéricos da Eq. 2.6 usando $N = 10000$ sítios, $\zeta = 1.0$, 10^2 configurações de desordem, $\gamma = 1$ e 3 . Foi observado para $b \gg 0$, em ambos os painéis, que o espectro de absorção exibe um pico único ligeiramente acima do limite da banda inferior $E = -2$. Neste limite, o valor $\epsilon_n = 0$ é mais frequente que outros valores e portanto, podemos readquirir um modelo $1-d$ com desordem diagonal fraca. Daí, o arranjo estudado tem boa concordância, visto que, encontramos apenas um pico. Por outro lado, para $b \rightarrow 0$ o processo OU se torna uma série decorrelacionada. Logo, podemos obter um potencial binário decorrelacionado. Este comportamento explica o único e largo pico do espectro de absorção neste limite. 82

- FIGURA 2.2 – Resultado numérico do espectro de absorção no limite de fortes correlações ($\gamma \rightarrow 0$). Os cálculos mostrados abaixo são baseados na Eq. 2.6, e foram feitos para $N = 10000$ sítios, $\zeta = 1$ e 100 configurações de desordem. Podemos observar que no regime de b pequeno, forma-se um perfil do espectro de absorção não intuitivo. Outro aspecto importante é observado para $b \approx 0.5$, onde surge um conjunto de três picos bem definidos. Por fim, para $b \rightarrow 0$, os cálculos sugerem a presença de apenas dois picos bem formados. 83
- FIGURA 2.3 – Investigações do espectro de absorção para $N = 10000$ sítios, 100 amostras, $\zeta = 2$ e $\zeta = 3$. Os resultados expostos aqui confirmam que a estrutura de picos da absorção ótica é fortemente dependente das possíveis transições do estado ligado para o estado inferior de cada sub-banda. E para $b \rightarrow 0$ as posições dos dois picos está em bom acordo com as extremidades de cada sub-banda, isto é, $[-2J - \zeta]$ e $[-2J + \zeta]$ 85
- FIGURA 2.4 – Cálculo numérico da estatística do espaçamento entre níveis próxima do centro da banda para $\zeta = 1$ e $\gamma = 1, 3$. Nossos resultados numéricos para $b \gg 0$ revelam um único pico em torno do espaçamento entre níveis médio unitário $S = 1$. Essa estatística de espaçamento entre níveis é semelhante a encontrada em cadeias sem desordem. Para o limite de $b \rightarrow 0$, todos os cálculos da $P(S)$ indicam uma distribuição de Poisson padrão $P(S) = e^{-S}$, corroborando assim com a natureza localizada dos autoestados. 86
- FIGURA 2.5 – Estatística do espaçamento entre níveis próxima do centro da banda para $\zeta = 1$ e $\gamma = 0.05, 0.01$. Para b grande encontramos um pico em torno de $S = 1$, correspondendo a uma assinatura clara de uma cadeia pura. Para $b \rightarrow 0$, mesmo no limite de correlações fortes, nossos resultados revelam um comportamento do tipo Lei de Poisson, estando de acordo com a natureza localizada de todos autoestados. 86

-
- FIGURA 3.1 – Função de participação para tempo longo ($\xi_m = \lim_{t \rightarrow t_{max}} \xi(t)$) versus a intensidade de acoplamento elétron-rede α . Consideramos para o tempo máximo (t_{max}) algo em torno de 2×10^4 unidades, e as intensidades das forças cúbica e harmônica foram feitas iguais a unidade ($\eta = \beta = 1$). 96
- FIGURA 3.2 – Em *a)* e *b)*, mostramos o número de participação dependente do tempo $\xi(t)$ versus o tempo t para alguns valores de acoplamento elétron-rede α . No painel *a)*, estudamos o caso do número de participação grande ($\alpha = 5, 19, 32.5, 37$), e no painel *b)* investigamos o caso em que o pacote de ondas se mostra completamente localizado ($\alpha = 27.5, 47.5, 67.5, 100$). Os resultados expostos aqui fornecem um ensaio para os nossos principais consensos sobre a dinâmica do pacote de ondas. 97
- FIGURA 3.3 – Neste painel, observamos o cálculo da posição média do pacote de ondas $\langle n(t) \rangle$ para os casos onde temos o regime totalmente localizado, isto é, $\alpha = 27.5, 47.5, 67.5, 100$. A posição $\langle n(t) \rangle = 0$ representa o centro da cadeia, ou seja, a posição inicial do elétron na rede. 98
- FIGURA 3.4 – Densidade de probabilidade da função de onda $|c_n(t)|^2$ versus o tempo t e a cadeia n para $\eta = \beta = 1$ e $\alpha = 27.5, 47.5, 67.5, 100$. Como vemos, a maior parte do pacote de ondas inicial é aprisionado pela onda solitônica, de tal forma, que o par elétron-sóliton formado tende a exibir mobilidade ao longo da rede. 99
- FIGURA 3.5 – Cálculo da deformação da rede $A_n = \exp[(Q_n - Q_{n-1})]$ e a energia específica dos sítios h_n versus t e n de uma rede anarmônica com não-linearidade $\eta = 1$ e acoplamento elétron-rede $\alpha = 27.5$. Os resultados apresentados abaixo indicam que a excitação inicial se propaga ao longo da cadeia em um estado solitônico. 100
- FIGURA 3.6 – Função densidade de probabilidade $|c_n(t)|^2$ versus n para vários instantes e alguns valores de acoplamento elétron-fônon α . Estes cálculos foram feitos para $\alpha = 37$ e 60 . Escolhemos os valores de α onde o número de participação cresce com o tempo t , e como vemos o par elétron-sóliton aparentemente não ocorre. 101

- FIGURA 4.1 – Em (a)-(d), mostramos o cálculo do deslocamento quadrático médio $\sigma(t)$, e em (e)-(h), o cálculo da função de participação $\xi(t)$ (em unidades do espaçamento da rede), ambas variando com o tempo e para vários valores da intensidade d acoplamento elétron-fônon fora da diagonal α , e constantes de mola β (as unidades são das no texto). Nossos resultados numéricos indicam que a não-linearidade fora da diagonal ($\alpha > 0$) induzem a propagação sub-difusiva do pacote de ondas, levando ao comportamento de escala $\sigma(t) \propto t^{0.25(2)}$ e $\xi(t) \propto t^{0.20(3)}$ (os números em parênteses padronizam a barra de erro no processo de ajuste feito). 111
- FIGURA 4.2 – Medidas do deslocamento quadrático médio e da função de participação variando com o tempo para um sistema desacoplado ($\alpha = 0$), painéis (a) e (b) e um sistema acoplado $\alpha = 0.3$, painéis (c) e (b), e diversos níveis de constantes elásticas ($\beta = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4$). Esta medida evidencia um declínio na otimização da propagação do elétron com o aumento de β . Indicando portanto, que as molas mais fortes retardam ligeiramente a dinâmica eletrônica. 113
- FIGURA 4.3 – Função de auto-correlação temporal $C(t)$ versus t para intensidade de acoplamento elétron-fônon de $\alpha = 0$ até 0.3. 114
- FIGURA 4.4 – (a) Deslocamento quadrático médio $\sigma(t)$ e (b) a função de auto-correlação temporal $C(t)$ versus t para vários valores dos efeitos anarmônicos (de $\eta = 0.05$ até 0.2, com a unidade descrita no texto). A intensidade do acoplamento elétron-fônon fora da diagonal α foi considerada igual a 0.3, o valor mais intenso possível a ser medido em nossos cálculos numéricos. Nós observamos que, no regime de fracos efeitos anarmônicos, o acoplamento elétron-fônon promove uma dinâmica sub-difusiva em uma cadeia de DNA com hélice simples. 115

FIGURA 4.5 – (a) Posição de corte x_m versus tempo para tempos de $t = 3.0 \times 10^4$ até $t = 1.8 \times 10^5$. O melhor ajuste mostra que $x_m \propto t^\gamma$ com $\gamma = 0.25(2)$. (b) A probabilidade de retorno ($R(t) = |c_{N/2}|^2$) versus o tempo t . Neste caso, o melhor ajuste nos permite estimar que $R(t) \propto t^{-\nu}$ com $\nu = 0.20(2)$. (c) Os dados colapsados do perfil da função de ondas para tempos distintos em uma única curva com $\phi = 0.5$ 118

FIGURA 5.1 – Medidas da posição média do pacote de ondas $\langle n \rangle(t)$ (a), b), c)) e a entropia de informação de Shannon $S(t)$ (d), e), f)) para $\omega = 0.02, 0.2, 0.4$, respectivamente. Intensidade de desordem $W = 1.0$. E acoplamento elétron-rede $\alpha = 0.0, 1.0, 2.0$. Onde observamos um aumento na mobilidade do elétron com o aumento de acoplamento elétron-rede, e um regime sub-difusivo para a propagação do elétron. 127

FIGURA 5.2 – Vemos aqui uma análise da densidade de probabilidade $|c_n(t)|^2$ variando com o tempo t e a rede n , para $W = 1.0$, $\omega = 0.02$ e $\alpha = 0.0, 0.4, 0.8, 1.2, 1.6, 2.0$. Onde observamos que o par elétron-sóliton é realçado com o aumento na intensidade de α , isto é, o efeito *self-trapping* é favorecido pelo aumento das interações elétron-rede. 128

FIGURA 5.3 – Medidas sobre a deformação da rede A_n medida por $A_n = |\exp(u_n - u_{n-1}) - 1|$ versus o tempo t versus n , para $W = 1.0$, $\omega = 0.02$, $\alpha = 0.4$ e 2.0 . Neste caso, percebe-se que os modos solitônicos coincidem com a direção descrita pelo pacote de ondas eletrônico (ver Figs. 5.2). 128

FIGURA 5.4 – Resultados da posição média do pacote de ondas $\langle n \rangle(t)$ (a), b), c)) e da entropia de informação de Shannon $S(t)$ (d), e), f)) para $\omega = 0.002, 0.2, 0.4$, respectivamente. Intensidade de desordem $W = 2.0$. E acoplamento elétron-rede $\alpha = 0.0, 1.0, 2.0$. Nestas circunstâncias, os efeitos sobre a mobilidade do elétron e a dinâmica temporal são atenuados pelo maior grau de desordem. 129

FIGURA 5.5 – Medida da posição média do pacote de ondas $\langle n \rangle(t)$ (a)) e da entropia de informação de Shannon $S(t)$ (b)) para $\omega = 0.02$, $W = 1.0, 2.0$, e $\alpha = 2.0$. 130

- FIGURA 5.6 – Medida da densidade de probabilidade $|c_n(t)|^2$ versus t versus n , para $W = 2.0$, $\omega = 0.02$ e $\alpha = 0.0, 0.4, 0.8, 1.2, 1.6, 2.0$. Observa-se que o par elétron-sóliton tem maior dificuldade em se formar devido ao aumento na intensidade de desordem de $W = 1.0$ para $W = 2.0$ quando comparamos com as Figs. 5.2. No entanto, o aumento no parâmetro de acoplamento α continua a favorecer a mobilidade eletrônica. 131
- FIGURA 5.7 – Evidenciamos aqui, a deformação da rede A_n versus o tempo t versus n , para $W = 2.0$, $\omega = 0.02$, $\alpha = 0.4$ e 2.0 131
- FIGURA 5.8 – Medidas do centroide $\langle n \rangle(t)$ para $W = 1.0$ (painel *a*) e $W = 2.0$ (painel *b*), $\alpha = 2.0$, $\omega = 0.02, 0.2, 0.4$ e 4.0 . O fato inédito nesta figura consiste na medida para $\omega = 4.0$, onde identificamos um claro retardamento do pacote de ondas. 132
- FIGURA 5.9 – Densidade de probabilidade da função de ondas $|c_n(t)|^2$ medida para um sistema acoplado $\alpha = 2.0$, frequência angular $\omega = 4.0$, desordem $W = 1.0$ (*A*) e $W = 2.0$ (*C*). Os mesmos parâmetros são usados para medir a deformação da rede $A_n(t)$, painéis *B* e *D*. 133
- FIGURA 6.1 – Medidas numéricas da entropia de Shannon $S(t)$ (painel *a*), e do número de participação $\xi(t)$ (painel *b*) para intensidade de acoplamento $\alpha = 0.1, 0.20, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.75, 1.00$, e não-linearidade cúbica $\eta = 1.0$. Os resultados indicam um comportamento super-difusivo por ambas as medidas para os níveis de acoplamento estudados. 148
- FIGURA 6.2 – Medidas numéricas da entropia de Shannon $S(t)$ (*a*), (*b*), (*c*), e do número de participação $\xi(t)$ (*d*) para intensidade de acoplamento $\alpha = 1.25, 1.50, 1.75, 2.00$ (painel *a*); $\alpha = 2.25, 2.50, 2.75, 3.00$ (painel *b*); e $\alpha = 3.25, 3.50, 3.75, 4.00$ (painel *c*) e (*d*), com não-linearidade cúbica $\eta = 1.0$. Os resultados indicam um comportamento super-difusivo em todos os valores da intensidade de acoplamento estudados. 149

-
- FIGURA 6.3 – Posição média do pacote de ondas de *spin* $\langle n \rangle(t)$ para fraca intensidade de acoplamento magnon-fônon (a), isto é, $\alpha = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7$. E para fortes níveis de acoplamento α ($\alpha = 0.75, 1.25, 1.75, 2.25, 2.75, 3.25, 3.75$) como vemos no painel (b). De um modo geral, os casos estudados sugerem alguma mobilidade do magnon ao longo da rede. Atribuímos esta mobilidade a um possível aprisionamento do magnon por parte dos modos solitônicos. 150
- FIGURA 6.4 – Densidade de probabilidade da função de onda de *spin* $|\psi_j(t)|^2$ versus tempo t versus posição dos sítios j com acoplamento: a) ($\alpha = 0.1$), b) ($\alpha = 0.2$), c) ($\alpha = 0.3$), d) ($\alpha = 0.4$), e) ($\alpha = 0.5$), f) ($\alpha = 0.6$), $N = 3000$, $t_{max} = 800$ e constante de não-linearidade cúbica $\eta = 1$. Os resultados indicam a formação de um par magnon-sóliton. Mesmo para o tempo $t = 800$, nós podemos ratificar o aumento de mobilidade do magnon observado em 6.3(a) para $\alpha \leq 0.6$ 151
- FIGURA 6.5 – Medidas da energia local da rede h_j no sítio j para $\alpha = 0.2, 0.4, 0.6$, e $\eta = 1.0$. Os resultados indicam que à medida que aumentamos o valor de α , a onda solitônica toma uma única direção, ao passo que aprisiona o pacote de ondas de *spin*. 152
- FIGURA 6.6 – Densidade de probabilidade da função de ondas de *spin* $|\psi_j(t)|^2$ versus tempo t versus posição dos sítios j com acoplamento: a) ($\alpha = 0.75$), b) ($\alpha = 1.75$), c) ($\alpha = 2.75$), d) ($\alpha = 3.75$), $N = 3000$, $t = 800$, e constante de não-linearidade cúbica $\eta = 1$. Nossos resultados mostram que o aumento de α ($\alpha > 0.6$) omite a formação do par magnon-sóliton para tempo longo. Além disso, entre $\alpha \approx 3.0$ e $\alpha = 4.0$, o pacote de ondas de *spin* parece contrair o grau de mobilidade ao longo da rede, corroborando com 6.3(b). 153
- FIGURA 6.7 – Medidas da energia local da rede h_j no sítio j para $\alpha = 2.75, 3.75$ e $\eta = 1.0$. Estes resultados sugerem que a onda solitônica não é capaz de aprisionar o magnon para altos níveis de acoplamento magnon-fônon $\alpha > 2.0$ 153

FIGURA 6.8 – Densidade de probabilidade da função de ondas $|\psi_j(t)|^2$ versus j para $\alpha = 0.0, 1.0, 2.0, 3.0$ (painel *a*), $\alpha = 4.0, 5.0, 6.0, 7.0$ (painel *b*), $\eta = 1.0$, $t = 1000$ e 2000 . Percebemos que o magnon tem uma ligeira atenuação com aumento do acoplamento magnon-fônon. 154

Sumário

1	INTRODUÇÃO	18
1.1	Modelo de Anderson	23
1.1.1	Modelo <i>Tight-Binding</i>	23
1.1.2	Modelo <i>Tight-Binding</i> para Sistemas Anisotrópicos e com <i>Hopping</i> Aleatório	31
1.2	Teoria de Escala	32
1.3	Desordem Correlacionada	38
1.4	Interação elétron-fônon	41
1.4.1	Modelos com acoplamento elétron-rede	43
1.4.2	Redes Anarmônicas	53
1.4.3	Ondas Acústicas de Superfície em Sistemas Acoplados	61
2	ESPECTRO DE ABSORÇÃO E ESTATÍSTICA DO ESPAÇAMENTO ENTRE NÍVEIS EM UMA LIGA TERNÁRIA DESORDENADA OU	77
2.1	Introdução	77
2.2	Modelo Eletrônico Ternário	80
2.3	Medidas Numéricas	81
2.4	Resultados e Discussões	82
2.5	Conclusão	87
3	DINÂMICA ELÉTRON-SÓLITON EM CADEIAS COM NÃO-LINEARIDADE CÚBICA	89
3.1	Introdução	89

SUMÁRIO	17
3.2 Modelo com Interações Elétron-Fônon em uma Rede α -FPU	92
3.3 Resultados e Discussões	95
3.4 Conclusão	102
4 TRANSPORTE ELETRÔNICO SUB-DIFUSIVO EM UMA CADEIA SIMPLES DE DNA COM ACOPLAMENTO ELÉTRON-FÔNON	104
4.1 Introdução	104
4.2 Modelo com Interações Elétron-Fônon em uma Cadeia de DNA	107
4.3 Resultados e Discussões	110
4.4 Conclusões	118
5 SAW EM REDES DESORDENADAS NÃO-LINEARES DE MORSE- TODA	120
5.1 Introdução	120
5.2 Modelo de Cadeia de Polipeptídeo	122
5.3 Resultados	126
5.4 Conclusões	134
6 DINÂMICA MAGNON-SÓLITON EM CADEIAS NÃO-LINEARES CÚ- BICAS	135
6.1 Introdução	135
6.2 Modelo SSH Aplicado à Ondas de <i>spin</i>	137
6.3 Resultados	146
6.4 Conclusão	154
7 CONCLUSÃO	156
REFERÊNCIAS	161

1 Introdução

Até as primeiras décadas do século *XIX* os físicos da matéria condensada enfrentavam um grande desafio, que consistia basicamente em construir um modelo teórico capaz de descrever os sólidos amorfos, já que o modelo de Bloch ([ASHCROF *et al.*, 1976](#); [GROSSO *et al.*, 2005](#); [KITTEL, 2005](#)) tem uma abordagem restrita à sistemas com funções de onda espalhadas, isto é, sistemas perfeitamente cristalinos. Neste modelo, leva-se em conta que o elétron se move em um potencial periódico, caracterizando assim, uma estrutura atômica cristalina. Neste caso, prevê-se uma resistência nula para a passagem do elétron ao longo destas estruturas perfeitas. Mas se o elétron sofrer algum tipo de resistência para se difundir no sistema? O modelo de Bloch ainda assim será válido? Neste caso, as energias potenciais não terão mais o aspecto periódico, e daí, as funções de onda não serão mais estendidas. Em vista destes problemas, Anderson, 1958, propôs um modelo ([ANDERSON, 1958](#)) capaz de descrever sistemas desordenados. Isto é, sistemas com a estrutura atômica desorganizada (desordem estrutural ou composicional), tal qual os materiais isolantes apresentam. Em sua mais brilhante análise, Anderson conseguiu construir um modelo capaz de descrever os aspectos de localização em sistemas desordenados. Esta análise previa que a função de onda apresentava estados estendidos para um sistema com fraca ou nenhuma desordem (aspecto metálico ([ZALLEN, 1983](#); [KRAMER *et al.*, 1993](#); [ABRAHAMS *et al.*, 1979](#))), e ficava localizada em uma região restrita da rede para um sistema fortemente desordenado. Neste caso, em especial, para desordem forte os estados eletrônicos são exponencialmente localizados. De modo que, o material construído a partir destas redes desordenadas é considerado como um isolante.

Segundo Anderson ([ANDERSON, 1958](#)), todos os estados eletrônicos são localizados para qualquer grau de desordem em sistemas com dimensão $d \leq 2$. No limite $d \rightarrow 2$, é possível observar uma transição metal-isolante se o termo de acoplamento *spin* órbita for levado em conta ([EVANGELOU, 1995](#); [HIKAMI *et al.*, 1980](#)). Porém, se tivermos um grau de desordem intermediário o sistema pode apresentar uma transição metal-isolante, que neste caso depende da dimensão do sistema. Desde que o modelo de Anderson foi estabelecido, recebeu várias abordagens, as quais foram encontrados alguns estados estendidos ressonantes ([BELLANI *et al.*, 2000](#); [BOVIER, 1992](#); [DUNLAP *et al.*, 1990](#); [EVANGELOU *et al.*, 1992](#); [FLORES *et al.*, 1993](#); [FLORES, 1989](#); [HEINRICHS, 1995](#); [HILKE, 1994](#); [LAVARDA *et al.*,](#)

1994; PHILLIPS *et al.*, 1991) e também fases metálicas (de MOURA *et al.*, 1998; de MOURA *et al.*, 1999; IZRAILEV *et al.*, 1999; IZRAILEV *et al.*, 2001). Estas descobertas fazem uso de correlações de curto e longo alcance na distribuição de desordem. A hipótese de que sistemas de baixa dimensão ($d = 1$ e $d = 2$) surgisse um comportamento típico de um metal despertou a curiosidade de pesquisadores em outras áreas de pesquisa, como sistemas com desordem correlacionada na presença de campos magnéticos (TARAS-SEMCHUK *et al.*, 2001), ou sistemas com desordem correlacionada em duas dimensões (LIU *et al.*, 1999). Um dos estudos experimentais mais interessantes no contexto de desordem correlacionada consiste em investigar a propagação de microondas por intermédio de guias de ondas desordenadas (KUHL *et al.*, 1993), tendo como principal resultado o caráter estendido no sistema.

Investigações em torno das propriedades de transporte eletrônico podem construir inúmeras contribuições no melhoramento de dispositivos que transportam cargas. Mas se de algum modo o elétron se propagar juntamente com aspectos vibracionais da rede, o que este sistema acoplado pode produzir sobre o transporte de cargas? Neste caso, uma das consequências mais claras da interação elétron-fônon está na dependência da temperatura com a resistividade elétrica, como é descrito por (KITTEL, 2005). Essa dependência ocorre porque a existência de fônons promove o espalhamento de elétrons, de modo que, o aumento de temperatura acarreta em um crescimento do número de fônons, e assim, mais elétrons são espalhados. Portanto, o nível mais alto de espalhamento dos elétrons intensifica a resistividade elétrica. Segundo Kittel, 2005, acima da temperatura de Debye o número de fônons térmicos (fônons gerados pelo aumento de temperatura) é ligeiramente proporcional à temperatura absoluta, sendo possível encontrar que a resistividade cresce aproximadamente com a temperatura absoluta em qualquer metal razoavelmente puro nesta escala de temperatura. Porém, a interação elétron-fônon não tem influência apenas sobre a dependência entre temperatura e a resistividade elétrica. Geralmente, é possível associar à presença da interação elétron-fônon com uma quasi-partícula chamada *polaron* (KITTEL, 2005; ECONOMOU *et al.*, 1993; KOPIDAKIS *et al.*, 1994; KOPIDAKIS *et al.*, 1995; WELLEIN *et al.*, 1996; FEHSKE *et al.*, 2000; MISHCHENKO *et al.*, 2004). Esta manifestação na rede surge devido a combinação do elétron e a região de deformação provocada pelo mesmo. Esse efeito é mais intenso em cristais iônicos por causa da forte interação coulombiana entre íons e elétrons. Já em cristais covalentes o efeito é fraco, porque os átomos nêutrons tem apenas uma interação fraca com os elétrons (KITTEL, 2005).

Se mudarmos a intensidade do acoplamento elétron-fônon é possível caracterizar um sistema como desacoplado (intensidade de acoplamento nula), onde não existe a formação do *polaron*, ou ainda, como um sistema acoplado (intensidade de acoplamento maior que zero), onde o acoplamento possibilita a interação entre o elétron e os íons da rede. De acordo com (ASHCROF *et al.*, 1976), quando um elétron é introduzido na banda de

condução de um cristal iônico perfeito, ele pode ser energeticamente favorável para que possa ter movimento a partir de um nível espacialmente localizado, acompanhado por uma deformação local no arranjo iônico previamente localizado (processo de polarização da rede), que serve para identificar seu campo e reduzir a sua energia eletrostática. Neste fenômeno (elétron induzindo um maior nível polarização na rede), o elétron passa a ter mais mobilidade do que pode ocorrer com a colocação de defeitos (ASHCROF *et al.*, 1976). Geralmente, este fenômeno não é tido como um empecilho, mas sim como um importante desafio na teoria de mobilidade dos elétrons ou cristais espacialmente iônicos. As teorias de *polarons* são bastante abrangentes, visto que, existe a necessidade de considerarmos a dinâmica de um elétron que está fortemente ligado aos íons da rede (KUPER *et al.*, 1963).

A interação elétron-rede, além de proporcionar a formação do chamado *polaron*, pode auxiliar no transporte de cargas por meio do auto-aprisionamento de elétrons por ondas solitárias da rede (*solitons*). Mas antes de descrever estas tais previsões teóricas, vale lembrar que a comunidade científica fez importantes contribuições na tarefa de entender a formação do chamado *soliton* em sistemas acoplados (DAVYDOV, 1979; ECONOMOU *et al.*, 1993; KOPIDAKIS *et al.*, 1994; KOPIDAKIS *et al.*, 1995; SU-SCHRIEFFER-HEEGER, 1979). *Solitons* são modos elásticos intrínsecos da rede, viajando de forma “solitária” ao longo da mesma. Com o objetivo de induzir o transporte de cargas através de excitações solitônicas, existem em suma duas técnicas que devem ser destacadas. Na primeira delas, o acoplamento elétron-fônon é incluído no termo de energia *on-site* da hamiltoniana de Anderson (DAVYDOV, 1979; DAVYDOV, 1981; DAVYDOV *et al.*, 1983). Ou no termo de *hopping*, como prevê o modelo proposto por (SU-SCHRIEFFER-HEEGER, 1979). Em ambos os casos, a interação elétron-rede possui dependência linear direta com as distâncias efetivas entre as partículas vizinhas. O modelo SSH originalmente proposto tinha como objetivo investigar problemas que assumem a existência da alternância de ligações ao longo de cadeias de polímeros (ou seja, alternando entre ligações “simples” e “duplas”) e acoplamento entre as cadeias relativamente fraco (isto é, comportamento quasi-unidimensional). Essa abordagem foi motivada por evidências experimentais válidas em cadeias de $(CH)_x$, mais especificamente a partir de técnicas de Raman (LEFRANT *et al.*, 1979; HARADA *et al.*, 1978), que mostram a quebra de uma ligação carbono-carbono sendo responsável por vibrações resultantes da alternância de ligações, e estas são consistentes com os modos normais analisados (TRIC, 1969). A partir desta problemática foi desenvolvida uma teoria detalhada da formação de *solitons* em cadeias longas de polímeros para um único elétron.

Os efeitos da interação elétron-fônon sobre o transporte de cargas devido ao aprisionamento com os *solitons* parece ser mais intenso em redes anarmônicas (VELARDE *et al.*, 2005; CHETVERIKOV *et al.*, 2006; HENNIG *et al.*, 2006; VELARDE *et al.*, 2006; HENNIG *et al.*, 2007; HENNIG *et al.*, 2008; VELARDE *et al.*, 2008; VELARDE, 2010; VELARDE *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2013; de MOURA, 2013; VELARDE *et*

al., 2014). Daí, é importante entender como os modos vibracionais se propagam em uma rede com propriedades não-lineares. Sobre este tema, em particular, existem pelo menos dois estudos de grande relevância na física da matéria condensada. O primeiro, trata do estudo de moléculas diatômicas de acordo com ondas mecânicas e seus níveis vibracionais (MORSE, 1929), onde o autor estuda os aspectos físicos na rede com respeito a uma função potencial exponencial dependendo da distância relativa entre os sítios vizinhos de uma rede 1- d infinita. Este modelo, foi aprimorado, de modo que surgiu assim o chamado potencial de Morse, este descreve também uma função potencial exponencial (TODA, 1967; TODA, 1970; TODA, 1975; TODA, 1989). A segunda abordagem trata dos aspectos vibracionais em uma rede não-linear, e foi proposta por Fermi-Pasta-Ulam, 1955. Este modelo propõe que a força agindo entre os átomos vizinhos de uma cadeia finita seja descrita pela adição de um termo não-linear quadrático ou cúbico, compondo portanto a lei de Hooke com correções quadráticas e cúbicas (FERMI et al., 1955). Estas abordagens são conhecidas como modelo α -Fermi-Pasta-Ulam (α -FPU) e β -Fermi-Pasta-Ulam (β -FPU), respectivamente. Tratando estas funções como energias potenciais da rede, seria possível obter um potencial com um termo cúbico, equivalente ao termo quadrático da força decorrente das vibrações na rede, e um potencial com um termo quártico, equivalente ao termo cúbico da força. Esta equivalência de abordagens está descrita em detalhes na referência (TODA, 1989).

Agora que foram descritos aspectos sobre as redes anarmônicas. Como seria a propagação de ondas acústicas ao longo de superfícies? Este tipo de fenômeno foi inicialmente estudado por Lord Rayleigh, 1885, onde o autor propôs investigar o comportamento de ondas sobre uma superfície plana de um sólido elástico isotrópico homogêneo e infinito, de modo que, as perturbações feitas ao sólido ficassem confinadas em uma certa região do sólido, com espessura comparável ao comprimento de onda da onda acústica (STRUTT, 1885). Quase um século após a publicação deste trabalho, iniciou-se um “investimento” por parte da comunidade científica na tentativa de construir os chamados materiais SAW (materiais baseados em *Surface-Acoustic-Wave*) (SLOBODNIK, 1976). Estas abordagens tem como expectativa otimizar os dispositivos construídos a partir destes materiais. Para tanto, são investigados parâmetros como a velocidade, o coeficiente de acoplamento, os coeficientes de temperatura e o comportamento de propagação das ondas. Com o objetivo de promover avanços na construção de dispositivos SAW (dispositivos construídos à base dos princípios físicos de SAW) (SLOBODNIK, 1976). A base teórica para estas investigações está relacionada ao estudo analítico de alguns meios em especial. Mayer, 1995, faz uma revisão teórica sobre SAW em meios com elasticidade não-linear e linear. No caso linear, vale ressaltar os meios homogêneos, que possibilitam a propagação de ondas acústicas de superfície de forma linear, obedecendo é claro uma modelagem matemática específica (MAYER, 1995). Por outro lado, os meios com elasticidade não-linear têm como representantes as ondas acústicas de superfície de Rayleigh (STRUTT, 1885), ondas

Gulyaev-Bleustein, ondas “love” e outras ondas de torção, ondas em planos e estruturas em camadas, e ondas de superfície em cristais. Este conjunto de estruturas matemáticas permitem abordagens sobre meios com estruturas atômicas não organizadas, isto é, meios não-homogêneos (MAYER, 1995; BIRYUKOV *et al.*, 1995). Com base nestes conceitos teóricos, deve-se destacar o estudo sobre o transporte de um único elétron de alta frequência em um canal de *GaAs* quasi-unidimensional mediado por ondas acústicas de superfície (SHILTON *et al.*, 1996). Este estudo foi estendido para o caso específico de um canal 1-*d* (TALYANSKII *et al.*, 1997). Os resultados experimentais encontrados demonstram que o transporte de “cargas” acústicas em um canal unidimensional pode ser um meio viável de produzir um padrão de corrente elétrica. Deve-se pontuar ainda a investigação sobre a transferência de elétrons entre pontos quânticos distantes (MCNEIL *et al.*, 2011). Nesta aplicação em especial, considerou-se um pulso de SAW para auxiliar na transferência de elétrons. Além destas aplicações, abordagens experimentais que investigam a utilização de materiais biológicos e SAW na construção de biosensores e no manuseio de partículas biológicas são de imensa importância para física (LÄNGE *et al.*, 2008; DING *et al.*, 2012).

Nas seções seguintes desta construção textual científica será apresentada uma revisão teórica sobre os conceitos estabelecidos pela teoria de localização de Anderson e, as hipóteses da teoria de escala e de desordem com correlação. As seções seguintes descrevem uma detalhada fundamentação teórica em torno dos fundamentos da interação elétron-fônon e a formação de *polarons*, *solitons*. Posteriormente, serão descritos os principais tipos de redes anarmônicas utilizadas no estudo de mobilidade eletrônica via acoplamento elétron-rede. Ao fim deste capítulo, serão descritos os conceitos teóricos de ondas acústicas de superfície e suas aplicações experimentais. No cap. 2 será apresentado um estudo em torno dos efeitos de correlações de longo alcance sobre as propriedades óticas de uma liga ternária desordenada. Em seguida no cap. 3, será mostrado o primeiro estudo sobre os efeitos da interação elétron-rede no transporte de carga, onde neste caso, foi estudada a interação elétron rede segundo modelo de aproximação SSH (SU-SCHRIEFFER-HEEGER, 1979), com a rede tendo potencial não-linear cúbico. Seguindo este trabalho, serão apresentados os efeitos da interação elétron-fônon sobre a dinâmica eletrônica em uma cadeia de DNA com uma única hélice (ver cap. 4). Neste caso, deve-se utilizar o *hopping* dependendo exponencialmente com as distâncias entre os sítios vizinhos da rede de DNA. No cap. 5, será abordado o problema de como ondas elásticas bombeadas em uma das extremidade de uma rede com desordem podem modificar a dinâmica eletrônica, sendo a rede uma estrutura anarmônica de (MORSE, 1929). Por fim, será apresentado um estudo investigando os efeitos que um sistema ferromagnético de Heisenberg acoplado a uma rede com potencial cúbico oferecem sobre a dinâmica dos mágnons, bem como, a possibilidade de formação de um par *mágnon-soliton* (cap. 6).

1.1 Modelo de Anderson

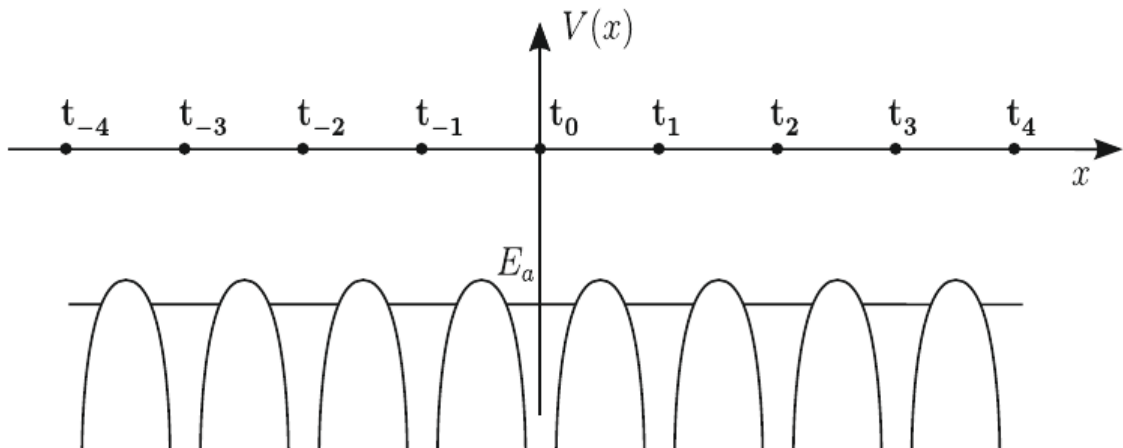
O modelo de Anderson (ZALLEN, 1983; ANDERSON, 1958; KRAMER *et al.*, 1993; ABRAHAMS *et al.*, 1979) é baseado em um importante método de análise teórica sobre os orbitais atômicos. Este método é conhecido por modelo *tight-binding*.

1.1.1 Modelo *Tight-Binding*

Inicialmente, considera-se que um elétron esteja tunelando através de um potencial periódico. A fim de simplificar esta análise, presume-se que um cristal seja construído a partir de uma sequência unidimensional periódica hipotética com N átomos iguais. Neste caso, pode-se desprezar a interação entre os átomos, visto que os orbitais atômicos localizados em sítios diferentes da rede possuem a mesma energia. Por outro lado, na presença de interação interatômica, as N degenerescências presentes nos orbitais são removidas e se transformam em uma energia de banda (GROSSO *et al.*, 2005).

Com base em um cristal unidimensional construído a partir de átomos idênticos e localizados nas posições da rede $t_n = na$ (onde a é a distância interatômica) é possível desenvolver esta análise, considerando a função do orbital local ψ_a com energia E_a (para simplificar, supomos que o orbital atômico ψ_a seja não-degenerado e real). Em seguida, serão calculadas as funções de onda do cristal através das N funções orbitais $\psi_a(x - t_n)$ (sendo x uma posição qualquer na rede) localizadas nos N sítios atômicos t_n . Como ilustração, observa-se na Fig. 1.1 o modelo cristalino aqui descrito. Para esta análise, a hamiltoniana H foi representada sobre as funções localizadas ($\psi_a(x - t_n)$). Especialmente, para

FIGURA 1.1 – Representação esquemática do potencial cristalino como uma superposição dos 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: Grosso *et al.*, 2014.

este estudo, não é estritamente necessário especificarmos a forma de H , sendo importante apenas analisar a simetria translacional. Isso se deve ao fato de que por meio desta simetria, os elementos de matriz diagonal de H nos orbitais atômicos são todos iguais, da mesma forma que a energia cinética (integrais de *hopping*) entre os orbitais mais próximos também são iguais. Daí, de acordo com (GROSSO *et al.*, 2005) tem-se

$$\langle \psi_a(x - t_n) | H | \psi_a(x - t_n) \rangle = E_0 \quad e \quad \langle \psi_a(x - t_n) | H | \psi_a(x - t_{n\pm 1}) \rangle = \gamma. \quad (1.1)$$

Em sequência, por virtude da natureza localizada dos orbitais atômicos, supomos que a segunda parte da Eq. 1.1 possa ser desprezada por enquanto. Esta suposição foi feita a fim de simular a situação de potenciais atômicos atrativos (GROSSO *et al.*, 2005).

As funções localizadas ($\psi_a(x - t_n)$) não satisfazem o teorema de Bloch (que estabelece o caráter periódico das funções de onda), porém, é possível recobrar as condições para o mesmo. Esta tarefa consiste em considerar as combinações lineares dos orbitais atômicos do tipo

$$\Psi(k, x) = \frac{1}{N} \sum_n^N e^{ikt_n} \psi_a(x - t_n), \quad (1.2)$$

em que N indica o número de células unitárias do cristal. As funções de onda definidas acima correspondem às *somas de Bloch*, tendo por sua vez, o caráter localizado, isto é, funções de onda específicas e localizadas em sítios distintos da rede, e satisfazendo portanto o teorema de Bloch, como é possível ver abaixo:

$$\Psi(k, x + t_j) = e^{ikt_j} \frac{1}{N} \sum_n^N e^{ik(t_n - t_j)} \psi_a(x - t_n + t_j) = e^{ikt_j} \Psi(k, x). \quad (1.3)$$

Onde foi assumida a ortonormalidade dos orbitais localizados nos diferentes átomos, daí, as somas de Bloch 1.2 são também ortonormais. As N somas de Bloch itinerantes ortonormais ($\Psi(k, x)$) possuem formas equivalentes no espaço de Hilbert com N funções localizadas ($\psi_a(x - t_n)$), porém, este caso é mais vantajoso, visto que as somas de Bloch dos diferentes valores de k não se modificam sobre a influência de um potencial periódico. A relação de dispersão das energias de banda geradas a partir dos orbitais atômicos ($\psi_a(x - t_n)$) é dada portanto, por

$$E(k) = \frac{\langle \Psi(k, x) | H | \Psi(k, x) \rangle}{\langle \Psi(k, x) | \Psi(k, x) \rangle} = \langle \Psi(k, x) | H | \Psi(k, x) \rangle. \quad (1.4)$$

Em que o termo do lado direito é dado por

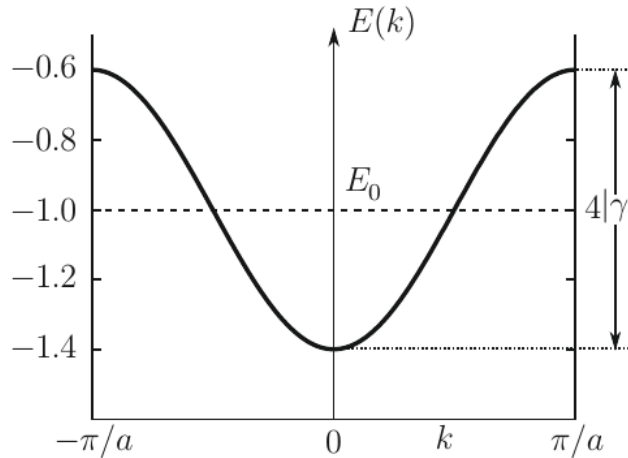
$$\begin{aligned}\langle \Psi(k, x) | H | \Psi(k, x) \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{j,n}^N e^{-ik(t_j - t_n)} \langle \psi_a(x - t_j) | H | \psi_a(x - t_n) \rangle \\ &= \sum_n^N e^{ikt_n} \langle \psi_a(x) | H | \psi_a(x - t_n) \rangle,\end{aligned}\quad (1.5)$$

sabendo também que o termo $t_j = 0$ foi selecionado, e o denominador N foi descartado. Se tivermos que os elementos de matriz de H entre os orbitais atômicos sejam dados pela Eq. 1.1, a relação de dispersão 1.4 se torna

$$E(k) = E_0 + 2\gamma \cos ka, \quad (1.6)$$

esta expressão indica que nos níveis elementares, os N estados degenerados dos átomos não interagentes são espalhados em uma banda contínua de largura $4|\gamma|$ (ver Fig. 1.2).

FIGURA 1.2 – Energia de banda $E(k) = E_0 + 2\gamma \cos ka$ para um modelo *tight-binding* com um único orbital por sítio e interações entre os primeiros vizinhos, onde tem-se $E_0 = -1eV$ e $\gamma = -0.2eV$.



Fonte: Grosso *et al.*, 2014.

Agora que a forma dos orbitais atômicos foi estudada, deve-se analisar a hamiltoniana H na forma de matrizes tridiagonais. De acordo com (GROSSO *et al.*, 2005), uma matriz, cujos elementos não desaparecem, ocorrem apenas na diagonal principal e nas diagonais secundárias acima e abaixo, esta é portanto uma matriz tridiagonal. A hamiltoniana H de um cristal, com elementos de matriz dados pela Eq. 1.1, e representada sobre uma base de orbitais localizados $|f_n\rangle = |\psi_a(x - t_n)\rangle$ tem a seguinte forma:

$$H = E_0 \sum_n^N |f_n\rangle \langle f_n| + \gamma \sum_n^N [|f_n\rangle \langle f_{n+1}| + |f_{n+1}\rangle \langle f_n|]. \quad (1.7)$$

A Eq. 1.7 representa portanto, a hamiltoniana *tight binding* unidimensional com um orbital por sítio e interações entre os primeiros vizinho, esta por sua vez, descreve uma estrutura cristalina, o sistema mais simples que uma matriz tridiagonal pode representar. Em um caso mais geral, a hamiltoniana 1.7 se torna

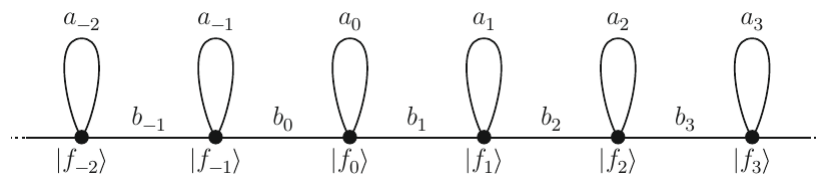
$$H = \sum_n^N a_n |f_n\rangle\langle f_n| + \sum_n^N b_{n+1} [|f_n\rangle\langle f_{n+1}| + |f_{n+1}\rangle\langle f_n|]. \quad (1.8)$$

Além deste formato específico, os elementos de matriz diagonal a_n e fora da diagonal b_n devem ter valores apropriados, de modo que H seja hermitiana, todos os valores de a_n sejam reais, e que os elementos b_n possam ser considerados como valores reais, sem é claro a perda de generalidade, mas apenas incorporando fases apropriadas nas funções fundamentais. A Eq. 1.8 corresponde ao operador tridiagonal generalizado e pode ser representado graficamente em uma cadeia como se observa na Fig. 1.3. Na forma matricial, o operador hamiltoniano hermitiano e tridiagonal H (Eq. 1.8) é dado na forma

$$H = \begin{pmatrix} a_1 & b_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ b_2 & a_2 & b_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b_3 & a_3 & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \ddots & \ddots & b_{n+1} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & b_{n+1} & a_n & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots & b_{N+1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b_{N+1} & a_N \end{pmatrix} \quad (1.9)$$

O modelo de Anderson (ANDERSON, 1958; ABRAHAMS *et al.*, 1979; KRAMER *et al.*, 1993; ZALLEN, 1983) faz uma particularização da Eq. 1.8 de modo a obter sistemas desordenados, isto é, as energias *on-site* caracterizam um sistema amorfo (sistema com diferentes constituintes). Em sua abordagem, Anderson escolheu apenas ingredientes específicos da estrutura atômica dos materiais sólidos. Essas condições foram levadas em conta a fim de entender o fenômeno de localização dos estados eletrônicos em sistemas desordenados. Este modelo possui várias aplicações, entre elas vale salientar as abordagens

FIGURA 1.3 – Representação gráfica da forma mais geral da hamiltoniana tridiagonal. Os elementos de matriz diagonal são a_n , e os *hopping* fora da diagonal são b_n .



Fonte: Grosso *et al.*, 2014.

com o objetivo em compreender as transições metal-isolante, que ocorrem em diversos materiais, em especial para materiais como o *arsenito de fósforo (SiP)* (ALTSCHULER *et al.*, 1988; LEE *et al.*, 1985). Recentemente, com finalidades tecnológicas, a comunidade científica tem investigado a possibilidade da transição metal-isolante em materiais como o *óxido de vanádio (VO₂)* (CHAE *et al.*, 2005; JEONG *et al.*, 2013; PARK *et al.*, 2013), *óxido de níquel neodímio (NdNiO₃)* (SCHERWITZL *et al.*, 2010) e entre outros. Em tese o modelo de Anderson prevê a análise de um grande número de fenômenos em metais, que por sua vez ocorrem pela presença de defeitos ou imperfeições na estrutura ou ainda desordem na distribuição de energias de ionização atômica (potencial aleatório). Contudo, de acordo com a forma *tight-binding* da Eq. 1.8 (ASHCROF *et al.*, 1976; GROSSO *et al.*, 2005) e utilizando a forma representativa das funções de Wannier, redefinimos o operador hamiltoniano de Anderson na forma,

$$H = \sum_n^N \varepsilon_n |n\rangle\langle n| + \sum_{n \neq j} \Gamma_{nj} |n\rangle\langle j|. \quad (1.10)$$

Na modelagem elaborada por Anderson, $|n\rangle$ representa um estado localizado no sítio n e Γ_{nj} indica o termo responsável pela mobilidade do elétron ao longo da cadeia, ou o *hopping* do elétron entre as partículas alocadas nos sítios vizinhos na presença de um potencial aleatório, é ainda chamado de integral de transferência entre os sítios n e j . Este termo em especial, diminui rapidamente com a distância entre os sítios vizinhos.

O potencial aleatório mencionado acima possui algumas especificidades:

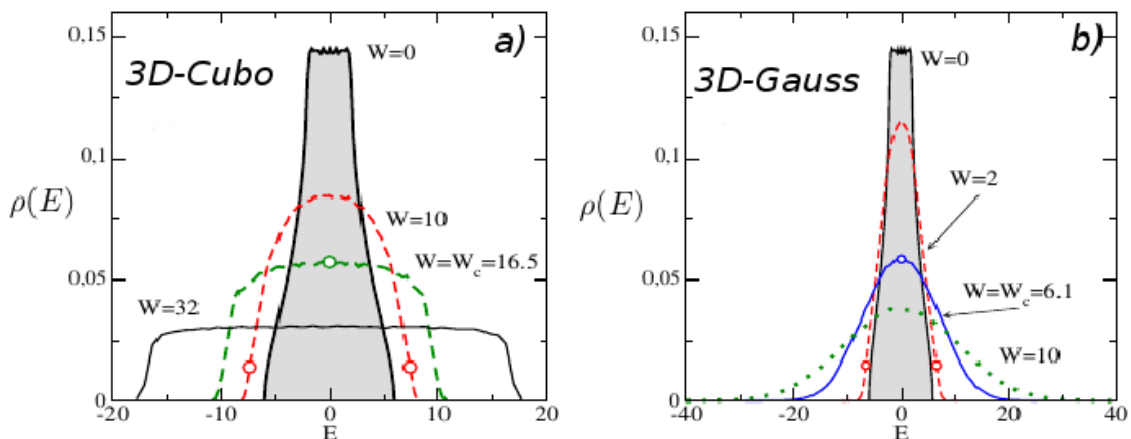
1-para um cristal com ordenamento perfeito, todos os sítios com energia potencial ε_n (*energia on-site*) tem os mesmos valores ou seguem um padrão periódico.

2-para sólidos desordenados, ε_n pode assumir valores aleatórios de uma certa distribuição de probabilidade, como uma distribuição uniforme ou gaussiana. De um modo geral, ε_n é caracterizado por um certo parâmetro W , este parâmetro quantifica a extensão da distribuição de desordem, e assim o grau de desordem de ε_n . Por outro lado, em uma distribuição uniforme, W mede a extensão desta amostragem de valores, e em uma distribuição gaussiana W indica o desvio padrão. Em modelos que estudam sistemas sólidos unidimensionais, leva-se em conta dois parâmetros, o termo de interação entre partículas vizinhas, Γ_{nj} e o parâmetro W . Portanto, o parâmetro de controle geral é a razão W/Γ , sendo Γ neste caso o termo de *hopping* efetivo. Na maior parte das abordagens nesta linha de pesquisa, mantêm-se Γ_{nj} em um valor fixo (como, $\Gamma_{nj} = 1$), e com isso é fixada a escala de energia do sistema. Já a variação do parâmetro W infere em diferentes efeitos, a depender dos níveis de desordem convencionados (CARPENA *et al.*, 2002). Com respeito ao termo de *hopping* Γ_{nj} , as abordagens realizadas por Römer e colaboradores identificam que se este termo pertence a uma distribuição de valores desordenados, então surgem diversos efeitos interessantes nos aspectos de localização do sistema, inclusive a

famosa transição metal-isolante de Anderson (BISWAS *et al.*, 2000; CAIN *et al.*, 1999; EILMES *et al.*, 2004; EILMES *et al.*, 1998; EILMES *et al.*, 1998; EILMES *et al.*, 2001).

No limite de desordem fraca, isto é, $W \rightarrow 0$, onde a energia de *hopping* Γ_{nj} entre os sítios vizinhos é dominante, uma estrutura ordenada é recuperada. Desta forma, o teorema de Bloch é satisfeito, significando a existência de estados eletrônicos estendidos, ou seja, o pacote de ondas é espalhado no sistema (ASHCROF *et al.*, 1976). De um modo geral, esta regra é válida para sistemas finitos, não importando a dimensão do sistema. Porém, de acordo com a teoria de localização no limite de $N \rightarrow \infty$ (sistemas infinitos), todos estados eletrônicos são localizados, isso em modelos unidimensionais (KRAMER *et al.*, 1993). Por outro lado, quando o nível de desordem é suficientemente forte (desordem prevalecendo sobre o sistema), as funções de onda são intensamente localizadas. Percebe-se portanto, que além da intensidade de desordem, os fenômenos de localização são extremamente relacionados com as dimensões do sistema. Em redes tridimensionais, por exemplo, à temperatura nula, $T = 0$, existe um valor crítico $W_c = 16.5$ que caracteriza o limite da transição de Anderson (ver Fig. 1.4) para um sistema tridimensional com uma distribuição uniforme (HOFSTETTER *et al.*, 1993; MACKINNON *et al.*, 1981; MARKOS, 2006). No intervalo da distribuição de desordem, $W < W_c$, observa-se que as funções de onda eletrônicas são estendidas, e o sistema se comporta como um metal, enquanto para $W > W_c$, as funções de onda ficam localizadas, e o sistema se comporta como um isolante. Para sistemas desordenados bi e unidimensionais, mesmo com grau de desordem infinitesimal, existem estados localizados (KRAMER *et al.*, 1993; MARKOS, 2006), de modo que o sistema se comporta como um isolante, embora para alguns limites da banda de energia E no caso de duas dimensões (2D) seja possível encontrar uma transição metal-isolante (KRAVCHENCO

FIGURA 1.4 – Densidade de estados ($\rho(E)$) do modelo de Anderson tridimensional para uma distribuição desordenada de energias ε_n em caixa (a) e de Gauss (b). Onde são destacados os valores críticos de desordem $W_c = 16.5$ para uma caixa com distribuição de energias desordenadas e $W_c = 6.1$ para uma distribuição de energias desordenadas de Gauss.

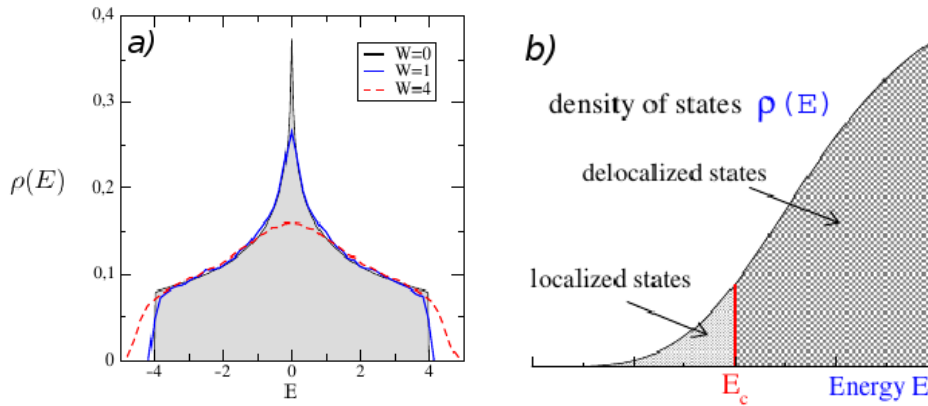


Fonte: Markos, 2006.

et al., 1996; SCHWEITZER *et al.*, 1997).

Em uma abordagem mais detalhada, pode-se utilizar a Eq. 1.6 com a finalidade de escrever a relação de dispersão para o caso sem desordem em um sistema $3D$, isto é, $E = 2\gamma \cos k_x a + 2\gamma \cos k_y a + 2\gamma \cos k_z a$. Daí, a partir da densidade de estados definida por $\rho(E) = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial k}{\partial E}$ (MARKOS, 2006), mostra-se na Fig. 1.4 os efeitos da desordem sobre a localização em um sistema tridimensional. Onde a energia de banda se situa no intervalo $-6\gamma \leq E \leq +6\gamma$ e é simétrica, $\rho(E) = \rho(-E)$. Esta simetria corresponde a um comportamento comum à sistemas com hamiltoniana *tight-binding*, como a Eq. 1.10. Percebe-se na Fig. 1.4, os efeitos de desordem no espectro de energias do modelo de Anderson tridimensional para uma caixa desordenada e para desordem Gaussiana. Como se esperava, a banda de energia se alarga quando a desordem aumenta. Este fato é mais visível para a desordem Gaussiana, por ter maiores flutuações na distribuição aleatória de energias. Os círculos destacados em 1.4, indicam a posição do limite de mobilidade, como é possível ver também na Fig. 1.5(a) para um modelo de Anderson bidimensional desordenado (MARKOS, 2006). A Fig. 1.5 mostra o esquema da separação do espectro de

FIGURA 1.5 – (a) Densidade de estados para um modelo de Anderson bidimensional desordenado. Notar a singularidade típica da densidade de estados no centro da banda de energia para a hamiltoniana *tight-binding* não perturbado ($W = 0$) (MARKOS, 2006). (b) Limite de mobilidade, onde E_c divide os estados localizados na calda da banda de energia e os estados condutores (deslocalizados) em torno de $E = 0$.



Fonte: Markos, 2006.

energia em intervalos localizados e deslocalizados. Onde pode-se notar, para uma dada intensidade da desordem W , que existe uma energia E_c conhecida por *limite de mobilidade*. Este valor de fronteira separa os estados localizados dos estados deslocalizados.

Voltando à hamiltoniana de Anderson 1.10, pode-se obter os autoestados eletrônicos $|\phi\rangle$ de H usando a solução da equação de Schrödinger com um termo aleatório. Neste processo, os autoestados $|\phi\rangle$ são expandidos nas bases dos orbitais $|n\rangle$ ($|\phi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle$), e assim surge a equação de Schrödinger ($H|\phi\rangle = E|\phi\rangle$) para o operador hamiltoniano da

Eq. 1.10 projetado na base $|n\rangle$:

$$Ec_n = \varepsilon_n c_n + \sum_{j \neq n} \Gamma_{nj} c_j. \quad (1.11)$$

Neste tema é possível estabelecer ainda algumas situações limites para as Eqs 1.10 e 1.11. Inicialmente, o elemento estocástico essencial no modelo de Anderson será levado em conta, isto é, a distribuição ε_n . Este termo é muitas vezes particularizado a um simples caso em que as partículas estão dispostas de forma espacial sobre uma rede regular, e todas as integrais de transferência Γ_{nj} em torno dos primeiros vizinhos são consideradas como um valor constante ($\Gamma_{nj} = \Gamma$). Daí, a Eq. 1.11 toma a forma

$$Ec_n = \varepsilon_n c_n + \Gamma \sum_{j=-l}^{j=l} c_{n+j}, \quad (1.12)$$

onde Γ é a integral de transferência efetiva entre os primeiros vizinhos, medida com unidade de energia. Com relação a soma, ela se estende em torno dos $2l$ primeiros vizinhos do sítio n , inclusive para a intensidade de desordem W . No caso de estados estendidos, isto é, na ausência ou com pouca desordem no sistema, a solução é encontrada pelo caso limite da Eq. 1.12. Em um sólido cristalino, $W = 0$, as energias ε_n são idênticas (podendo ser escolhidas como $\varepsilon_n = 0$). Assim, em uma cadeia linear a Eq. 1.12 se reduz a

$$Ec_n = \Gamma(c_{n-1} + c_{n+1}). \quad (1.13)$$

No âmbito da teoria de localização, existem funções exponenciais complexas que obedecem equações semelhantes à Eq. 1.13. Daí, faz-se as constantes c_n terem a forma $c_n = c_0 e^{i(nl)}$. Desta forma, percebe-se que a Eq. 1.13 é satisfeita apenas se $E = 2\Gamma \cos ka$. Esse resultado corresponde a banda cristalina da teoria de Bloch ($-2\Gamma < E < +2\Gamma$), ou ainda, ao aspecto estendido das funções de onda. Portanto, para cadeias unidimensionais a amplitude da banda cristalina é $B = 4\Gamma$. Em geral, para uma rede de dimensão d , esta amplitude toma o valor $B = 2k\Gamma$. Além disso, o caso limite $W \neq 0$ e $\Gamma = 0$ indica a possibilidade de obter orbitais atômicos como solução do problema (estados estendidos), desde que o acoplamento seja removido ($\Gamma = 0$). Por fim, o problema em que Γ e W são não nulos tem maior complexidade, e foi estudado por Anderson através da teoria de perturbação. Porém, ao longo dos anos, uma grande variedade de pesquisas foi desenvolvida a fim de entender os efeitos da presença de desordem W e de um *hopping* diferente de zero (BISWAS *et al.*, 2000; CAIN *et al.*, 1999; EILMES *et al.*, 1998; EILMES *et al.*, 1998; EILMES *et al.*, 2001; EILMES *et al.*, 2004; MILDE *et al.*, 1997; MILDE *et al.*, 2000; MILDE *et al.*, 2000).

1.1.2 Modelo *Tight-Binding* para Sistemas Anisotrópicos e com *Hopping* Aleatório

Römer e seus colaboradores realizaram uma interessante caracterização sobre os aspectos de localização no modelo de Anderson (ANDERSON, 1958). Contemplando em especial um sistema tridimensional ($3D$), os autores conseguiram identificar a tradicional transição de metal-isolante através do aumento de desordem nas energias potenciais locais da rede e certas condições para o *hopping* anisotrópico, causando portanto a localização das funções de ondas (MILDE *et al.*, 1997; MILDE *et al.*, 2000; MILDE *et al.*, 2000). Esta modelagem foi rotulada como Modelo de Anderson Anisotrópico de Localização (um sistema anisotrópico é aquele que possui certas propriedades físicas que variam com a direção), e tem a forma tradicional do modelo de Anderson (ANDERSON, 1958) (ver Eq. 1.10),

$$H = \sum_i^N \epsilon_i |i\rangle \langle i| + \sum_{i \neq j} t_{ij} |i\rangle \langle j|. \quad (1.14)$$

Neste caso, $|i\rangle$ representa os estados eletrônicos ortonormais correspondentes às partículas localizadas no sítio de coordenadas $i = (x, y, z)$ de um rede cúbica regular de dimensão N^3 . As condições de contorno periódicas utilizadas foram construídas fazendo $(x + N, y, z) = (x, y + N, z) = (x, y, z + N) = (x, y, z)$. As energias potenciais locais representadas aqui por ϵ_i são encontradas em uma distribuição uniforme dentro do intervalo $[-W/2, W/2]$, sendo W a intensidade de desordem, ou ainda como amplitude das flutuações da energia potencial. Este modelo é concretizado com a integral de transferência t_{ij} sendo definida apenas para os primeiros vizinhos, e dependendo exclusivamente das direções espaciais, deste modo, t_{ij} pode tomar a forma de qualquer um dos termos t_x, t_y, t_z (MILDE *et al.*, 1997; MILDE *et al.*, 2000; MILDE *et al.*, 2000). Römer *et al.*, investiga em especial o transporte anisotrópico com *planos fracamente acoplados*, isto é, $t_x = t_y = 1$ e $t_z = 1 - \gamma$. Este esquema define a intensidade da anisotropia no *hopping*, com $\gamma \in [0, 1]$. Para $\gamma = 0$, é possível recobrar o caso isotrópico, e $\gamma = 1$ corresponde à N planos independentes ou N^2 redes independentes.

Em geral, os resultados obtidos por estas abordagens (MILDE *et al.*, 1997; MILDE *et al.*, 2000; MILDE *et al.*, 2000) tem mostrado, a partir de cálculos usando o método de matriz de transferência e o método de diagonalização de Lanczos (método iterativo, que reduz matrizes simétricas à forma tridiagonal, em que os autovalores são estimados a cada passo do método, não sendo necessário chegar até o final do mesmo, bastando monitorar a convergência do autovalor até obter a precisão desejada. Este método é rápido e de baixo consumo de memória, comparado com a diagonalização direta), que o valor da desordem crítica W_c (intensidade de desordem limite para a transição localizado-deslocalizado ou de Anderson) corrobora com outras previsões (HOFSTETTER *et al.*, 1993; MACKINNON *et*

al., 1981; MARKOS, 2006) que indicam o valor $W_c = 16.5$ para sistemas $3D$, quando o parâmetro de anisotropia tem a tendência $\gamma \rightarrow 1$.

Sobre sistemas com os elementos de *hopping* t_{ij} da Eq. 1.14 desordenados, verifica-se na literatura da área duas formas de atribuir desordem a t_{ij} : 1 - valores escolhidos aleatoriamente dentro do intervalo $[c-w/2, c+w/2]$, em que c representa o centro da banda e w é a extensão da distribuição de desordem fora da diagonal (CAIN *et al.*, 1999; EILMES *et al.*, 1998; EILMES *et al.*, 1998; BISWAS *et al.*, 2000). 2 - os elementos fora da diagonal são encontrados em três tipos de distribuições diferentes, $P(t_{ij}) = 1/w$ se $|t_{ij} - c| \leq w/2$ ou $= 0$ para outros valores (distribuição em um cubo), $P(t_{ij}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp[-(t_{ij}^2)/2\sigma^2]$ (distribuição Gaussiana), e $P(\ln t_{ij}/t_0) = 1/w$ se $|\ln t_{ij}/t_0| \leq w/2$ ou $= 0$ para outros valores (distribuição em um cubo para $\ln t_{ij}$) (EILMES *et al.*, 2004; EILMES *et al.*, 2001). Nestes trabalhos, os autores tem considerado uma distribuição logarítmica $\ln t$ e utilizado o parâmetro w como a intensidade de desordem no termo fora da diagonal. Em ambas as abordagens citadas, os autores investigaram sistemas bidimensionais ($2D$). Para tanto, os pesquisadores usaram o método de matriz de transferência para investigar os expoentes críticos de transições metal-isolante, o limite de mobilidade E_c , o diagrama de fase energia-desordem, os aspectos de localização através do comprimento de localização e o método de diagonalização a fim de investigar o número de participação e a densidade de estados (DOS). Estas duas últimas são estudadas com a finalidade de corroborar os resultados com os obtidos usando a medida do comprimento de localização, e assim identificar os aspectos de localização, bem como, a transição metal-isolante. Além destas medidas, foram estudadas as propriedades de escala em tamanho finito com a intenção de estimar os expoentes críticos de transições metal-isolante (BISWAS *et al.*, 2000; CAIN *et al.*, 1999; EILMES *et al.*, 2004; EILMES *et al.*, 1998; EILMES *et al.*, 1998; EILMES *et al.*, 2001).

Contudo, percebe-se que o termo de *hopping* não nulo possui importantes efeitos sobre os aspectos de localização eletrônica em sistemas sólidos. Tal relevância pode ser comparada à relação entre a extensão de desordem e a energia *on-site* sobre a teoria de localização de Anderson. Na seção seguinte, será descrita a chamada *Teoria de Escala*, que foi incorporada à teoria de localização de Anderson com o objetivo de obter um outro parâmetro de limite crítico para a transição de Anderson

1.2 Teoria de Escala

A teoria de escala, foi originalmente desenvolvida por (ABRAHAMS *et al.*, 1979) pretendendo encontrar a dependência da transição de Anderson com a dimensão. A hipótese essencial da teoria de escala é que próximo da região de transição entre estados localizados e estendidos em temperatura $T = 0$, existe apenas uma variável de escala relevante, a condutância generalizada g , que é suficiente para descrever o comportamento

crítico da condutividade DC , σ_{DC} (no regime metálico) e do comprimento de localização, λ (no regime isolante). Fisicamente, isso é equivalente a afirmar de que próximo da transição não faz sentido considerar distinções entre os mecanismos de localização. Baseando-se nestes princípios, Thouless, foi capaz de aplicar uma reformulação sobre o modelo de Anderson, para tanto o mesmo idealizou a chamada *Teoria de Escala* (THOULESS, 1974).

Agora que as quantidades de interesse dentro da teoria de escala são conhecidas, este estudo deve prosseguir analisando os seus principais efeitos sobre a teoria de localização. Sabendo que a sensibilidade dos autoestados eletrônicos para as condições de contorno provêm um novo critério para a localização. Levando em consideração um sistema desordenado de dimensão d e tamanho L . Pode-se então, calcular todas as autoenergias do sistema com condições de contorno periódicas,

$$\Psi(x + L) = \psi(x), \quad (1.15)$$

e daí, repetir o mesmo cálculo com as condições de contorno *anti-periódicas*

$$\Psi(x + L) = -\psi(x). \quad (1.16)$$

Desta forma, uma variação nas condições de contorno muda o espectro de autoenergias,

$$E_n \rightarrow E_n + \delta E_n, \quad (1.17)$$

onde δE_n é a variação das autoenergias vinculada às mudanças nas condições de contorno. Percebe-se portanto, que δE_n depende do caráter de localização dos autoestados eletrônicos.

De acordo com Markos, 2006, pode-se construir as seguintes suposições:

i - o elétron no n -ésimo autoestado é deslocalizado. Logo, sua função de onda se propaga no sistema. Então, espera-se que a mudança das condições de contorno está fortemente relacionada com a posição das autoenergias E_n , e então, δE_n pode se comparar ou até mesmo ser maior que o espaçamento típico entre duas autoenergias vizinhas. Sendo a função de onda deslocalizada para todo a dimensão do sistema, δE não pode diminuir quando L diminuir.

ii - O segundo caso é quando o elétron se encontra localizado em uma certa região dentro do sistema, então, sua função de onda decresce exponencialmente como uma função da distância a partir do centro do sistema. Logo, se o tamanho do sistema é maior que o comprimento de localização λ , os autoestados localizados são quase imperceptíveis em relação às bordas do sistema. Portanto, δE_n diminui exponencialmente quando o tamanho do sistema diminui, ou seja, $\delta E \propto \exp(-L/\lambda)$ (MARKOS, 2006).

Para estimar qualitativamente as mudanças nas condições de contorno, um pequeno

intervalo de energias deverá ser considerado, isto é, $E \pm \delta$, e assim, obtem-se o parâmetro

$$g_T(E) = \frac{e^2 \langle \delta E \rangle}{h \Delta E}, \quad (1.18)$$

onde ΔE é a diferença específica entre duas autoenergias vizinhas,

$$\Delta E = \frac{1}{L^d \rho(E)}, \quad (1.19)$$

e $\langle \delta E \rangle$ é uma mudança específica de autoenergias situada no intervalo de energia $E \pm \delta$. Desta forma, dependendo do formato com que g se apresenta, é possível identificar o regime metálico do isolante.

Foi mostrado por (EDWARDS et al., 1972) que se a energia E pertencer a parte metálica do espectro, então

$$g_T = \sigma L^{d-2} \quad \text{metal}, \quad (1.20)$$

onde σ é a condutividade do sistema. Quando as autoenergias em torno da energia E estão localizadas, g_T diminui exponencialmente com o tamanho do sistema,

$$g_T \sim e^{-L/\lambda} \quad \text{isolante}. \quad (1.21)$$

A quantidade g_T que foi representada nas Eqs. 1.20 e 1.21 é chamada de condutância de Thouless. Esta quantidade está associada a uma importante regra na formulação da teoria de escala de localização (ABRAHAMS et al., 1979). Já o valor $\langle \delta E \rangle$, é conhecido por energia de Thouless (E_T). Se compararmos a Eq. 1.20 e 1.21 com a expressão para a condutividade metálica $\sigma = e^2 D \rho(E)$, obtem-se que

$$E_T = \frac{hD}{L^2}. \quad (1.22)$$

Tem-se por sua vez que o tempo de Thouless é dado por

$$\tau_T = h/E_T = L^2/D, \quad (1.23)$$

este parâmetro indica o tempo que o elétron precisa para se difundir de uma das extremidades do sistema até a extremidade oposta, e D é a constante de difusão. A densidade de estados $\rho(E)$ pode ser calculada por $\rho(E) = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial k}{\partial E}$ (MARKOS, 2006). Onde a constante de difusão pode ser numericamente obtida resolvendo a equação de Schrödinger $i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = H \Psi(\vec{r}, t)$, com H sendo a hamiltoniana de Anderson. Este procedimento pode ser repetido para calcular a amplitude do pacote de ondas,

$$\langle r^2(t) \rangle = \int d\vec{r} \Psi^*(\vec{r}, t) r^2 \Psi(\vec{r}, t), \quad (1.24)$$

em um tempo t . Quando a intensidade da desordem é pequena, o elétron se difunde a partir do centro do sistema, e então, é possível encontrar

$$\langle r^2 \rangle = 2Dt. \quad (1.25)$$

No caso de desordem forte, $\langle r^2 \rangle$ converge para uma quantidade independente do tempo, quando o elétron está localizado. De acordo com (MARKOS, 2006), a quantidade dependente do tempo $\langle r^2 \rangle$ varia com a intensidade de desordem no sistema. E neste caso, a constante de difusão D é obtida a partir da inclinação linear de $\langle r^2 \rangle$ versus t . Daí, se a densidade de estados $\rho(E)$ é conhecida, é possível redefinir a condutância como:

$$g = \sigma = \frac{e^2 h D \rho}{h} = e^2 D \rho. \quad (1.26)$$

A transição metal-isolante tem aspectos semelhantes à transição de fase na mecânica estatística. Daí, é importante desenvolver uma teoria semelhante a teoria de grupo de renormalização de segunda ordem nas transições de fase. Portanto, para determinar o parâmetro de ordem relevante neste cenário, nós partimos da condutância de Thouless $g = g_T$. E neste caso, são definidos os regimes metálico 1.20 e localizado 1.21. Como sequência, a análise da sensibilidade para as condições de contorno nos informa como a condutância g se comporta quando o tamanho L do sistema aumenta.

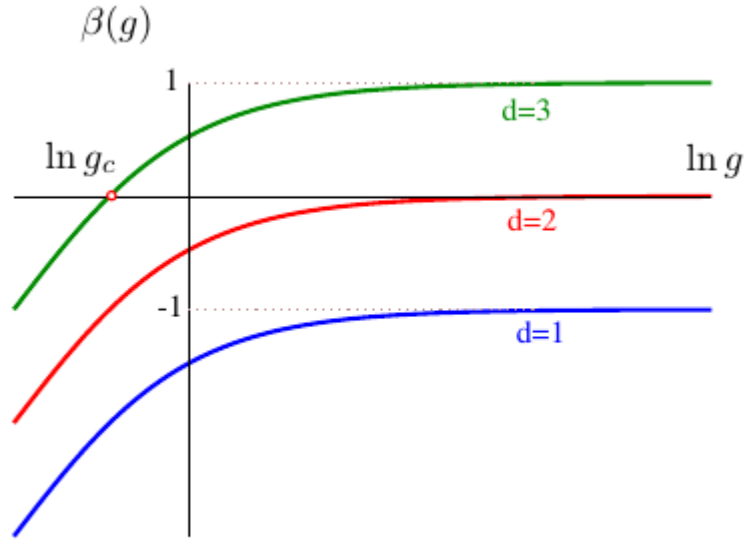
De acordo com (ABRAHAMS *et al.*, 1979), a principal suposição que deve ser compreendida é que para um sistema suficientemente grande, a função de dependência com a condutância é dada pela taxa de variação com L :

$$\frac{\partial \ln g}{\partial \ln L} = \beta(g). \quad (1.27)$$

Quando um sistema com dimensões L suficientemente grandes é considerado, é possível derivar algumas consequências com relação à Eq. 1.27 acima. A primeira delas admite a forma da função $\beta(g)$ como sendo desconhecida. Porém, através de um processo de derivação é possível encontrar seus limites para $g \rightarrow \infty$ e $g \rightarrow 0$. E como devemos fazer isso? Por simplicidade, este processo deve ser limitado apenas à simetria ortogonal, e daí, temos o parâmetro de simetria $\beta(g) = 1$. No limite de grande condutância, pode-se usar a L -dependência da condutância. O termo principal da condutância se comporta como $g_T = \sigma L^{d-2}$, de acordo com a Eq. 1.20 para os metais. Daí, se usarmos esta expressão na Eq. 1.27, tem-se

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \beta(g) = d - 2. \quad (1.28)$$

FIGURA 1.6 – Comportamento qualitativo da $\beta(g)$ para sistemas de $d = 1, 2, 3$ dimensões na teoria de escala idealizada por (ABRAHAMS *et al.*, 1979).



Fonte: Markos, 2006.

Portanto,

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

Como é verificado na Figura 1.6, em g pequeno, isto é, no limite de baixo acoplamento e forte desordem, o teorema de Anderson prevê que os estados eletrônicos são localizados e decaem exponencialmente com a distância. Dentro de um volume de dimensão L , a amplitude da função de onda de um elétron localizado dentro da caixa é da ordem de $e^{-\gamma L}$, como é possível ver na Eq. 1.21, onde γ é o expoente de Lyapunov (inverso do comprimento de localização λ , $\gamma = 1/\lambda$). O acoplamento entre sistemas também tem decaimento exponencial ($e^{-\gamma L}$), de forma que $g(L) \propto e^{-\gamma L}$. Através da Eq. 1.27, obtem-se,

$$\lim_{g \rightarrow 0} \beta(g) = \ln g. \quad (1.29)$$

Portanto, $\beta(g)$ se aproxima de $-\infty$ quando g tende a zero, sem depender da dimensão. O fato de que $\beta(g)$ varia de forma monotônica entre os limites $g \rightarrow \infty$ e $g \rightarrow 0$ como foi descrito em (de MOURA, 2003), é uma indicativa do comportamento qualitativo da Fig. 1.6. Onde se deve ressaltar que em $d = 3$ existem dois comportamentos: para valores menores que um certo g_c , ($\beta(g) < 0$) as curvas indicam que a condutância generalizada g diminui quando L cresce; acima de g_c ($\beta(g) > 0$) o comportamento é contrário, g cresce quando L cresce. O ponto no diagrama ($g_c, \beta(g_c) = 0$) é chamado ponto fixo instável. Por outro lado, para $d = 1$ e $d = 2$, o diagrama indica que g sempre diminui quando L cresce.

Esta diagramação indica a dependência da transição de Anderson com a dimensão: Em $1d$ e $2d$ não existe transição metal-isolante, com a condutividade indo sempre a zero quando $L \rightarrow \infty$; em $3d$ existe uma transição metal-isolante. O comportamento crítico próximo desta transição em $3d$ também foi obtido através da teoria de escala (KRAMER *et al.*, 1993). Em analogia com teorias sobre transição de fase de segunda ordem, a condutividade σ_{DC} e o comprimento de localização λ , próximos da energia crítica de transição (*mobility edge*) tem um comportamento tipo lei de potência:

$$\sigma_{DC} \propto (E - E_C)^s, \quad (1.30)$$

$$\lambda \propto (E - E_C)^{-v}. \quad (1.31)$$

Os valores dos expoentes $s = v = 1$ foram obtidos numericamente usando uma expansão em $d + \epsilon$ por Wegner (WEGNER, 1976) e também por técnicas de expansão diagramática realizadas por Vollhard e Wölfle (KRAMER *et al.*, 1993). Há alguns anos, considerações sistemáticas de variáveis que pareciam ser irrelevantes e correlações não-lineares na teoria de escala tem refinado os resultados da teoria de escala, obtendo o expoente crítico com maior precisão $v \approx 1.57$ (SLEVIN *et al.*, 1999; SLEVIN *et al.*, 2000; SLEVIN *et al.*, 2001; de QUEIROZ, 2001).

Quando a temática é transição metal-isolante na presença de desordem, é possível encontrar muitos experimentos na literatura da área que observam este fenômeno. Entre eles, destacam-se os trabalhos de (KRAMER *et al.*, 1993; LEE *et al.*, 1985; ALTSHULER *et al.*, 1988; BELITZ *et al.*, 1994; WAFFENSCHMIDT *et al.*, 1999; BOGDANOVICH *et al.*, 1999), que realizaram experimentos em silício dopado com fósforo ou bário. Nesses experimentos a desordem é proveniente das posições aleatórias dos átomos dopantes. A intensidade ou distribuição de probabilidade da desordem pode ser modificada variando a concentração de dopantes N_p . Em ambos os casos a distância entre os dopantes muda, modificando assim a intensidade de desordem W . Comparando os resultados previstos na teoria de escala para o expoente de condutividade (Eq. 1.30) com os resultados experimentais (ZALLEN, 1983) para o sistema composto por *SiP*, foi encontrado que enquanto o ajuste linear para $s = 1$ é melhor que o valor de percolação $s = 1.65$ para o valor observado de $s = 0.5$, ele ainda corresponde a uma transição isolante-metal que é muito menos acentuada que a observada no experimento. Durante muitos anos foi sugerido que a existência de dois tipos de materiais: semicondutores não compensados (com $v = 0.5$) e semicondutores compensados (isto é, materiais construídos a partir de dopagem em camadas), e ainda materiais amorfos com $v = 1$ (KRAMER *et al.*, 1993; BELITZ *et al.*, 1994). Recentemente, foi observado um expoente $v = 1$ para o silício dopado com fósforo não compensado (*SiP*) (WAFFENSCHMIDT *et al.*, 1999) e $v = 1.6$ para silício dopado com Bário (*SiB*) (BOGDANOVICH *et al.*, 1999).

Assim, não só a classificação do tipo do material, como também o valor do expoente são questões ainda não resolvidas. Geralmente, a diferença no expoente vêm sendo atribuída à presença de outros efeitos no experimento, como por exemplo, a interação Coulombiana entre os elétrons (WAFFENSCHMIDT *et al.*, 1999). Nos materiais sólidos reais os elétrons possuem movimentos correlacionados com seus vizinhos, de forma a evitar configurações muito energéticas; correlações essas, que são responsáveis pela transição de Mott (MOTT *et al.*, 1971; MOTT, 1982; BELITZ *et al.*, 1994). Propriedades de localização como um efeito de interferência vêm sendo observadas em escala macroscópica através de experimentos de propagação de ondas eletromagnéticas ou ondas de água (KRAMER *et al.*, 1993). O padrão na água pode ser completamente ou parcialmente restrito a uma pequena região da superfície dependendo se os espalhadores são periódicos ou aleatórios. Destacam-se também o impacto que as ideias e conceitos descritos acima causaram no desenvolvimento da teoria quântica de transporte em nanoestruturas (FERRY *et al.*, 2009).

1.3 Desordem Correlacionada

O teorema de Bloch prevê a periodicidade das funções de onda eletrônicas em uma rede cristalina, indicando portanto, que as partículas que estruturam esta tal rede tenham características idênticas (energia potencial, a energia de interação entre as partículas vizinhas, massa das partículas, e etc.), isto é, uma rede sem imperfeições (ASHCROF *et al.*, 1976; GROSSO *et al.*, 2005; KITTEL, 2005). Porém, esta regra é válida apenas para sistemas com certo nível de pureza, e se fossem colocadas irregularidades tais quais a natureza apresenta, o que iria acontecer com os estados eletrônicos neste sistema imperfeito? Nesta linha de pesquisa, o material que conduz energia é classificado como um metal, e se as impurezas forem suficientes para impedir o fluxo de cargas elétricas, o material é tido como um isolante. Neste tema, vale ressaltar a conhecida teoria de localização de Anderson (ANDERSON, 1958) para sistemas desordenados. Anderson mostrou que existem estados localizados devido a presença de desordem. Algumas décadas depois, o estudo de Anderson foi especificado para uma dimensão, indicando que todos os estados são localizados para qualquer quantidade de desordem (MOTT *et al.*, 1961). Como vimos na seção 1.2, os aspectos de localização para sistemas $1d$ foram levados à altas dimensões. Neste caso, a teoria responsável por este feito é chamada de teoria de escala, elaborada originalmente por (ABRAHAMS *et al.*, 1979). Sabendo da natureza física dos materiais sólidos, entende-se que os sistemas bidimensionais e tridimensionais devem ser explorados com mais detalhes com respeito a suas características de localização, em especial, para a importante transição metal-isolante prevista pela teoria de escala (ABRAHAMS *et al.*, 1979). Em vista desta necessidade, vários pesquisadores (ISHII, 1973; KRAMER *et al.*, 1993; MACKINNON *et al.*, 1981; MARKOS, 2006), tem se interessado por investigar analiticamente, os estados eletrônicos localizados em sistemas $1d$ (ISHII, 1973), bem como, estudos numéricos em duas (KRAMER

et al., 1993; MACKINNON *et al.*, 1981; MARKOS, 2006) e três dimensões (MARKOS, 2006) mostrando a ausência de estados estendidos em certas quantidades de desordem.

Com o surgimento de novas investigações numéricas-analíticas, a comunidade científica percebeu que a adição de correlações em sistemas desordenados pode fazer com que nem todos os estados sejam localizados, e este fato atraiu grande interesse pelos físicos da matéria condensada (DUNLAP *et al.*, 1990; EVANGELOU *et al.*, 1993; FLORES, 1989; SÁNCHEZ *et al.*, 1994; SIL *et al.*, 1993). Uma das mais importantes descobertas indica que a presença de estados estendidos podem alterar as propriedades de condução em um sólido (FLORES, 1989). Pode-se afirmar portanto, que este resultado é um grande motivador na possibilidade de incluir correlações em sistemas com desordem. Segundo o modelo de Anderson (ANDERSON, 1958), a desordem na digonal do operador hamiltoniano promove a localização dos autoestados eletrônicos, no entanto, a desordem nos termos fora da diagonal do operador hamiltoniano, aparentemente, pode indicar a presença de um certo nível de estados estendidos (SIL *et al.*, 1993). Com respeito às distribuições correlacionadas, é importante colocar em evidência o modelo com correlações tipo dímero (SÁNCHEZ *et al.*, 1994). Neste trabalho, os autores previram o surgimento de deslocalizações em sistemas com impurezas infinitesimais. As impurezas tipo dímero, porém, podem mostrar as mesmas propriedades de localização que sistemas com um forte grau de desordem, que por sua vez, indicam que a presença de estados estendidos está associada ao grau de desordem (EVANGELOU *et al.*, 1993)

A transição localizado-deslocalizado é diretamente relacionada à transição metal-isolante, de tal modo que estudos utilizando modelos com aproximação *tight-binding* unidimensionais e potenciais incomensuráveis (potenciais com uma grande distribuição) (GRINIASTY *et al.*, 1988; DAS SARMA *et al.*, 1988; THOULESS, 1988) mostram a presença de uma transição metal-isolante. Um exemplo, é o potencial da forma $\epsilon_i = V \cos(k|i|^\eta)$ onde $k = 2\pi\alpha$ e α é um número real entre 0 e 1. Esta caracterização fornece importantes aspectos com relação à formação de estados eletrônicos estendidos e localizados para certas configurações do potencial *on-site* ϵ_i . Além disso, é importante destacar os casos onde se investiga uma hamiltoniana de Anderson unidimensional com potencial *on-site* e termo de *hopping* desordenados podendo indicar a presença de uma energia crítica E_C responsável pelo espalhamento do pacote de ondas (aspecto deslocalizado) (FLORES, 1989; FLORES *et al.*, 1993). Este fato foi percebido devido a presença de correlações entre as energias dos sítios e os termos de *hopping*. Porém, se considerarmos desordem apenas no termo de *hopping*, os resultados induzem uma generalização na energia crítica de transmissão.

Na hamiltoniana de Anderson unidimensional para uma liga binária (DUNLAP *et al.*, 1990), ou seja, uma liga com dois tipos distintos de átomos, as energias dos sítios no sistema podem ser ϵ_A ou ϵ_B com probabilidade p e $1-p$ de ocorrerem, respectivamente. E com a regra de que os sítios com energia ϵ_A sempre apareçam em pares. Desta forma, para cer-

tas condições, os autores verificaram que o sistema apresenta uma energia ressonante para a função de onda deslocalizada. Por outro lado, o trabalho realizado por (BOVIER, 1992), estudando o modelo com aproximações *tight-binding* unidimensional com distribuição de desordem tipo dímeros, mostrou através da teoria de perturbação que o comportamento da densidade de estados e do coeficiente de Lyapunov apontavam resultados semelhantes. A partir daí, surgiram várias pesquisas envolvendo correlações tipo dímeros, sempre tendo os mesmos resultados: Divergência do comprimento de localização em algumas energias críticas (PHILLIPS *et al.*, 1991; EVANGELOU *et al.*, 1992; FLORES *et al.*, 1993; HILKE, 1994; LAVARDA *et al.*, 1994; HEINRICHS, 1995). Vale ressaltar, que a diferença entre o modelo de Anderson original e os modelos dímeros é que existem correlações de curto alcance nas energias dos sítios. Analiticamente, é possível demonstrar a existência das energias ressonantes em cadeias binárias (HILKE, 1994) através do formalismo de matriz de transferência. Esta importante técnica consiste em considerar a aproximação *tight-binding* unidimensional com desordem apenas na diagonal, tal qual foi mostrado na Eq. 1.10, sendo que neste caso, o termo de *hopping* é constante. A partir de uma sofisticada análise é possível encontrar que a função de onda seja dada por $\Psi_{n+1} = \prod_{i=0}^n T_i \Psi_0$, onde T_i é a chamada matriz de transferência e Ψ_0 representa a condição inicial, a quantidade mais relevante para esta técnica numérica. Este processo numérico resulta na medida do chamado comprimento de localização λ , e é regulamente definida por

$$\lambda^{-1} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln |\varphi_n|, \quad (1.32)$$

onde φ_n representa as constantes probabilidade (autovalores) da função.

Na abordagem realizada por (CRESSONI *et al.*, 1996), os autores estudaram cadeias com correlações térmicas (cadeias recozidas), onde a correlação entre as energias dos sítios é dada por $\langle \epsilon_i \epsilon_j \rangle \propto e^{-|i-j|/\zeta}$. Os principais resultados mostram que o comprimento de localização cresce com o comprimento de correlação ζ , mas todos os estados permanecem localizados dada a ausência de ressonâncias típicas. Em modelos deste tipo, é comum o fato de que as correlações de curto alcance modifiquem as propriedades eletrônicas do sistema. Com respeito a estas modificações, existem vários processos estocásticos que resultam em sequências aleatórias com correlações de longo alcance (PACZUSKI *et al.*, 1961). As distribuições de desordem correlacionada utilizadas nestes casos, geralmente, tem uma densidade espectral tipo $S(k) \propto k^{-\alpha}$, onde $S(k)$ é a transformada de Fourier da função de correlação de dois pontos $\langle \epsilon_i \epsilon_j \rangle$ e k é o vetor de onda relacionado com a propagação de ondas na rede. Efeitos da presença de correlações de longo alcance em sistemas desordenados foram também estudados por (VARIABLE, 1994), onde se estudou um gás de elétrons de dimensão d e temperatura $T = 0$, na presença de potenciais aleatórios com correlações espaciais de longo alcance que decaem com a separação $|x|$. Estando portando, de acordo com uma lei do tipo $|x|^{-d-\sigma}$, onde σ aqui é um parâmetro

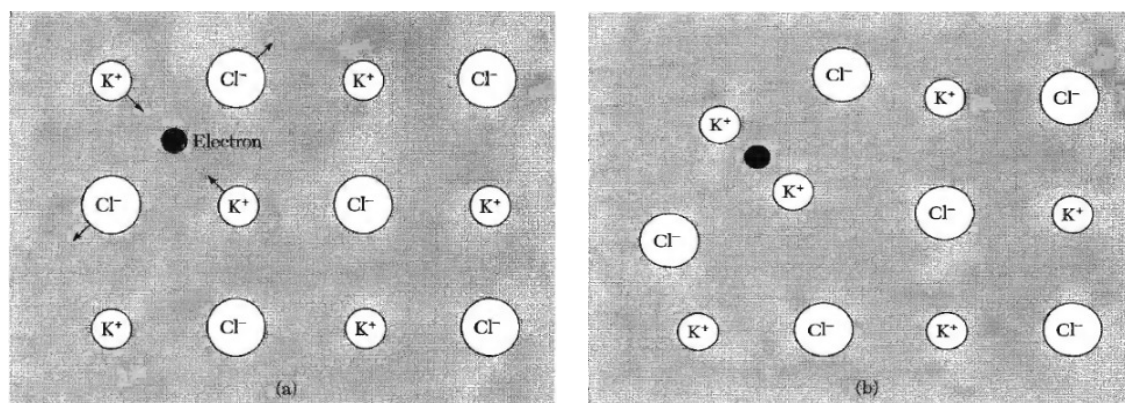
que controla a correlação do sistema. Usando um formalismo Lagrangeano e a teoria de perturbação foi demonstrada a existência de transição de Anderson em altas dimensões ($d > 4$).

Recentemente, estudos utilizando correlações de curto alcance (SALES *et al.*, 2012; SANTOS *et al.*, 2014) apontaram importantes efeitos sobre as propriedades de localização. Deve-se exaltar por exemplo, os efeitos da intensidade de desordem sobre o comprimento de localização, bem como, a relação entre o comprimento de localização e o comprimento de correlação (SALES *et al.*, 2012). Por outro lado, se causarmos um certo alongamento na desordem correlacionada exponencial de curto-alcance, além de novos efeitos sobre o comprimento de localização, é possível mostrar que à medida que a distribuição de desordem aumenta, o espectro de absorção ótica fica mais intenso (SANTOS *et al.*, 2014). Estes resultados são mostrados na íntegra no Anexo . As correlações de longo alcance, por sua vez, são também de grande importância, onde é possível observar estados estendidos (ESMAILPOUR *et al.*, 2007; de MOURA, 2010; de MOURA *et al.*, 2004; de MOURA *et al.*, 2003; de MOURA *et al.*, 2008; de MOURA *et al.*, 1998; LAZO *et al.*, 2010; LAZO *et al.*, 2011; SALES *et al.*, 2012). Neste caso, vale ressaltar as abordagens realizadas por Moura e colaboradores, onde a desordem correlacionada de longo alcance é gerada através da expressão $g_n = C_\alpha(N) \sum_{k=1}^{N/2} (1/k^{\alpha/2}) \cos[((2\pi nk)/N) + \phi_k]$. Onde g_n pode assumir diferentes funções (na geração do potencial *on-site*, na construção da distribuição de massas ou mesmo das constantes de mola). ϕ_k por sua vez, são $N/2$ fases aleatórias uniformemente distribuídas dentro do intervalo $[0, 2\pi]$, e C_α é a constante de normalização. A partir deste esquema de desordem correlacionada, notou-se a presença do comportamento estendido para $\alpha > 2.0$ (de MOURA, 2010; de MOURA *et al.*, 2004; de MOURA *et al.*, 2003; de MOURA *et al.*, 2008; de MOURA *et al.*, 1998). Por outro lado, utilizando a desordem correlacionada de longo alcance Ornstein-Uhlenbeck (ESMAILPOUR *et al.*, 2007; LAZO *et al.*, 2010; LAZO *et al.*, 2011; SALES *et al.*, 2012), foi mostrado a presença de uma possível transição metal-isolante para fortes correlações (ESMAILPOUR *et al.*, 2007; LAZO *et al.*, 2010; LAZO *et al.*, 2011). No entanto, em uma análise mais detalhada o trabalho de (SALES *et al.*, 2012) mostrou que, o que parecia ser uma transição metal-isolante é na verdade uma transição ordem-desordem devido ao aumento no parâmetro que controla a desordem. A seguir, são descritos detalhes sobre uma análise em torno dos efeitos da interação entre os modos vibracionais da rede e a dinâmica eletrônica.

1.4 Interação elétron-fônon

Uma das consequências mais evidentes da interação elétron-fônon está na dependência da resistividade elétrica com a temperatura (KITTEL, 2005). Essa dependência ocorre porque a existência de fônons promove o espalhamento de elétrons, de modo que,

o aumento de temperatura acarreta em um crescimento do número de fônons, e assim, mais elétrons são espalhados. Portanto, o nível mais alto de espalhamento dos elétrons intensifica a resistividade elétrica. De acordo com Kittel (2005), acima da temperatura de Debye o número de fônons térmicos (fônons gerados pelo aumento de temperatura) é ligeiramente proporcional à temperatura absoluta, de modo que a resistividade cresce com a temperatura absoluta em qualquer metal razoavelmente puro nesta escala de temperatura. Porém, a interação elétron-fônon não tem influência apenas na dependência entre resistividade elétrica e temperatura. De acordo com (KITTEL, 2005), um pequeno aumento na massa do elétron, que ocorre, possivelmente, porque o elétron arrasta os núcleos de íons pesados junto com ele. A literatura da área (KITTEL, 2005; ECONOMOU et al., 1993; KOPIDAKIS et al., 1994; KOPIDAKIS et al., 1995; WELLEIN et al., 1996; FEHSKE et al., 2000; MISHCHENKO et al., 2004), geralmente, associa a presença da interação elétron-fônon com uma quasi-partícula intensamente investigada em trabalhos sobre física da matéria condensada. Segundo Kittel (2005), em um isolante, a combinação do elétron e sua região de deformação é conhecida como um *polaron*, ver Fig. 1.7. Esse efeito é maior em cristais iônicos por causa da forte interação coulombiana entre íons e elétrons. Já em cristais covalentes o efeito é fraco, porque os átomos neutros tem apenas uma interação fraca com os elétrons.

FIGURA 1.7 – Formação do *polaron*.

Fonte: Kittel, 2005.

Quando a intensidade do acoplamento elétron-fônon é modificada, ganha-se a possibilidade de caracterizar um sistema como desacoplado (intensidade de acoplamento nula). Onde neste caso, não ocorre a formação do *polaron*. Ou ainda, é chamado de sistema acoplado, onde o acoplamento possibilita a formação do *polaron* (interação do elétron com os íons da rede). Diante deste problema surge o seguinte questionamento: é possível medir o grau de intensidade da interação elétron-fônon? De acordo com (KITTEL, 2005), a intensidade de acoplamento elétron-rede pode ser mensurada através da constante de

acoplamento adimensional α dada pela equação,

$$\alpha = 2 \left(\frac{\text{Energia de deformação}}{\hbar\omega_L} \right), \quad (1.33)$$

onde ω_L é a frequência de vibração óptica longitudinal no limite que o vetor de onda k vai a zero ($k \rightarrow 0$). E o termo entre parênteses da 1.33, isto é, a *Energia de deformação* é responsável por caracterizar o número de fônons que envolvem um elétron em um cristal.

De acordo com (ASHCROF *et al.*, 1976), quando um elétron é introduzido na banda de condução de um cristal iônico perfeito, ele pode ser energeticamente favorável para que possa ter movimento a partir de um nível espacialmente localizado, acompanhado por uma deformação local no arranjo iônico previamente localizado (processo de polarização da rede), que serve para identificar seu campo e reduzir a sua energia eletrostática. Neste fenômeno (elétron induzindo um maior nível de polarização na rede), o elétron passa a ter mais mobilidade do que se fossem colocados defeitos (ASHCROF *et al.*, 1976). De um modo geral, este fenômeno não é tido como um problema sem solução, mas sim como um importante desafio na teoria de mobilidade dos elétrons em cristais espacialmente iônicos. As teorias de *polarons* são bastante abrangentes, visto que, existe a necessidade de considerarmos a dinâmica de um elétron que está fortemente ligado aos graus de liberdade iônicos (KUPER *et al.*, 1963). Na seção seguinte, este estudo de revisão teórica deve destacar os principais modelos em torno desta temática, acoplamento elétron-fônon, bem como, as características da interação elétron-rede atreladas aos aspectos de redes com potencial não-linear e ondas SAW.

1.4.1 Modelos com acoplamento elétron-rede

De acordo com Anderson (1958), um pacote de ondas eletrônico se propaga em pelo menos duas formas diferentes: espalha-se em a uma pequena região restrita da rede em virtude de alguma irregularidade topológica na mesma, onde é possível identificar que as ondas ficam *localizadas*, e a possibilidade de que este conjunto de ondas se alargue ao longo da maior parte da rede ou esteja completamente espalhado na mesma, onde é tomada a hipótese de que a rede tenha uma estrutura ordenada, ou ainda por algum ajuste que torna a rede pouco “desorganizada”. Infere-se a este comportamento que a função de onda tem comportamento *estendido*. Até o momento, tem-se descrito aspectos sobre a propagação do elétron de forma solitária, então, o que ocorreria se de algum modo o elétron fosse acoplado a uma outra partícula ou quasi-partícula? Neste caso, o sistema teria interação, como por exemplo: um sistema com interação elétron-elétron (BRITO *et al.*, 2007; DIAS *et al.*, 2010; DIAS *et al.*, 2012; DIAS *et al.*, 2014; PEIXOTO *et al.*, 2014) e sistemas com interação elétron-fônon (DAVYDOV, 1979; ECONOMOU *et al.*, 1993; KOPIDAKIS *et al.*, 1994; KOPIDA-

KIS *et al.*, 1995; SU-SCHRIEFFER-HEEGER, 1979; VELARDE *et al.*, 2005; CHETVERIKOV *et al.*, 2006; HENNIG *et al.*, 2006; VELARDE *et al.*, 2006; HENNIG *et al.*, 2007; HENNIG *et al.*, 2008; VELARDE *et al.*, 2008; VELARDE, 2010; VELARDE *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2013; de MOURA, 2013; VELARDE *et al.*, 2014). Além destes dois tipos de interação citados acima, é importante destacar outros tipos de interação, como a interação mágnon-fônon, isto é, a interação de ondas de *spin* com a rede. Durante este trabalho serão abordados tanto este problema como também o caso onde a interação elétron-rede está presente. A seguir, serão apresentados inicialmente, algumas discussões sobre o tipo de acoplamento elétron-rede proposto por Davydov (1979), e o modelo de aproximação SSH (SU-SCHRIEFFER-HEEGER, 1979).

- *Modelo de acoplamento elétron-rede segundo Davydov.*

Originalmente, o modelo proposto por Davydov (1979) tinha como objetivo investigar a evolução temporal de *solitons* em sistemas moleculares unidimensionais. Para tanto ele utilizou um detalhado tratamento analítico e numérico em modelos baseados na equação de Schrödinger não-linear, a fim de entender as interações de uma excitação intramolecular (éxciton) com as vibrações da rede (DAVYDOV, 1979; DAVYDOV, 1981; DAVYDOV *et al.*, 1983). Em seguida, foi considerado que as interações com as vibrações da rede ocorressem do mesmo modo, daí, no lugar de éxcitons o resultado seriam elétrons. De acordo com estes conceitos, Economou *et al* (ECONOMOU *et al.*, 1993; KOPIDAKIS *et al.*, 1994; KOPIDAKIS *et al.*, 1995) destacou a possibilidade de encontrar a evolução temporal do pacote de ondas em modelos com acoplamento elétron-rede através de sistemas não-lineares de equações diferenciais, onde se deve estudar a dependência temporal de um sistema combinado de um elétron descrito por um modelo *tight-binding* interagindo com graus de liberdade vibracionais em uma rede unidimensional. Este modelo consiste basicamente em introduzir a interação elétron-rede na diagonal da matriz hamiltoniana total H , esta hamiltoniana envolve a parte eletrônica H_e , a parte da rede H_r e a parte do acoplamento elétron-rede H_{e-r} , isto é, $H = H_e + H_r + H_{e-r}$. Esses termos estão correspondentemente detalhados a seguir:

$$H_e = \sum_{n=1}^N \epsilon_n |n\rangle\langle n| + \sum_{n=1}^N (J_{n,n+1} |n\rangle\langle n+1| + J_{n,n-1} |n\rangle\langle n-1|), \quad (1.34)$$

$$H_r = \sum_{n=1}^N \frac{p_n^2}{2m_n} + \frac{1}{4} \sum_{n=1}^N \left[K_n (u_{n+1} - u_n)^2 + K_{n-1} (u_n - u_{n-1})^2 \right], \quad (1.35)$$

e

$$H_{e-r} = \chi \sum_{n=1}^N |n\rangle \langle n| (u_{n+1} - u_{n-1}). \quad (1.36)$$

Para obtermos uma rede unidimensional é preciso apenas que os orbitais $|n\rangle$ sejam centralizados em torno dos sítios n , com $n = 1, \dots, N$. Nas refs. (KOPIDAKIS *et al.*, 1994; KOPIDAKIS *et al.*, 1995), considerou-se o caso periódico, isto é, o caso onde os elementos de matriz diagonal ϵ_n tivessem o mesmo valor. Porém, na ref. (ECONOMOU *et al.*, 1993), foi considerado um modelo quasi-periódico, onde as quantidades ϵ_n são dadas por $\epsilon_n = \epsilon_0 \cos(\pi\sigma n)$, sendo σ um número irracional tomado na forma $\sigma = (\sqrt{5} + 1)/2$. A parte da rede H_r representa um sistema de N osciladores harmônicos clássicos acoplados com massas m_n , deslocamento u_n , momento $p_n = m_n \dot{u}_n$ e constante de elasticidade K_n . É comum fazer as massas m_n e constantes de mola K_n serem consideradas como uma unidade ($m_n = K_n = 1$). Por fim, a interação elétron-rede H_{e-r} representa um potencial de deformação simetrizado com χ representando a intensidade com que o acoplamento ocorre. Diante destas observações, e levando em conta que a função de onda eletrônica possa ser escrita na forma $\Phi_e = \sum_n c_n(t) |n\rangle$, as equações de movimento para o sistema com acoplamento elétron-rede devem ser descritas como a seguir:

$$i\hbar \frac{dc_n(t)}{dt} = \chi(u_{n+1} - u_{n-1})c_n(t) + J_0(c_{n+1}(t) + c_{n-1}(t)), \quad (1.37)$$

$$\frac{dv_n}{dt} = (u_{n+1} + u_{n-1} - 2u_n) + \chi(|c_{n+1}|^2 - |c_{n-1}|^2), \quad (1.38)$$

e

$$v_n = \frac{du_n}{dt}, \quad (1.39)$$

em que foi feito $\epsilon_n = 0$, $J_{n,n+1} = J_{n,n-1} = J_0$ e $p_n = m_n \dot{u}_n = v_n$ para $m_n = 1$.

Em geral, os trabalhos de Economou *et al* discutem a competição da evolução temporal entre um elétron e as vibrações da rede (fônon). Estas investigações tiveram início com estudos numéricos sobre a evolução temporal do sistema acoplado, de forma que, inicialmente, as propriedades físicas da rede se encontram em seu estado ligado clássico, e os aspectos eletrônicos podem assumir várias condições iniciais (ECONOMOU *et al.*, 1993). Sobre esta perspectiva foram encontrados diferentes tipos de *polarons* localizados e aparentemente estendidos, onde não foi visto uma substancial transferência de energia do elétron para a rede, mesmo para tempo longo. Diante de uma ótica semelhante, Kopidakis *et al* (1994), a partir de soluções localizadas (*polarons*) e soluções estendidas (ondas de Bloch) de um sistema não-linear de equações diferenciais. Observou para um pequeno parâmetro de escala o surgimento de uma troca periódica de energia entre os graus de liberdade eletrônicos e vibracionais, surgindo assim, uma pequena transferência da ener-

gia eletrônica para a rede (KOPIDAKIS *et al.*, 1994). Seguindo esta tendência, este mesmo autor investigou a evolução temporal de um sistema unidimensional consistindo de um elétron, descrito por uma hamiltoniana *tight-binding* e uma rede harmônica, acoplados por um potencial de deformação (KOPIDAKIS *et al.*, 1995). Através da solução numérica do sistema não-linear de equações de movimento para este problema, estudou-se os efeitos da variação da massa efetiva eletrônica em diversas condições iniciais e intensidades de acoplamento. Contudo, os autores observaram que um aumento da energia eletrônica inicial diminui a capacidade do sistema em formar estados localizados. Notaram ainda, que uma grande massa efetiva favorece a formação de *polarons* localizados para elétrons inicialmente localizados. Porém isto não é verdade, quando se leva em conta o caso de estados eletrônicos inicialmente estendidos. Em essência, foi observado uma recorrência impressionante, quanto a periodicidade do sistema e quanto a troca completa entre os graus de liberdade eletrônicos e vibracionais de uma pequena parte da energia eletrônica inicial.

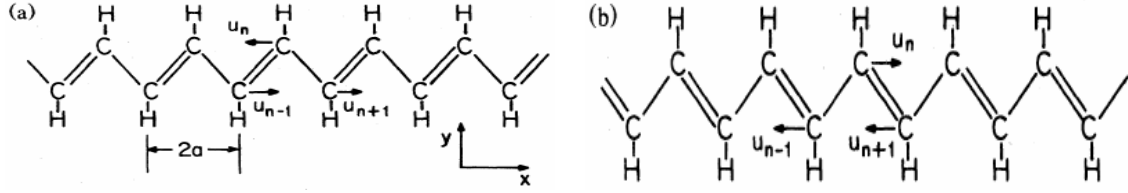
Através do modelo proposto por Davydov (1979), é possível estabelecer que a comunidade científica tem se interessado basicamente, em duas formas de acoplamento elétron-fônon: o tipo descrito por Davydov, e um segundo, proposto inicialmente pelos pesquisadores Su-Schrieffer-Heeger (1979). De modo que existem tanto pesquisas que investigam estes métodos separadamente, como estudos que buscam compreender a competição de ambas as formas de acoplar a rede com a dinâmica eletrônica (CANTU ROS *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2014). A seguir o modelo de aproximação SSH (SU-SCHRIEFFER-HEEGER, 1979) será abordado.

- *Modelo de Aproximação SSH.*

O modelo originalmente proposto por Su-Schrieffer-Heeger em 1979 tinha como objetivo investigar problemas que assumem a existência da alternância de ligações ao longo de cadeias de polímeros (ou seja, alternando ligações “simples” e “duplas”) e acoplamento entre as cadeias relativamente fraco (isto é, comportamento quasi-unidimensional). Essa abordagem foi motivada por evidências experimentais válidas em cadeias de $(CH)_x$, mais especificamente em técnicas Raman (LEFRANT *et al.*, 1979; HARADA *et al.*, 1978), que mostram a divisão de uma ligação carbono-carbono sendo responsável por vibrações resultantes da alternância de ligações, e estas são consistentes com os modos normais analisados (TRIC, 1969). A partir desta problemática foi desenvolvida uma teoria detalhada da formação de *solitons* em cadeias longas de polímeros na aproximação de um elétron.

De acordo com os trabalhos que fizeram a inserção do modelo SSH na literatura da área (SU-SCHRIEFFER-HEEGER, 1979), uma compreensão detalhada sobre *solitons* em cadeias $(CH)_x$ está ligada ao estudo de um modelo em que os elétrons são tratados através de uma aproximação *tight-binding*. Contudo, neste modelo, será considerada uma coordenada configuracional u_n para o deslocamento do n -ésimo grupo CH ao longo do

FIGURA 1.8 – Cadeias de *trans*-poliacetileno perfeitamente dimerizadas mostrando a coordenada de dimerização u_n para os dois estados ligados degenerados: fase A Fig. 1.8-(a) e fase B Fig. 1.8-(b).



Fonte: Su-Schrieffer-Heeger, 1979.

eixo (x) de moléculas simetrizadas (ver Figura 1.8), onde $u_n = 0$ indica uma cadeia sem dimerização. Portanto, a hamiltoniana para este sistema consiste em

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{n=1}^N \epsilon_n c_n c_n^\dagger + \sum_{n=1}^N (t_{n+1,n} c_{n+1}^\dagger c_n + H.c.) \\
 &+ \sum_{n=1}^N \frac{1}{2} M_n \dot{u}_n^2 \\
 &+ \frac{1}{4} \sum_{n=1}^N \left[K_n (u_{n+1} - u_n)^2 + K_{n-1} (u_n - u_{n-1})^2 \right]. \quad (1.40)
 \end{aligned}$$

Neste problema, as energias *on-site* são dadas por $\epsilon_n = 0$, fazendo com que a parte eletrônica de H esteja apenas no *hopping*. O nome Modelo de Aproximação SSH se dá pelo fato de que é considerada a aproximação de primeira ordem para $t_{n+1,n} = t_0 \exp[-\alpha(u_{n+1} - u_n)]$, isto é, $t_{n+1,n} \approx -[t_0 - \alpha(u_{n+1} - u_n)]$. M_n é a massa da unidade CH , $K_n = K$ é a constante de mola que liga as moléculas do sistema sem dimerização, e c_n^\dagger e c_n são operadores de criação e aniquilação para o elétron no sítio n . A estrutura de banda de energia com uma cadeia perfeitamente dimerizada, tal qual foi investigada por Su-Schrieffer-Heeger, 1979, levava em conta que as integrais de *hopping* para a cadeia perfeita fossem dadas por

$$t_{n+1,n} = \begin{cases} t_0 - t_1 & \text{ligação simples,} \\ t_0 + t_1 & \text{ligação dupla.} \end{cases} \quad (1.41)$$

Deste modo, fazendo algumas considerações para K e t_1 , os autores (SU-SCHRIEFFER-HEEGER, 1979) encontraram $\alpha/t_0 = 1.65 \times \text{\AA}^{-1}$, que está de bom acordo com estimativas independentes desse parâmetro (LONGUET-HIGGINS *et al.*, 1959).

Se considerarmos $t_0 = K = M = 1$ e $\alpha > 1$ em 1.40. Pode-se descrever a equação de Schrödinger dependente do tempo, agindo a hamiltoniana completa H (Eq. 1.40) sobre a função de onda $|\Psi(t)\rangle$ dada por $|\Psi(t)\rangle = \sum_n \psi_n(t) |n\rangle$. Onde é possível obter com auxílio das amplitudes de Wannier a seguinte equação:

$$i\hbar \frac{d\psi_n(t)}{dt} = -[1 - \alpha(u_{n+1} - u_n)]\psi_{n+1}(t) - [1 - \alpha(u_n - u_{n-1})]\psi_{n-1}(t). \quad (1.42)$$

Onde normalmente, supõe-se na Eq. 1.42, que $\hbar = 1$. Já as informações da rede, são dadas a partir das equações de Hamilton, considerando a hamiltoniana completa na forma do valor esperado ($\langle H \rangle$). Portanto, através desta operação surge a equação diferencial para a rede ou equação de movimento da rede,

$$\begin{aligned} \frac{d^2 u_n(t)}{dt^2} &= (u_{n+1} - u_n) - (u_n - u_{n-1}) \\ &- \alpha[(\psi_{n+1}^* \psi_n + \psi_{n+1} \psi_n^*) - (\psi_n^* \psi_{n-1} + \psi_n \psi_{n-1}^*)]. \end{aligned} \quad (1.43)$$

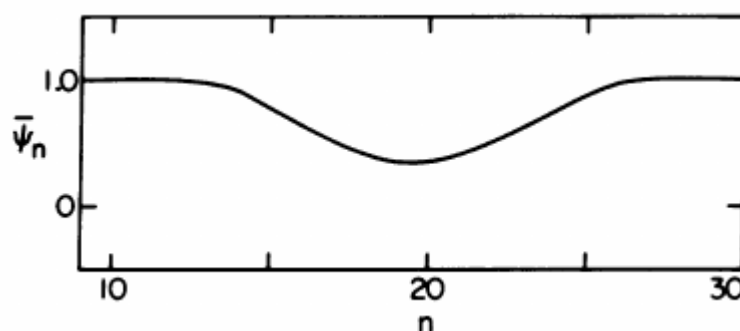
Com as equações 1.42 e 1.43 tem-se descritas as bases analíticas para o cenário proposto por Su-Schrieffer-Heeger, 1979 para as interações elétron-rede. Em continuidade a estas abordagens, é importante identificar linhas de pesquisa desenvolvidas sobre o modelo SSH. É de consciência dos físicos que as pesquisas científicas em torno deste tema tendem a culminar nas mais diversas aplicações tecnológicas. A partir desta problemática, será estabelecido a seguir um estudo em torno de polímeros conjugados baseados na aproximação SSH. Nesta linha de raciocínio, é importante identificar o trabalho de Heeger, 1988, que fornece a principal base teórica para a maioria das recentes pesquisas no campo de polímeros conjugados.

- *Aplicações do Modelo SSH: Polímeros Conjugados.*

De acordo com Heeger e colaboradores, (1988), excitações não-lineares auto localizadas (*solitons*, *polarons*, e *bipolarons*) são características fundamentais e inerentes de polímeros condutores quasi-unidimensionais. As evidências associadas a estes materiais podem ser percebidas em muitas propriedades físicas e químicas dessa classe ligada à literatura da área de materiais. Como possível resultado, esses polímeros representam uma chance para explorar a literatura da área de fenômenos associados com *solitons* topológicos (*solitons* gerados na estrutura dos polímeros) e a possibilidade de haver confinamentos lineares, os quais elevam fracamente a degenerescência de estados ligados. É sobre este tema em especial, que as abordagens seguintes devem ocorrer. Inicialmente, é importante compreender a natureza física dos *polarons*. Sobre esta problemática, o trabalho de Bredas *et al*, (1985), forneceu evidências de que uma cadeia de polímeros orgânicos seja favorável a localizar a carga que aparece na cadeia e tem, no seu entorno, uma distorção local (relaxação) da rede. Este processo de distorção da rede promove a presença de estados eletrônicos localizados no “gap” de energia devido à variações locais nas energias de ionização $\Delta\epsilon$ dos orbitais moleculares. Daí, considerando o caso onde ocorre oxidação, isto é, a remoção de um elétron da cadeia, implica na diminuição da energia de ionização por uma quantidade $\Delta\epsilon$. Logo, $\Delta\epsilon$ é maior que a energia de distorção E_{dis} necessária para distorcer a rede localmente em torno da carga. O trabalho de (BREDAS *et al.*, 1985) fornece detalhes muito importantes sobre a formação do chamado *polaron*, como é conhecido pelos físicos da matéria condensada. Segundo Bredas *et al*, (1985), no campo da química,

o *polaron* é definido como um íon (de *spin* 1/2) associado com uma distorção da rede e a presença de estados eletrônicos localizados no “gap” de energia em questão, chamando-se assim de *estados polarônicos*. Contudo, a habilidade que uma carga possui em deformar significativamente a rede em torno dela mesma, é consequência de um forte acoplamento elétron-fônon (BREDAS *et al.*, 1985). Em uma outra abordagem, deve-se exaltar o experimento de tunelamento, em que um elétron é inicialmente colocado na borda inferior da banda de condução no tempo zero, com a função de onda $\psi_n(t = 0)$ para todo n . Neste trabalho, é notado que a dinâmica temporal do elétron distorce a rede e se localiza em um estado “split-off” (ver Figura 1.9), que no português formal significa “cindido” (separado, dividido), isto é, o elétron se mostra localizado no *estado polarônico*. Ocorre portanto, a formação de um “*polaron forte*” (SU *et al.*, 1980). Detalhes como a massa,

FIGURA 1.9 – Média espacial da função de onda eletrônica $\bar{\psi}_n$ versus n para o estado ligado de um elétron presente em uma banda de condução.



Fonte: Su *et al.*, 1985.

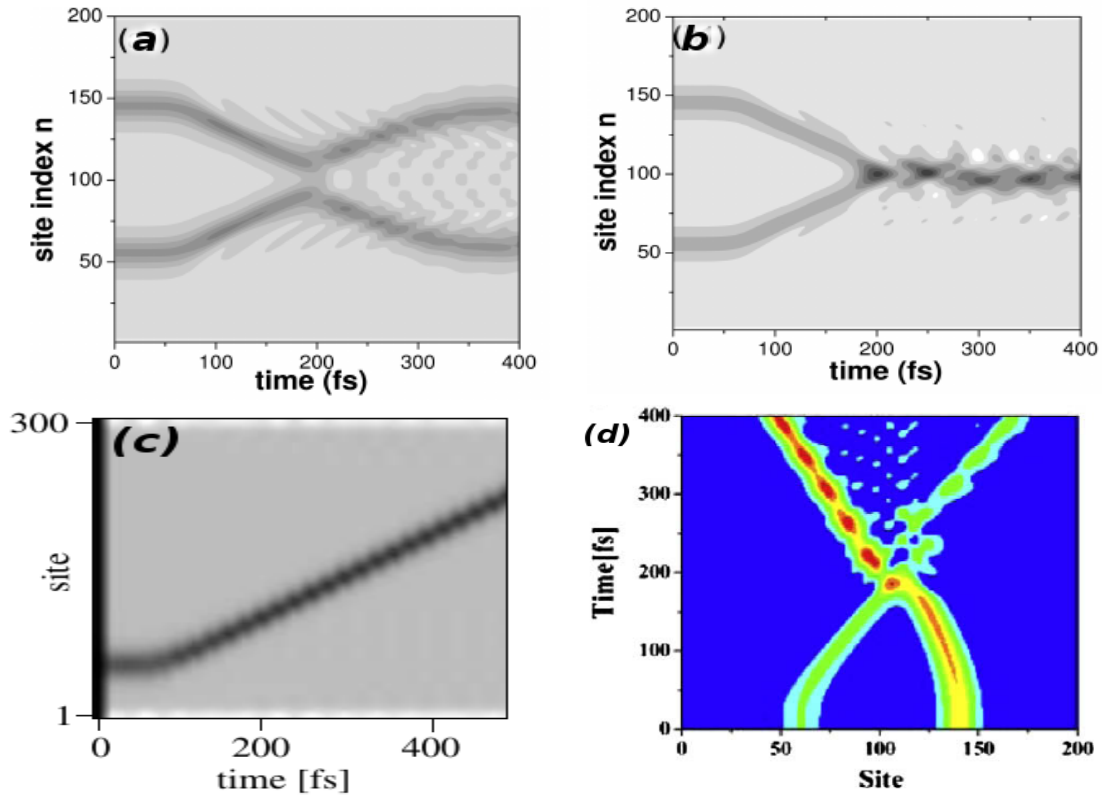
a energia, o tamanho, a intensidade e a formação do *polaron* podem ser encontrados na referência (AUSTIN *et al.*, 1969). Quando o problema em questão é compreendido para o caso onde seja possível adicionar um segundo elétron a um *polaron* formado por um outro, o resultado é um “*bipolaron*”. Neste caso ocorre uma diminuição de sua energia em relação a energia de um *polaron* devido a um aumento do espaçamento *soliton-soliton*, e isto acontece até que um par torção/anti-torção livre se transforma em uma separação considerável (SU-SCHRIEFFER-HEEGER, 1979). De modo geral, *bipolarons* e *polarons* são como partículas defeituosas auto localizadas, que são associadas com distorções características da cadeia polimérica e com estados quânticos presentes no “gap” de energia devido ao forte acoplamento elétron-rede. O *polaron* tem um *spin* $\pm 1/2$ e uma carga eletrônica $\pm e$, por outro lado, um *bipolaron* é “spin-less” com uma carga $\pm 2e$ (LIMA *et al.*, 2006).

Uma vez que o processo de formação de um *polaron* e de um *bipolaron* é compreendido, pode-se apontar questões importantes sobre os mesmos, como a dinâmica ou a evolução temporal de *polarons* e *bipolarons* (JOHANSSON *et al.*, 2001; AN *et al.*, 2004; LIMA *et al.*, 2006; DI *et al.*, 2007; ZHAO *et al.*, 2008; ZHAO *et al.*, 2009; SUN *et al.*, 2010; DI *et al.*, 2011), bem como, a competição entre *polarons* e *bipolarons* (SHIMOI *et al.*, 1994;

(SILVA, 2000). Esta competição se refere à capacidade que estas quasi-partículas tem em deformar a rede. O movimento de *polarons* tem importância fundamental para as propriedades de transporte em polímeros conjugados, que possuem aplicações na fabricação de LED (JOHANSSON *et al.*, 2001). Os efeitos sobre a dinâmica dos *polarons* e *bipolarons* podem ser causados pela presença de um campo elétrico externo em cadeias poliméricas acopladas (JOHANSSON *et al.*, 2001; LIMA *et al.*, 2006; ZHAO *et al.*, 2008; ZHAO *et al.*, 2009; SUN *et al.*, 2010; DI *et al.*, 2011). Os modelos investigados nestas referências apontam uma forte relação entre o campo elétrico e as características físicas dos *polarons* e *bipolarons*, como a velocidade e estrutura de rede do mesmo (ZHAO *et al.*, 2008; ZHAO *et al.*, 2009; DI *et al.*, 2011). É importante ressaltar ainda que estudos sobre a dinâmica de *polarons* e *bipolarons* em polímeros conjugados indicam que as interações entre *polarons* e *bipolarons* podem abrir um caminho para a ciência da eletroluminescência (SUN *et al.*, 2010; DI *et al.*, 2011). Neste mesmo cenário, a referência (AN *et al.*, 2004) aponta resultados sobre a dinâmica de *polarons* foto-generalizados (*polarons* capazes de causar a emissão de luz) em polímeros conjugados. Por fim, a respeito da dinâmica de *polarons* e *bipolarons*, deve-se destacar a ref. (LIMA *et al.*, 2006), que faz uma importante investigação sobre como ocorre um tipo específico de transição de um *estado polarônico* para um *estado bipolarônico*, além de observar a formação de um par “*bipolaron-respirador*”, e ainda qual o campo elétrico necessário para desacoplar este par (*bipolaron-respirador*). Contudo, percebe-se que a dinâmica destas quasi-partículas é de grande relevância na área científica e tecnológica, visto que, os mesmos possuem uma grande quantidade de aplicações. A visualização ilustrativa do *polaron* e do *bipolaron* pode ser feita através da evolução da distribuição do parâmetro de ordem escalonado r_n , que é definido por $r_n = (-1)^n(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1})/4$ (JOHANSSON *et al.*, 2001; LIMA *et al.*, 2006; SUN *et al.*, 2010; DI *et al.*, 2011) onde u_n identifica o deslocamento do sítio n na rede. Esta medida mostra simplesmente a dinâmica de movimento do *polaron* e do *bipolaron* em uma rede qualquer. Algumas medidas desta grandeza podem ser vistas na Figura 1.10, onde é possível observar pelo menos quatro circunstâncias distintas do fenômeno de movimento espacial do *polaron* e do *bipolaron*. As Figuras 1.10-a) e 1.10-b) identificam o movimento de dois *polarons* com *spin* paralelo e dois *polarons* com *spin* antiparalelo, respectivamente. Neste último, o autor (DI *et al.*, 2011) identifica que *polarons* com a mesma carga e spins antiparalelos podem ser espalhados em *estados bipolarônicos*. A Figura 1.10-c), mostra simplesmente o movimento de um *polaron* sob a influência de um campo elétrico $E_0 = 1.0mV/\text{Å}$ (JOHANSSON *et al.*, 2001). Por fim, é mostrado na Fig. 1.10-d), a dependência temporal de r_n com o espalhamento *polaron-bipolaron* em um campo elétrico externo $E_0 = 0.8 \times 10^5 V/cm$ (SUN *et al.*, 2010).

Seguindo a temática de *polarons* e *bipolarons* em polímeros conjugados, pode-se destacar a competição entre *polarons* e *bipolarons* em polímeros conjugados não-degenerados (SHIMO *et al.*, 1994; SILVA, 2000). Na primeira referência, são investigados os efeitos de interações Colombianas e da concentração de dopantes na estabilidade de *bipolarons* e *polarons*

FIGURA 1.10 – Medida da evolução temporal da distribuição do parâmetro de ordem escalonado, para dois *polarons* sob a influência de um campo elétrico $E_0 = 1.5mV/\text{Å}$ e *spin* paralelo (a) e antiparalelo (b). Em (c), tem-se um *polaron* sujeito a um campo elétrico $E_0 = 1.0mV/\text{Å}$. E finalmente (d), é mostrado a dependência temporal de r_n para o espalhamento *polaron-bipolaron* em um campo elétrico externo $E_0 = 0.8 \times 10^5 V/cm$.



Fonte: (a) e (b) Di *et al.*, 2011; (c) Johansson *et al.*, 2001; e (d) Sun *et al.*, 2010.

em polímeros conjugados. De forma análoga, o segundo problema destaca que a aplicação de um campo elétrico, bem como, uma concentração de dopante são fundamentais para que os *polarons* e *bipolarons* prevalesçam.

O modelo de aproximação SSH aplicado em polímeros conjugados também mostra possibilidades na geração de estados excitados gerando a emissão de fótons (HAYDEN *et al.*, 1986; MAZUMDAR *et al.*, 1989; SOOS *et al.*, 1994). Estes trabalhos destacam também aspectos importantes com respeito a repulsão Colombiana influenciando propriedades óticas neste cenário (HAYDEN *et al.*, 1986; MAZUMDAR *et al.*, 1989). Ainda nesta temática de estudo, deve-se pontuar aplicações de propriedades óticas na caracterização estrutural de polímeros conjugados (SOOS *et al.*, 1994). Com base nos conceitos construídos nestes trabalhos, An *et al.*, 2008, simulou processos de espalhamento elástico de um par de *polarons* em uma cadeia simples de polímero e duas cadeias de polímeros acopladas, com o objetivo de identificar o mecanismo de geração do “*polaron-éxciton*” auto aprisionado. Para tanto, foi utilizado um método de dinâmica não adiabática. Os resultados indicam que a evolução temporal se dá de forma complexa devido a dependência com as intera-

ções elétron-rede, as interações inter-cadeia, e a aplicação de um campo elétrico (AN *et al.*, 2008). A ideia de excitar um nível atômico com a finalidade de promover emissão de um fóton é uma propriedade ótica vastamente utilizada neste ramo da física. Particularmente, as propriedades óticas não-lineares podem ser abordadas por meio de polímeros conjugados no modelo SSH (DAKHOVSKII *et al.*, 1993; PRONIN *et al.*, 1993; DONG *et al.*, 1995; TAKAHASHI, 1995), bem como, abordagens focadas no estudo da absorção ótica em polímeros conjugados dopados (SHIMOI *et al.*, 1995) e a espectroscopia de *solitons* e *polarons* (KURODA *et al.*, 1995). As propriedades óticas não-lineares de polímeros conjugados são de fundamental interesse acadêmico e tecnológico (DAKHOVSKII *et al.*, 1993). Ainda sobre cadeias de polímeros conjugados, deve-se mencionar a possibilidade da geração do terceiro harmônico esférico (DAKHOVSKII *et al.*, 1993; PRONIN *et al.*, 1993), além também de investigações feitas no cenário da mecânica quântica (TAKAHASHI, 1995) e na tentativa de obter melhores materiais, como o fulereno (DONG *et al.*, 1995).

Até então, este trabalho tem descrito conceitos presentes em várias áreas da física, onde é possível identificar em comum, a aplicação do modelo SSH em abordagens envolvendo cadeias de polímeros conjugados. A questão que surge sobre esses materiais é, como são descritas as propriedades de transporte para estes tais sistemas compostos de polímeros conjugados? Quando se utiliza o modelo SSH em polímeros conjugados, como foi descrito inicialmente, no início deste tópico, estudam-se, naturalmente, quasi-partículas como *polarons*, *bipolarons* e *solitons*. Daí, o transporte destas quasi-partículas dependerá de quão desordenados os aspectos da rede se mostram. Estudos neste cenário indicam uma forte relação entre o transporte de *solitons* e o grau de desordem em materiais (MOSTOVOY *et al.*, 1997). As impurezas na estrutura atômica da rede, bem como, nas massas e ligações entre os átomos motivam investigações a fim de identificar uma possível transição metal-isolante (HARIGAYA *et al.*, 1991). Ou ainda, no estudo de possíveis estados estendidos em polímeros conjugados a partir dos efeitos do acoplamento elétron-fônon (ZHONG *et al.*, 2000; WOHLGENANT *et al.*, 2004). Por fim, é importante destacar a chamada “quarta geração de materiais poliméricos”, onde se deve citar o estudo feito por Heeger, (2001). Neste trabalho, são investigados supercondutores e polímeros metálicos, partindo de propriedades físicas para materiais já conhecidos. O autor prevê que estes materiais possam ser utilizados na construção de dispositivos fotônicos no ramo da física do estado sólido. Estes dispositivos fazem parte de uma classe de dispositivos em que o fóton é emitido com um padrão específico (HEEGER, 2001). Essa característica é de grande importância para a ótica eletrônica. Nesta mesma tendência, deve-se destacar os materiais denominados como semicondutores orgânicos, podendo fornecer indícios do transporte de cargas (BÄSSLER *et al.*, 2011), onde os autores usam o modelo de banda semicondutora Su-Schrieffer-Heeger, a fim de investigar processos óticos atrelados aos regimes de transporte de cargas.

1.4.2 Redes Anarmônicas

Compreender as propriedades vibracionais nas estruturas atômicas não é uma tarefa simples para os físicos da matéria condensada. Em especial, nesta seção, tem-se interesse em entender como um impulso, por exemplo, é transmitido em uma rede com propriedades não-lineares. Sobre este tema, em particular, existem dois trabalhos percursoros para a física da matéria condensada. O primeiro, trata do estudo de uma rede baseada em um potencial exponencial, que foi intitulado como “moléculas diatômicas de acordo com ondas mecânicas: níveis vibracionais” (MORSE, 1929). Esta referência estuda os aspectos inerentes à energia potencial da rede sob a forma de uma função exponencial que depende da distância relativa entre os sítios vizinhos de uma rede 1- d infinita. Este modelo, passou por diversos aprimoramentos, de modo que surgiu assim o chamado potencial de Toda, descrito originalmente também por uma função potencial exponencial (TODA, 1967; TODA, 1970; TODA, 1975; TODA, 1989). Uma segunda abordagem, que trata dos aspectos vibracionais em uma rede não-linear é o estudo proposto por Fermi *et al.*, (1955). Este 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 são constantes de não-linearidade (FERMI *et al.*, 1955). Estas abordagens são conhecidas como modelo α -Fermi-Pasta-Ulam (α -FPU) e β -Fermi-Pasta-Ulam (β -FPU), respectivamente. Neste caso, se os potenciais correspondentes a estas forças puderem ser obtidos, então um potencial com um termo cúbico é provindo do termo quadrático da força decorrente das vibrações na rede. Da mesma que um potencial com um termo quártico pode ser encontrado a partir do termo cúbico da força. Esta equivalência está descrita em detalhes na referência (TODA, 1989). Nos tópicos a seguir, serão mostradas as principais aplicações das duas tendências para redes não-lineares no estudo da propagação de ondas solitônicas atreladas à ondas eletrônicas.

- *Redes com Potenciais tipo Fermi-Pasta-Ulam*

Como já vimos acima, o desenvolvimento realizado nos modelos FPU (BIVINS *et al.*, 1973; FERMI *et al.*, 1955) consiste em estudar forças anarmônicas. Os dois tipos de forças descritos anteriormente, podem ser representadas como uma expansão de séries, onde a série é truncada no terceiro termo, isto é,

$$\begin{aligned}
 F(u_n) &= K_n(u_{n+1} - u_n) - K_{n-1}(u_n - u_{n-1}) \\
 &+ \alpha[(u_{n+1} - u_n)^2 - (u_n - u_{n-1})^2] \\
 &+ \beta[(u_{n+1} - u_n)^3 - (u_n - u_{n-1})^3].
 \end{aligned}
 \tag{1.44}$$

A equação 1.44 pode ser reescrita na clássica lei de Hooke, onde é feito o truncamento para apenas o termo linear em u_n . Tem-se representado em 1.44 portanto, a força para

uma cadeia linear de N sítios, com u_n representando o deslocamento no sítio n , K_n , α e β são constantes. Com K_n sendo a clássica constante de mola, α e β são constantes de não-linearidade.

De acordo com Toda, (1989), o termo no lado esquerdo da equação 1.44 descreve o produto $m \frac{d^2 u_n}{dt^2}$. Daí, sob a abordagem da mecânica clássica de redes (cadeias) unidimensionais de partículas com interação de primeiros vizinho, é possível restringir esta análise a um sistema uniforme (sem impurezas), com m denotando a massa de cada partícula, u_n o deslocamento da n -ésima partícula, e $K_n(u_{n+1} - u_n)$ a força de interação (da mola) entre as partículas vizinhas. Onde as constantes de mola K_n são as derivadas de γ_n . Logo, $f(s) = -K(s) = -d\gamma(s)/ds$ é a força da mola quando ela é esticada por uma quantidade s , em que γ é tida como a nova constante de mola. Neste caso, teríamos $s_n = u_{n+1} - u_n$ sendo o deslocamento mútuo de partículas consecutivas. No caso mais comum, onde $f(s)$ é proporcional a s , tem-se que a lei de Hooke é satisfeita, e assim a mola possui aspecto linear. Portanto, o potencial deve ser escrito por

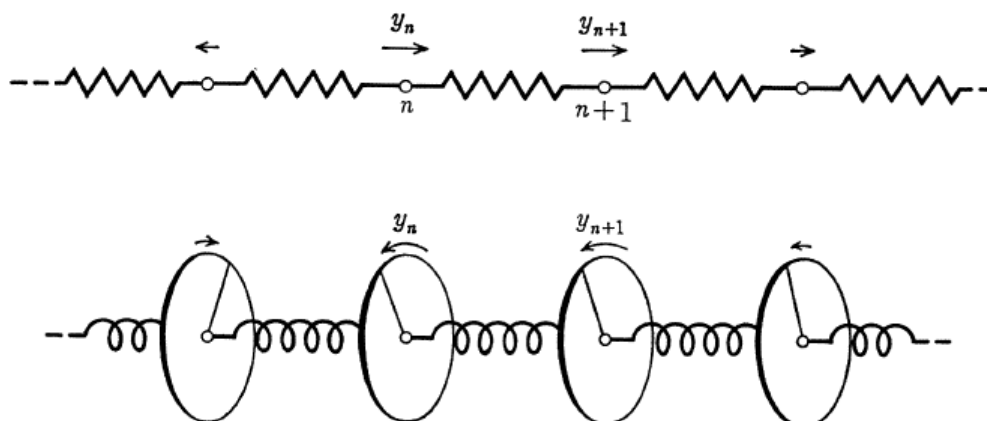
$$g(s) = \frac{\gamma}{2} s^2. \quad (1.45)$$

Assim, as equações de movimento tomam a forma

$$m \frac{d^2 u_n}{dt^2} = \gamma(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}). \quad (1.46)$$

Em um sistema massa-mola, u_n descreve os deslocamentos longitudinais. Por outro lado, com respeito às ondas transversais é mais adequado ilustrar forças não-lineares, visto que, o movimento é expresso por deslocamentos transversais. Neste cenário, se torna mais interessante pensar em movimentos torcionais de um sistema de discos conectados por molas não-lineares (ver Fig. 1.11). Neste caso, m está associado ao momento de inércia,

FIGURA 1.11 – Modelos para redes unidimensionais. Na descrição analítica foi considerado $u_n = y_n$.



Fonte: Toda, 1989.

e u_n ao ângulo de torção (TODA, 1989).

Nas investigações realizadas por Fermi-Pasta-Ulam, 1955, foram consideradas hipóteses estatísticas para entender quais as consequências em adicionar um termo não-linear à força entre partículas em uma rede unidimensional. Uma delas, indica que a energia deveria fluir arbitrariamente de um modo elástico a outro, levando o sistema a um estado de equilíbrio estatístico, onde a energia é compartilhada igualmente entre modos lineares (equipartição de energia) (TODA, 1989). Os trabalhos de Fermi *et al.*, (1955), tinham como proposta verificar justamente estas hipóteses. Os autores então investigaram ao menos dois potenciais, um primeiro com termo cúbico (sendo α a constante de não-linearidade)

$$g(s) = \frac{\gamma}{2}s^2 + \frac{\alpha}{3}s^3, \quad (1.47)$$

e um segundo com um termo quártico (β é a constante de não-linearidade)

$$g(s) = \frac{\gamma}{2}s^2 + \frac{\beta}{4}s^4, \quad (1.48)$$

Os potenciais apresentados em 1.47 e 1.48 podem ser abordados de acordo com o formalismo de Hamilton, de modo que a hamiltoniana H_{FPU} para uma rede não-linear clássica FPU 1- d com N partículas iguais é dada abaixo, onde a partir de agora será considerado $\alpha = \eta$, para evitar má interpretações em relação ao parâmetro de acoplamento elétron-rede.

$$\begin{aligned} H_{FPU} = & \sum_{n=1}^N \left[\frac{P_n^2}{2m} + \frac{\gamma}{4}[(u_{n+1} - u_n)^2 - (u_n - u_{n-1})^2] \right. \\ & + \frac{\eta}{6}[(u_{n+1} - u_n)^3 - (u_n - u_{n-1})^3] \\ & \left. + \frac{\beta}{8}[(u_{n+1} - u_n)^4 - (u_n - u_{n-1})^4] \right]. \end{aligned} \quad (1.49)$$

Uma vez que as equações de Hamilton ($\dot{u}_n = \frac{\partial H_{FPU}}{\partial P_n}$ e $\dot{P}_n = -\frac{\partial H_{FPU}}{\partial u_n}$) são usadas, chega-se as seguintes equações do movimento:

$$v_n = \dot{u}_n = \frac{P_n}{m}, \quad (1.50)$$

e

$$\begin{aligned} m \frac{d^2 u_n}{dt^2} = & \gamma(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) \\ & + \eta[(u_{n+1} - u_n)^2 - (u_n - u_{n-1})^2] \\ & + \beta[(u_{n+1} - u_n)^3 - (u_n - u_{n-1})^3]. \end{aligned} \quad (1.51)$$

Estas equações têm a competência de descrever o movimento de vibrações (fônons) ao longo de uma rede não-linear. O Capítulo 3 deverá abordar como se dá a propagação destas vibrações para o potencial cúbico na Equação 1.49, e ainda levando em conta que as vibrações estejam acopladas às ondas eletrônicas, de acordo com o modelo de aproximação SSH (ver seção 1.4.1).

Considerando que a rede clássica seja representada pela hamiltoniana dada na Eq. 1.49 (H_{FPU}), tem-se que a hamiltoniana completa H se torna a soma $H = H_{FPU} + H_{ele}$. Onde H_{ele} representa a hamiltoniana eletrônica, dada por

$$H_{ele} = \sum_{n=1}^N \epsilon_n c_n c_n^\dagger + \sum_{n=1}^N (V_{n+1,n} c_{n+1}^\dagger c_n + H.c.). \quad (1.52)$$

Onde ϵ_n é o potencial *on-site*, c_n^\dagger e c_n são operadores de criação e aniquilação, respectivamente, e $V_{n+1,n}$, de acordo com o modelo de aproximação SSH (SU-SCHRIEFFER-HEEGER, 1979), representa o termo de *hopping* com interações elétron-fônon, dado por

$$V_{n+1,n} \approx -(V_0 - \alpha(u_{n+1} - u_n)), \quad (1.53)$$

em que V_0 é o termo de *hopping* efetivo, e α é o parâmetro de acoplamento. Daí, considerando $H = H_{rede} + H_{FPU}$ atuando em um estado $|\Psi(t)\rangle = \sum_n \psi_n(t)|n\rangle$, tem-se de acordo com as amplitudes de Wannier a equação de Schrödinger dependente do tempo,

$$i\hbar \frac{d\psi_n(t)}{dt} = -[1 - \alpha(u_{n+1} - u_n)]\psi_{n+1}(t) - [1 - \alpha(u_n - u_{n-1})]\psi_{n-1}. \quad (1.54)$$

Por outro lado, a Equação 1.51 deverá ser reescrita como

$$\begin{aligned} m \frac{d^2 u_n}{dt^2} &= \gamma(u_{n+1} - 2u_n + u_{n-1}) \\ &+ \eta[(u_{n+1} - u_n)^2 - (u_n - u_{n-1})^2] \\ &+ \beta[(u_{n+1} - u_n)^3 - (u_n - u_{n-1})^3] \\ &+ \alpha[(\psi_{n+1}^* \psi_n + \psi_{n+1} \psi_n^*) - (\psi_n^* \psi_{n-1} + \psi_n \psi_{n-1}^*)]. \end{aligned} \quad (1.55)$$

Investigar cadeias não-lineares, com o objetivo de observar a formação de um par elétron-*soliton* (**solectron**) tem atraído grande interesse da comunidade científica (VELARDE *et al.*, 2005; CHETVERIKOV *et al.*, 2006; HENNIG *et al.*, 2006; VELARDE *et al.*, 2006; HENNIG *et al.*, 2007; HENNIG *et al.*, 2008; VELARDE *et al.*, 2008; VELARDE, 2010; VELARDE *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2013; de MOURA, 2013; VELARDE *et al.*, 2014). No cenário descrito acima, podem-se pontuar o trabalho de Moura, 2013. Neste trabalho, são investigados os efeitos do acoplamento elétron-rede com o termo de *hopping* dado por $V_{n+1,n} = V_0 \exp[-\alpha(u_{n+1} - u_n)]$, isto é, ele decai exponencialmente

com a distância entre os sítios vizinhos. Além desta consideração, leva-se em conta uma cadeia com desordem correlacionada, uma rede com potencial não-linear cúbico e que o pacote de ondas esteja inicialmente localizado no centro da cadeia unidimensional. Com base neste problema, o autor foi capaz de observar que as excitações solitônicas induzidas por uma interação não-linear cúbica na hamiltoniana pode controlar a dinâmica do elétron através da rede por completo, indicando assim, a formação de um par elétron-*soliton* em cadeias desordenadas não-lineares segundo o modelo α -Fermi-Pasta-Ulam ou α -FPU (de MOURA, 2013). Utilizando o mesmo termo de *hopping*, o Capítulo 4 apresenta uma abordagem focada nas propriedades de dinâmica eletrônica em uma cadeia de DNA de única hélice acoplada com as ondas eletrônicas. Neste trabalho, pretende-se mostrar qual regime de difusão o elétron obedece, além de detalhes importantes referentes à influência do acoplamento elétron-rede sobre os aspectos de transporte eletrônico.

- *Redes com Potenciais tipo Morse*

A habilidade em investigar redes anarmônicas não poderia ter evoluído até o padrão atual sem as contribuições de Morse (MORSE, 1929). Nesta publicação, foi proposto que os aspectos de torção sobre a rede fossem dados por uma função exponencial. Esta é definida, basicamente pela forma

$$E(s_n) = De^{-2a(s_n)} - 2De^{-a(s_n)}, \quad (1.56)$$

onde $s_n = u_n - u_{n-1}$ é a distância relativa entre as partículas vizinhas, desde que o sistema seja unidimensional e tenha N partículas, sendo ainda, a a largura da função poço potencial de Morse e D a profundidade da função poço potencial. De acordo com Toda, 1989, as redes com este tipo de interação são chamadas de redes com interação exponencial (TODA, 1975; TODA, 1989). Na modelagem de Toda, o potencial descrito na Equação 1.56 se torna

$$F(s_n) = \frac{a}{b}e^{-bs_n} + as_n, \quad (1.57)$$

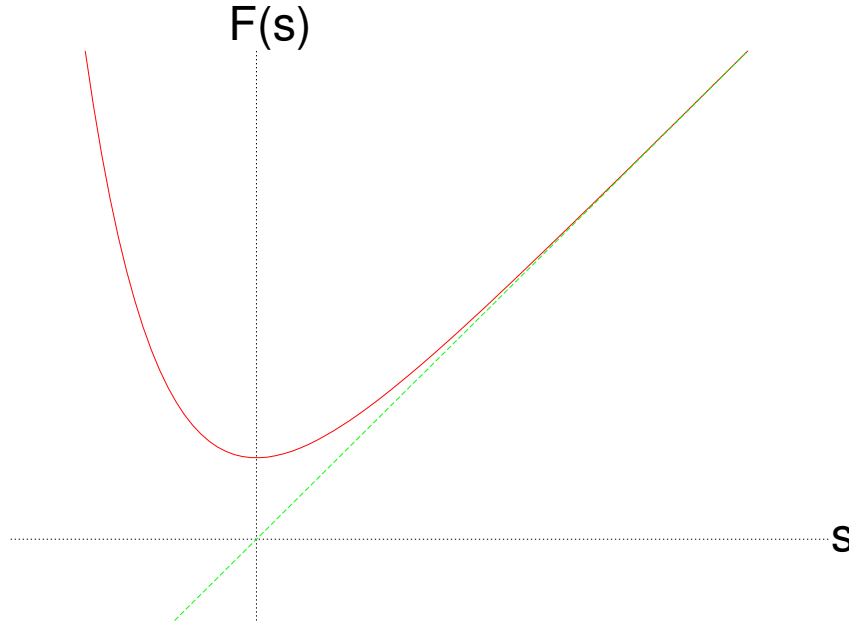
aqui, a é a intensidade da força gerada pelo potencial $F(s_n)$ e b indica a rigidez da rede que este potencial descreve e obedecem a condição $a, b > 0$. Essa condição faz com que o potencial 1.57 tenha repulsão forte e atração fraca, como mostra a Fig. 1.12. De modo que, próximo do mínimo ele fornece uma força harmônica. Com o aumento da distância s é obtida uma força não-linear. Logo, este potencial descreve a natureza de forças atômicas físicas.

Se pudermos expandir a Equação 1.57, assumindo s pequeno, tem-se

$$F(s_n) = \frac{ab}{2}s^2 - \frac{ab^2}{6}s_n^3 + \dots \quad (1.58)$$

Logo, de acordo com a Equação 1.47, $\gamma = ab$ e $\alpha = -\frac{ab^2}{2}$. A rede com interações

FIGURA 1.12 – Potencial exponencial $F(s)$ versus s , para $a, b > 0$. Onde é possível identificar o comportamento da função $F(s)$ descrita na Eq. 1.57.



Fonte: Autor, 2016.

exponenciais é um modelo que possui uma rede harmônica e um sistema de redes não-lineares.

Analogamente às redes FPU, pode-se descrever a hamiltoniana clássica H_{Toda} para uma rede de Toda 1- d com N partículas da seguinte forma:

$$H_{Toda} = \frac{1}{2m} \sum_{n=1}^N P_n^2 + \sum_{n=1}^N F(s_n), \quad (1.59)$$

onde P_n é o momento linear da n -ésima partícula, m é a massa de cada partícula, $F(s_n)$ é dado pela Eq. 1.57 e s_n é a distância entre as partículas vizinhas ($s_n = u_n - u_{n-1}$). Utilizando as equações de Hamilton ($\dot{u}_n = \frac{\partial H_{Toda}}{\partial P_n}$ e $\dot{P}_n = -\frac{\partial H_{Toda}}{\partial u_n}$), obtém-se a equação de movimento para a rede não-linear de Toda, como segue abaixo:

$$m \frac{d^2 u_n}{dt^2} = a [e^{-b(u_n - u_{n-1})} - e^{-b(u_{n+1} - u_n)}]. \quad (1.60)$$

Trocando $F(s_n)$ por $E(s_n)$ da Equação 1.56 na Equação 1.59, tem-se a hamiltoniana para uma rede não-linear de Morse H_{Morse} . Daí, repetindo o processo feito acima, é possível chegar na equação de movimento para os fônons na rede de Morse,

$$m \frac{d^2 u_n}{dt^2} = Db \{ [2 - e^{-b(u_{n+1} - u_n)}] e^{-b(u_{n+1} - u_n)} - [2 - e^{-b(u_n - u_{n-1})}] e^{-b(u_n - u_{n-1})} \}. \quad (1.61)$$

Mas o que acontece se acoplarmos as ondas elásticas (fônons) a um elétron se propagando nesta rede? É possível encontrar algumas respostas a este questionamento nos trabalhos de Manoel Velarde e colaboradores (VELARDE *et al.*, 2005; CHETVERIKOV *et al.*, 2006; HENNIG *et al.*, 2006; VELARDE *et al.*, 2006; HENNIG *et al.*, 2007; HENNIG *et al.*, 2008; VELARDE *et al.*, 2008; VELARDE, 2010; VELARDE *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2013; de MOURA, 2013; VELARDE *et al.*, 2014). A seguir, este estudo deverá apresentar as principais bases teóricas para estas pesquisas.

Inicialmente, leva-se em conta que o elétron seja descrito por uma hamiltoniana H_{ele} *tight-binding*, bem como, foi descrito na Equação 1.52. Onde ϵ_n corresponde ao potencial *on-site* de cada partícula do sistema, e $V_{n+1,n}$ é o *hopping* segundo o modelo SSH (SUSCHRIEFFER-HEEGER, 1979) (ver Equação 1.53). Daí, a hamiltoniana completa H para o sistema elétron-rede, é dada pela fórmula $H = H_{Morse} + H_{ele}$. Em um processo análogo ao feito para redes não-lineares tipo FPU, considera-se que a hamiltoniana H esteja agindo em um estado $|\Psi(t)\rangle = \sum_n \psi_n(t)|n\rangle$. Feita essa etapa, é possível reencontrar a equação de Schrödinger dependente do tempo descrita na Equação 1.54. Por outro lado, a equação da rede é obtida realizando o processo $\dot{P}_n = m \frac{d^2 u_n}{dt^2} = -\frac{\partial \langle \psi_n | H | \psi_n \rangle}{\partial u_n}$, resultando portanto em,

$$\begin{aligned} m \frac{d^2 u_n}{dt^2} &= Db \{ [2 - e^{-b(u_{n+1}-u_n)}] e^{-b(u_{n+1}-u_n)} \\ &- [2 - e^{-b(u_n-u_{n-1})}] e^{-b(u_n-u_{n-1})} \} \\ &+ \alpha V_0 [(\psi_{n+1}^* \psi_n + \psi_{n+1} \psi_n^*) - (\psi_n^* \psi_{n-1} + \psi_n \psi_{n-1}^*)]. \end{aligned} \quad (1.62)$$

De acordo com Velarde *et al.*, 2006, considera-se uma cadeia unidimensional anarmônica com dinâmica baseada na hamiltoniana que descreve as interações de Morse para primeiros vizinhos:

$$H_{rede} = \sum_{n=1}^N \left\{ \frac{P_n^2}{2m} + D(1 - \exp[-b(u_n - u_{n-1})])^2 \right\}. \quad (1.63)$$

De forma similar as abordagens feitas acima, m indica a massa de uma partícula da rede, o par (u_n, P_n) descrevem seus respectivos deslocamentos e momentos a partir das posições de equilíbrio.

Ainda com base nas abordagens de Velarde *et al.*, 2006. Quando o objetivo é investigar também a parte eletrônica, devemos considerar as partículas da rede como íons positivos. Daí, tem-se a necessidade de incluir elétrons ao sistema, de modo que a forma como este se propaga, deva seguir a hamiltoniana *tight binding* com energia *on-site* $\epsilon_n = 0$ (ASH-

CROF *et al.*, 1976),

$$H_{ele} = - \sum_{n=1}^N V_{n,n-1} (c_n^* c_{n-1} + c_n c_{n-1}^*), \quad (1.64)$$

em que n corresponde ao sítio onde um elétron é “colocado” e $|c_n|^2$ representa a probabilidade de encontrar a carga neste sítio. Como discutido anteriormente, $V_{n,n-1}$ nos dá o elemento de matriz de transferência responsável pelo transporte do elétron ao longo da cadeia (VELARDE *et al.*, 2006). No tipo de abordagem feita aqui, esse elemento é um tipo de ingrediente, que permite o acoplamento do elétron aos deslocamentos da rede, e portanto, às vibrações da rede, fônons ou *solitons*. Que de acordo com Velarde *et al.*, 2006, é dado por $V_{n,n-1} = V_0 \exp[-\alpha(u_n - u_{n-1})]$. Como foi comentado anteriormente, α indica a intensidade do acoplamento. É importante comentar, que $V_{n,n-1}$ descreve o impacto local da carga em questão sendo “aprisionada” nos movimentos longitudinais (e assim distorções) da rede (VELARDE *et al.*, 2006).

Na modelagem geral dos estudos feitos por Velarde *et al.*, considera-se que as quantidades em estudo sejam reescaladas, fazendo com que as equações fiquem adimensionais. Para tanto, leva-se em conta a unidade de tempo Ω_{Morse}^{-1} , em que $\Omega_{Morse} = \sqrt{2Db^2/m}$ representa a frequência de oscilações harmônicas (aproximações de primeira ordem para a exponencial de Morse). Já a energia possui a unidade de $(2D)$, no caso do deslocamento foi tomado como unidade b^{-1} , e por fim o momento tem a unidade de $(\sqrt{2mD})^{-1}$. Deste modo, a força de interação é medida por $\alpha V_0/2bD$, com o acoplamento sendo medido por (b^{-1}) unidades (VELARDE *et al.*, 2006). Portanto, por meio de novas quantidades adimensionais, as equações de dinâmica para o elétron (c_n) e para as vibrações da rede (u_n), segundo Velarde *et al.*, 2006, são dadas por:

$$i \frac{dc_n(t)}{dt} = -\tau (\exp[-\alpha(u_{n+1} - u_n)] c_{n+1} + \exp[-\alpha(u_n - u_{n-1})] c_{n-1}), \quad (1.65)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{d^2 u_n}{dt^2} &= \{ [1 - e^{-(u_{n+1}-u_n)}] e^{-(u_{n+1}-u_n)} - [1 - e^{-(u_n-u_{n-1})}] e^{-(u_n-u_{n-1})} \} \\ &+ \alpha V [(c_{n+1}^* c_n + c_{n+1} c_n^*) e^{-\alpha(u_{n+1}-u_n)} - (c_n^* c_{n-1} + c_n c_{n-1}^*) e^{-\alpha(u_n-u_{n-1})}], \end{aligned} \quad (1.66)$$

onde $\tau = V/(\Omega_{Morse} \hbar)$. Em geral, as escalas de tempo de 1.65 e 1.66 não são iguais (em termos de frequências se referem ao ultravioleta para o caso eletrônico e infravermelho no caso de acústico) para a maioria dos casos com elétrons e fônons.

Os resultados para a maioria dos trabalhos abordados por Velarde *et al.* nesta linha de pesquisa científica sugerem, para parâmetros e circunstâncias específicas, que ondas solitônicas (excitações elásticas intrínsecas da rede) formadas no sistema “aprisionam” o elétron, permitindo que o mesmo tenha mobilidade ao longo da rede. Este fenômeno é

geralmente chamado de *self-trapping* pelos pesquisadores da área. De um modo geral, é estabelecido que o *soliton* seja capaz de mediar o transporte elétrico (VELARDE *et al.*, 2005; CHETVERIKOV *et al.*, 2006; HENNIG *et al.*, 2006; VELARDE *et al.*, 2006; HENNIG *et al.*, 2007; HENNIG *et al.*, 2008; VELARDE *et al.*, 2008; VELARDE, 2010; CHETVERIKOV *et al.*, 2013; CHETVERIKOV *et al.*, 2014; VELARDE *et al.*, 2014).

1.4.3 Ondas Acústicas de Superfície em Sistemas Acoplados

A descrição de ondas se propagando ao longo de superfícies planas foi inicialmente feita por Lord Rayleigh, 1885. Neste trabalho, propõe-se investigar o comportamento de ondas sobre a superfície livre planar de um sólido elástico isotrópico homogêneo e infinito, de modo que as perturbações feitas ao sólido estão confinadas a uma região superficial, com espessura comparável ao comprimento de onda (STRUTT, 1885). Quase um século após a publicação deste trabalho, iniciou-se pesquisas por parte da comunidade científica na tentativa de construir os chamados materiais SAW ou materiais baseados em ondas acústicas de superfície (SLOBODNIK, 1976). Estas abordagens tem como expectativa otimizar os dispositivos construídos a partir destes materiais (dispositivos elaborados com objetivo de usar as chamadas SAW para auxiliar o transporte de cargas, bem como, é feito por (MCNEIL *et al.*, 2011)). Para tanto, são investigados parâmetros como, a velocidade, coeficiente de acoplamento, coeficientes de temperatura, o comportamento de propagação das ondas, bem como, os parâmetros de circuitos equivalentes, e desta forma promover avanços na construção dos dispositivos SAW (SLOBODNIK, 1976). Teoricamente, estas investigações são baseadas em alguns meios em especial. Mayer, 1995, faz uma revisão teórica sobre SAW em meios com elasticidade não-linear e linear (MAYER, 1995). No caso linear, vale ressaltar os meios homogêneos, que possibilitam a propagação de ondas acústicas de superfície de forma linear, obedecendo é claro uma descrição matemática específica. Por outro lado, os meios com elasticidade não-linear têm como representantes as ondas de Rayleigh (SAW), ondas Gulyaev-Bleustein, ondas “love” e outras ondas de torção, ondas em planos e estruturas em camadas, e ondas de superfície em cristais. Este conjunto de estruturas matemáticas permitem abordagens sobre meios com estruturas atômicas não organizadas, isto é, meios não-homogêneos (MAYER, 1995; BIRYUKOV *et al.*, 1995).

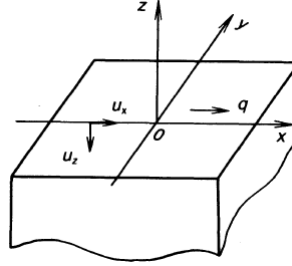
- *Principais Ondas de Superfície em Meios Heterogêneos*

Será estudada a seguir, uma descrição com mais detalhes sobre as ondas de superfície em meios heterogêneos e algumas aplicações.

I - Ondas de Rayleigh

De acordo com Biryukov, 1995, quando ondas de Rayleigh se propagam ao longo

FIGURA 1.13 – Arranjo esquemático de ondas de Rayleigh.



Fonte: Biryukov, 1995.

de uma região em um meio elástico isotrópico (ver Fig. 1.13), é comum expressar o deslocamento \vec{u} através do escalar A e do potencial vetor \vec{B} na forma,

$$\vec{u} = \vec{\nabla}A + \vec{\nabla} \times \vec{B}. \quad (1.67)$$

Esta representação governa certas estruturas especiais de campos de ondas, e corresponde à separação de uma onda em uma onda comprimida (A) e a uma onda de torção (\vec{B}). Estas quantidades têm equações independentes, que são dadas por

$$\ddot{A} - b_l^2 \nabla^2 A = 0 \quad , \quad \ddot{\vec{B}} - b_t^2 \nabla^2 \vec{B} = 0, \quad (1.68)$$

com ∇^2 sendo o operador de Laplace ou Laplaciano, b_l e b_t são as velocidades das ondas acústicas longitudinais e transversais, respectivamente. Partindo da condição de que as ondas em questão se propaguem ao longo do plano (xz), tem-se que o potencial vetor têm apenas uma componente diferente de zero B_y . Bem como, as componentes u_x e u_z são representadas por

$$u_x = \frac{\partial A}{\partial x} - \frac{\partial B}{\partial z} \quad , \quad u_z = \frac{\partial A}{\partial z} - \frac{\partial B}{\partial x} \quad (1.69)$$

As soluções propostas para a Eq. 1.68, as quais descrevem ondas acústicas de superfície (SAW) tem a forma (BIRYUKOV *et al.*, 1995),

$$\begin{aligned} A &= A_0 \exp[mz + i(vx - \omega t)] \\ B &= B_0 \exp[m'z + i(vx - \omega t)], \end{aligned} \quad (1.70)$$

em que ω e v são a frequência e o número de onda, respectivamente, A_0 e B_0 são as amplitudes de onda das funções A e B , correspondentemente. Por fim, m e m' são os coeficientes de atenuação para as ondas de compressão e ondas de torção se propagando em conjunto com as ondas acústicas. Daí, as equações de movimento 1.68 ficam

$$m^2 = v^2 - k_l^2 \quad , \quad m'^2 = v^2 - k_t^2 \quad , \quad \Re(m), \Re(m') > 0, \quad (1.71)$$

lembrando que, $k_l = \omega/b_l$ e $k_t = \omega/b_t$ são os números de ondas longitudinais.

De um modo geral, este desenvolvimento matemático (BIRYUKOV *et al.*, 1995) fornece a chamada equação de Rayleigh, desde que as soluções acima sejam não nulas,

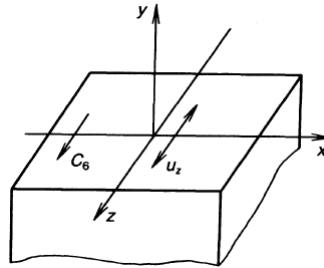
$$\zeta(n, \omega) = (v^2 + m'^2)^2 - 4v^2mm' = 0. \quad (1.72)$$

Que deve indicar em especial, como as ondas de Rayleigh são dispersadas em corpos elásticos, bem como, as suas características físicas básicas em corpos isotrópicos.

II - Ondas Gulyaev-Bleustein

Ondas de Gulyaev-Bleustein (OGB) representam um importante tipo de onda acústica de superfície. Analogamente às ondas de Rayleigh, as OGB podem existir em uma superfície livre de um sólido. Porém, como aspecto distinto com as ondas de Rayleigh, as OGB existem apenas em certas camadas e se propagam apenas em algumas direções do cristal piezoelétrico (cristais que suportam uma certa pressão provinda de um campo elétrico).

FIGURA 1.14 – Ilustração de ondas de Gulyaev-Bleustein.



Fonte: Biryukov, 1995.

Costuma-se considerar um cristal piezoelétrico da classe C_{6v} com eixo hexagonal z (Fig. 1.14) “deitado” no plano da superfície cristalina. Desta forma, a onda é determinada com o deslocamento \vec{u} somente ao longo do eixo z e se propagando ao longo do eixo x (BIRYUKOV *et al.*, 1995). Acusticamente analisando, as equações gerais de cristais piezoacústicos são dadas por

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}u_{kl} - e_{kij}E_k \quad , \quad D_i = \varepsilon_{ij}E_j - e_{ijk}u_{jk} \quad (1.73)$$

onde σ_{ij} é o tensor de “stress”, C_{ijkl} é o tensor do módulo elástico, e_{ijk} é o tensor piezoelétrico, E_k é o vetor de um campo elétrico, D_i é um vetor indução, ε_{ij} é o tensor de permissividade elétrica. Este modelo pode ser visto no trabalho de Nalamwar *et al.*, 1976, onde foi considerado a propagação de ondas acústicas de superfície em um meio piezoelétrico anisotrópico que está inicialmente sobre “stress”. Além de uma rica descrição teórica, são feitas várias análises experimentais em substratos tensionados. Sobre este

tema, é possível destacar fatores como o “stress” inicial, variações na constante elástica e a mudança de densidade nos substratos, os quais provocam mudanças individuais na velocidade de propagação de SAW (NALAMWAR *et al.*, 1976).

No sistema SI, as componentes do tensor σ_{ij} , do vetor D_i , e do tensor de tensão $u_{ik} = (1/2)(\partial u_i/\partial x_k + \partial u_k/\partial x_i)$ são dadas por

$$\begin{aligned} u_{23} &= \frac{1}{2} \frac{\partial u}{\partial y} \quad , \quad u_{13} = \frac{1}{2} \frac{\partial u}{\partial x}, \\ \sigma_{23} &= C_{44} \frac{\partial u}{\partial y} - e_{15} E_y \quad , \quad \sigma_{13} = C_{44} \frac{\partial u}{\partial x} - e_{15} E_x, \\ D_x &= \varepsilon E_x - e_{15} \frac{\partial u}{\partial x} \quad , \quad D_y = \varepsilon E_y - e_{15} \frac{\partial u}{\partial y}. \end{aligned}$$

Onde assumimos o campo elétrico dado por $\vec{E} = -\vec{\nabla}\phi$, e $\vec{E} = (E_x, E_y, 0)$. Contudo, a equação de movimento $\rho \ddot{u}_i = \partial \sigma_{ik}/\partial x_k$ pode ser reformulada pela Eq. 1.73, onde é possível obter

$$\rho \ddot{u} = C_{44} \nabla^2 u + e_{15} \nabla^2 \phi \quad (1.74)$$

onde é levado em conta que ρ seja a densidade do cristal, e a equação de Poisson $\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = 0$ é detalhada por

$$-\varepsilon \nabla^2 \phi + e_{15} \nabla^2 u = 0 \quad , \quad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}. \quad (1.75)$$

Além disso, leva-se em conta o intervalo $y > 0$, o qual é preenchido por um material com constante dielétrica ε_D , e o potencial ϕ deve satisfazer a equação de Laplace $\nabla^2 \phi = 0$. As soluções para as equações 1.74 e 1.75 representam ondas de superfície

$$\begin{aligned} u &= u_0 \exp[\kappa y + i(qx - \omega t)] \\ \phi &= \phi_0 \exp[\kappa y + i(qx - \omega t)], \end{aligned} \quad (1.76)$$

sendo u_0 e ϕ_0 os coeficientes de amplitude, κ é a constante de atenuação oscilante na profundidade da linha acústica ($\Re(\kappa) > 0$), e q é o número de onda. Utilizando as condições de contorno para $\sigma_{23}|_{y=0}$, de continuidade do potencial, e a componente normal de indução, chega-se através de algumas manipulações matemáticas (BIRYUKOV *et al.*, 1995) na equação de dispersão que descreve as ondas de Gulyaev-Bleustein

$$\kappa = \frac{\eta}{1 + \eta} \cdot \frac{\varepsilon_D}{\varepsilon + \varepsilon_D} q. \quad (1.77)$$

Mostrando que a profundidade κ^{-1} de penetração da onda em uma linha acústica é inversamente proporcional a constante de acoplamento eletromecânico η que frequentemente, é muito menor que um, e depende da constante dielétrica do meio envolvido pelo cristal piezoelétrico. A profundidade mínima de localização da onda é alcançada em uma superfície

metálica ($\varepsilon_D \rightarrow \infty$), obtendo-se $D = \kappa^{-1} \sim \frac{\lambda}{2\pi\eta}$ para a maioria dos cristais piezoelétricos, isto é, $D \gg \lambda$. Porém, para muitos cristais piezoelétricos a profundidade de localização pode ser muito menor que o comprimento de onda. Por fim, são apresentadas a velocidade de OGB e a energia transmitida por uma OGB por unidade de tempo,

$$v = c_t \left[1 - \left(\frac{\eta}{1 + \eta} \right)^2 \left(\frac{\varepsilon_D}{\varepsilon + \varepsilon_D} \right)^2 \right]^{1/2}, \quad (1.78)$$

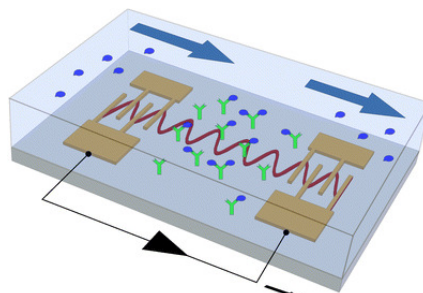
e

$$P_G = C_{44}(1 + \eta)\omega(D'_q \cdot \frac{1}{4}|u_0|^2), \quad (1.79)$$

onde W é a largura da onda, e $D'_q = (q/\kappa - \kappa/q)$. Esta abordagem matemática suporta muitas aplicações das ondas de superfície (WIXFORTH *et al.*, 1989; SIMON, 1996; LÄNGE *et al.*, 2008; DING *et al.*, 2012; STROBL *et al.*, 2004), como é descrito a seguir.

Neste cenário, destacam-se pesquisas utilizando o caso de uma heteroestrutura de $Al_xGa_{1-x}As$ (WIXFORTH *et al.*, 1989; SIMON, 1996). Neste caso, os autores estudaram as interações das ondas acústicas de superfície com elétrons de inversão de alta mobilidade levando a fortes oscilações quânticas na intensidade de ondas de superfície transmitidas, como também, na velocidade do som. Observando ainda a relação entre estas interações com um certo campo magnético, a potência das SAW e a frequência. Os resultados obtidos tiveram como base um semiconductor piezoelétrico semi-isolante, neste caso, o $GaAs$. Descrevendo um sistema eletrônico bidimensional em sua superfície (WIXFORTH *et al.*, 1989). Além dos vários resultados nesta referência, foi demonstrado que a interação de uma SAW com o sistema de elétrons 2-D também pode ser vista em uma estrutura “sanduíche” onde a SAW é excitada e detectada em um meio piezoelétrico separado. Em um modelo análogo, Simon, 1996, investiga um gás de elétrons 2-D sendo coberto por duas camadas de $AlGaAs$, uma acima e outra abaixo. Em seus resultados, o autor (SIMON, 1996) estabelece relações entre a condutividade dos elétrons e a velocidade da SAW, bem como, os efeitos de acoplar as SAW ao gás de elétrons 2-D. Além destas aplicações, é

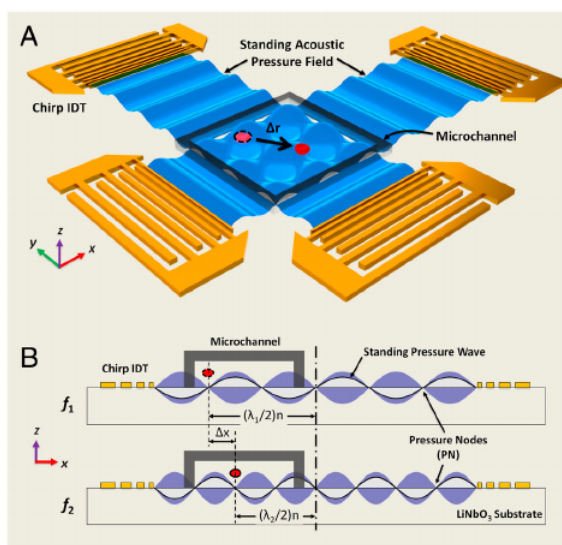
FIGURA 1.15 – Esquema de um biosensor SAW básico, onde se nota uma amostra líquida envolvendo o cristal piezoelétrico, as ondas acústicas de superfície, bem como, outras partes necessárias à construção do dispositivo.



Fonte: Länge, 2008.

importante pontuar alguns outros trabalhos experimentais que investigam por exemplo, a utilização de materiais biológicos e SAW na construção de biosensores (LÄNGE *et al.*, 2008) (ver Fig. 1.15). Seguindo a linha biológica de pesquisa, destaca-se ainda o trabalho de Ding *et al.*, 2012, onde são utilizadas SAW na manipulação de micropartículas, como células e organismos. Esta técnica trás significativas vantagens no manuseio de micropartículas biológicas, como biocompatibilidade e versatilidade (DING *et al.*, 2012). Como ilustração, observa-se na Fig. 1.16 um esquema de montagem e funcionamento deste dispositivo. Por

FIGURA 1.16 – (A) Ilustração esquemática de um dispositivo microfluídico sendo atingido por SAW. (B) Um padrão de SAW geradas por dispositivos com duas frequências f_1 e f_2 distintas.



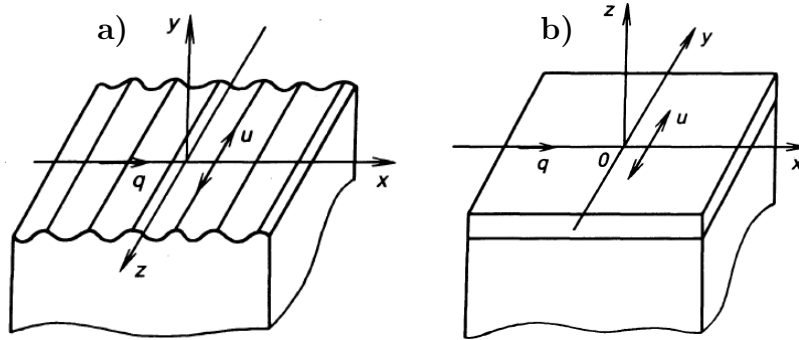
Fonte: Ding *et al.*, 2012.

fim, mas não menos importante, existem aplicações de ondas acústicas de superfície no alinhamento de nanotubos (STROBL *et al.*, 2004). Vale salientar que estas aplicações são baseadas em estruturas piezoelétricas, de acordo com as ondas de Gulyaev-Bleustein.

Estas investigações fazem parte de estudos experimentais, mostrando que o modelo matemático apresentado acima pode ser testado e aplicado tecnologicamente. A seguir, serão apresentados detalhes de como ondas de torção são estruturadas matematicamente e aplicadas.

III - Ondas Love e Outras Ondas de Cisalhamento

Nas circunstâncias das ondas de Gulyaev-Bleustein, a existência de campos elétricos junto a uma onda tensionada em resultados piezoelétricos na geração de uma certa tensão nas bordas, implicando que a solução na forma de um conjunto de ondas não satisfaz as condições de contorno, e daí, um conjunto de ondas se transforma em uma onda de superfície (BIRYUKOV *et al.*, 1995). Sabendo disto, é importante pontuar que perturbações puramente mecânicas nas bordas também são possíveis, e elas ainda são capazes de gerar uma SAW de cisalhamento (ver Fig. 1.17-(a)). Já as ondas Love são ondas espaciais

FIGURA 1.17 – a) Estrutura ilustrada para ondas de cisalhamento, e ondas *Love* b).

Fonte: Biryukov, 1995.

identificadas em estruturas de camadas, Fig. 1.17-(b). Estas ondas obedecem a condição de que se a velocidade do conjunto de ondas de cisalhamento na camada é menor que no meio espacial, as ondas de cisalhamento podem se propagar no sistema. Essas hipóteses nos fornecem, de acordo com Biryukov, 1995, as seguintes expressões

$$\begin{aligned} u_1 &= u_0 \exp[s_1 z + i(qx - \omega t)] \\ u_2 &= \frac{u_0}{\cos s_2 h} \cos [s_2(z - h)] \exp[i(qx - \omega t)], \end{aligned} \quad (1.80)$$

onde u_1 , e u_2 são deslocamentos no meio espacial e na camada, h é a espessura da camada, $s_1 = \sqrt{q^2 - k_1^2}$ e $s_2 = \sqrt{k_2^2 - q^2}$ (k_1 e k_2 são os números de onda do conjunto de ondas de cisalhamento no meio espacial e na camada). Nestas circunstâncias, o número de onda q pode ser determinado a partir da equação de dispersão $\tan(s_2 h) = \mu_1 s_1 / \mu_2 s_2$. No caso de uma camada ($k_2 h \ll 1$) existe apenas um modo *Love*, contudo, para valores grandes do parâmetro $k_2 h$, vários modos *Love* podem existir. O fluxo de energia em uma onda de *Love* é dada por

$$P_L = \frac{1}{2} \mu \omega A |u|^2, \quad (1.81)$$

em que $A = -D'_q$, $D(q, \omega) = (\mu_2 / \mu_1) s_2 \tan(s_2 h) - s_1 = 0$.

As ondas de *Love* são frequentemente usadas em pesquisas experimentais. Teoricamente, essas ondas são às vezes consideradas como um simples tipo de ondas de superfície, desde que os cálculos para as ondas de *Love* sejam muito mais simples do que as ondas de Rayleigh. Ondas *Love* fracamente heterogêneas podem também existir em um meio espaço elástico com superfície heterogênea. Nestas circunstâncias, uma região próxima da superfície de um substrato acústico age como uma camada onde a velocidade é menor que a parte principal da linha acústica (BIRYUKOV *et al.*, 1995).

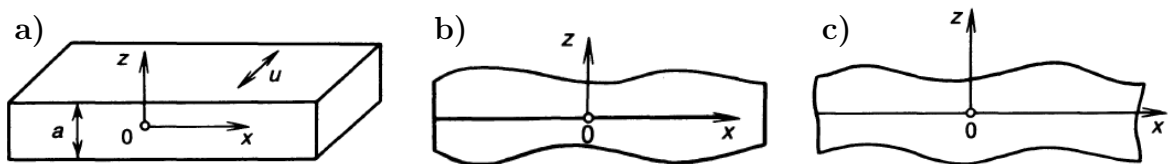
Uma outra possibilidade de perturbação de condições de contorno é previsto pelas heterogeneidades de uma superfície linear acústica 1.17-(b). A propriedade de rigidez próximo da superfície em tal sistema é menor porque predomina na superfície, e isso leva

à existência de ondas transversais de superfície. A velocidade da onda em uma região próxima à superfície diminui, desde que a onda se mostre mais incorporada, isto é, como se estivesse formando ondulações na superfície. Em contraste às ondas de “desnatação” de superfície, as ondas transversais de superfície são ondas de superfície “genuínas”. De modo que, não existe velocidade difraccional da energia da onda ao longo da linha acústica. Isto nos permite o uso de ondas transversais de superfície ao invés de ondas de desnatação de superfície, ganhando uma redução significativa de perdas em linhas de atraso. Contudo, o mesmo sistema de heterogeneidades periódicas essenciais para a existência de ondas podem ser usadas para a reflexão de ondas transversais de superfície.

IV - Ondas em Planos e Estruturas em Camadas.

Seguindo os esboço teórico descrito por Biryukov, 1995. Se ao invés de investigar um meio espacial elástico, forem considerados sistemas mais complicados (pratos, uma camada de substrato, e etc.), isso aumenta imediatamente o número de automodos se propagando em tais sistemas, e os resultados estarão de acordo com o nível de complexidade desta estrutura. Diante deste tema, considera-se aqui ondas se propagando em um prato isotrópico livre (ver Fig. 1.18). As ondas de duas diferentes polarizações podem se propagar em um plano: ondas de cisalhamento puras com deslocamentos paralelos à superfície do prato e perpendicular à direção de propagação ($\vec{u} \parallel y$), como é visto na Fig. 1.18-(a) e com deslocamentos que se encontram no plano sagital xz . No primeiro caso citado, as ondas são chamadas de ondas-SH (ondas horizontais de cisalhamento). Essas ondas são regularmente representadas como uma soma de ondas de cisalhamento planas refletidas sucessivamente a partir das superfícies do plano. Neste caso particular

FIGURA 1.18 – Ondas se propagando em um prato elástico isotrópico livre.



Fonte: Biryukov, 1995.

de polarização, observam-se reflexões sem transformação de ondas transversais em ondas longitudinais. Onde o coeficiente de reflexão é igual a um. Com respeito ao deslocamento das ondas-SH, existe a possibilidade de que o mesmo seja simétrico ou antissimétrico com respeito ao plano ($z = 0$) que atravessa o centro do plano. No primeiro caso, o deslocamento pode ser escrito na seguinte forma:

$$u = u_0 \cos nx \exp [i(qx - \omega t)], \quad (1.82)$$

em que $n^2 = (\omega^2/c_t^2) - q^2$, $n(a/2) = k\pi$, $k = 0, \pm 1, \dots$. Em especial, para $n = 0$, existe uma onda de cisalhamento sem dispersão de propagação no plano, e para $n \neq 0$, os modos

são caracterizados por frequências de cristais e pela dispersão. Analogamente, tem-se as seguintes equações para modos antisimétricos

$$\begin{aligned} u &= u_0 \sin nx \exp [i(qx - \omega t)] \\ n\frac{a}{2} &= \left(k + \frac{1}{2}\right)\pi \quad , \quad k = 0, \pm 1, \dots \end{aligned} \quad (1.83)$$

Os modos com deslocamentos no plano xz (os modos de Lamb) são usais para estruturas mais complicadas. Em outras palavras, no caso onde ocorre tal polarização, as ondas de cisalhamento e as ondas longitudinais se transformam uma na outra através de reflexões nas bordas. Logo, os modos Lamb podem ser considerados como um grupo de ondas longitudinais e transversais acopladas. Existem ainda, dois tipos de modos Lamb: simétricos (ver Fig. 1.18-(b)) e antissimétricos (Fig. 1.18-(c)) com respeito ao plano $z = 0$. Portanto, as equações de dispersão que descrevem os modos de Lamb são escritas na forma:

$$\begin{aligned} (2q^2 - k_t^2) \cos \frac{ma}{2} \sin \frac{na}{2} + 4q^2 mn \sin \frac{ma}{2} \cos \frac{na}{2} &= 0, \\ (2q^2 - k_t^2) \sin \frac{ma}{2} \cos \frac{na}{2} + 4q^2 mn \cos \frac{ma}{2} \sin \frac{na}{2} &= 0, \end{aligned} \quad (1.84)$$

onde $m^2 = (\omega^2/c_e^2) - q^2$, $n^2 = (\omega^2/c_t^2) - q^2$. A solução para a Eq. 1.84 pode ser feita apenas numericamente.

A partir de uma análise sobre a Eq. 1.84, é possível mostrar que o número de modos que pode se propagar no prato, tende a crescer com o aumento do parâmetro qa . Se o valor de qa é menor, $qa \lesssim 1$, apenas dois modos abaixo de “zero” podem se propagar no prato: o mesmo modo, que corresponde a uma onda longitudinal com velocidade $v_{pr} = (c_t/c_e)\sqrt{c_e - c_t}$, e a onda de dispersão flexionada antissimétrica, com velocidade tendendo a zero com $qa \rightarrow 0$:

$$v_{flex} = \left[(qa)^2 \frac{1 - c_t^2/c_l^2}{3} \right]^{1/2} c_t. \quad (1.85)$$

Os sistemas em camadas possuem um rico espectro de automodos. Com a condição de que a espessura da camada seja finita h , o sistema tem uma dimensão característica e todos os modos neste sistema são dispersivos. Através do cenário descrito aqui, distingui-se qualitativamente três casos em especial: Se uma camada é fina ($qh \ll 1$) e não muito diferente de um substrato em suas propriedades elásticas, então existe uma onda de Rayleigh se propagando no sistema, a energia da onda é principalmente concentrada no substrato, e as propriedades da onda são ligeiramente modificadas por causa da existência desta camada. Camadas que podem desacelerar as ondas são usadas na construção de guias de ondas SAW. No segundo caso, coloca-se em evidência a circunstância onde a espessura da camada é da mesma ordem do comprimento de onda ($kh \gtrsim 1$), e

a velocidade das ondas de cisalhamento nessa camada é menor que no substrato, e daí vários modos diferentes com diferentes velocidades e diferentes distribuições espaciais de deslocamentos podem se propagar no sistema. Por fim, se $kh \gg 1$, dois modos podem ser escolhidos a partir de um grande número de modos se propagando no sistema. Ou seja, a onda, neste caso, é caracterizada como uma onda de Rayleigh se espalhando ao longo da borda externa da camada, e apresenta algumas relações entre parâmetros mecânicos. Já a velocidade neste caso, é identificada como v_R no material da camada.

O tipo de estrutura descrita aqui pode estar associado ao estudo da geração de harmônicos (LEAN *et al.*, 1970). Para tanto, foram consideradas propriedades heterogêneas das ondas de superfície, como os efeitos das constantes do material (ex.: constante de espessura elástica). Em suas análises, Lean *et al.*, 1970, pode concluir que a equação de amplitude acoplada pode descrever interações não-lineares de ondas de superfície, de modo fenomenológico. O substrato utilizado nesta experimentação foi construído a partir de duas superfícies ópticamente polidas, baseadas em um corte orientado ao longo do eixo z de uma camada de $LiNbO_3$. Em uma estrutura de não apenas uma camada, mas de várias camadas (multicamadas) feitas de $GaAs$, onde foi investigado o transporte de elétrons viajando à velocidade do som em um canal formado por uma configuração de camadas específicas (HOSKINS *et al.*, 1982). Nesta abordagem, o autor especula que o conceito de SAW levando ao transporte de cargas em $GaAs$ pode auxiliar na implementação de processos de sinais monolíticos em alta velocidade. Percebe-se que as aplicações de SAW na óptica são diversas, fazendo com que este tema seja fundamental no currículo acadêmico. No próximo tópico será analisado o último tipo de ondas em superfície, isto é, ondas em superfícies de cristais.

V - Ondas de Superfície em Cristais.

O último tipo de ondas de superfície descrito por Biryukov, prevê a análise de materiais anisotrópicos (cristais). Estes materiais são mais usuais na construção de dispositivos SAW. Quando a propagação da onda de superfície em cristais é abordada, aparecem possíveis problemas, conhecidos como ondas de superfície podendo se propagar ao longo de algum corte de algum cristal arbitrário em dada direção. Daí, podem nos surgir questionamentos sobre a quantidade de ondas com esta caracterização, o cálculo de suas propriedades, bem como, as modificações causadas pela anisotropia e os efeitos piezo. A resposta a estas questões pode ser encontrada, desde que o problema da propagação de SAW em um cristal piezoelétrico anisotrópico arbitrário não possa ser resolvido analiticamente. Neste caso, apenas o caso de cortes simétricos e direções em cristais cúbicos e hexagonais podem ser investigados analiticamente. A propagação de ondas em cristais piezoelétricos é descrita pela equação,

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_j} = \rho \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} \quad (1.86)$$

que descreve a equação de movimento. As componentes do tensor “stress” σ_{ij} são expressas em termos das componentes do tensor de tensão u_{kl} e as componentes do vetor intensidade elétrica E_k

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl}u_{kl} - e_{kij}E_k, \quad (1.87)$$

onde

$$u_{kl} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_k}{\partial x_l} + \frac{\partial u_l}{\partial x_k} \right), \quad (1.88)$$

e

$$\frac{\partial D_i}{\partial x_i} = 0 \quad (1.89)$$

é a equação de Poisson, com

$$D_i = e_{ikl}u_{kl} - \varepsilon_{ij}E_j, \quad (1.90)$$

\vec{D} é o vetor de indução e \vec{u} é o vetor de deslocamento mecânico de partículas médias.

Na aproximação quasi-estática, válida desde que a velocidade do som seja menor comparada à velocidade da luz, é possível supor $E_j = -\partial\phi/\partial x_j$. Implicando ainda que o vetor de intensidade elétrica é sempre paralelo à direção de propagação no caso de uma onda acústica de um conjunto de planos, e no caso de ondas de superfície, sempre se encontrando no plano sagital (plano vertical que divide um corpo ao meio nas partes direita e esquerda). As componentes dos tensores C_{ijkl} , e_{ikl} e entre outros, devem ser recalculados a partir de um sistema cristalográfico de coordenadas até um sistema necessário no uso de equações específicas. Considera-se agora o resultado da substituição da Eq. 1.87 na Eq. 1.86, onde surge um sistema de quatro equações com quatro variáveis conhecidas. Então, faz-se necessário agora encontrar a solução deste sistema na forma de uma onda de superfície

$$\begin{aligned} u_l &= u_l^{(0)} \exp[-\alpha q x_3] \exp[i(q x_1 - \omega t)], \\ \phi_l &= \phi_l^{(0)} \exp[-\alpha q x_3 + i(q x_1 - \omega t)], \end{aligned} \quad (1.91)$$

é importante destacar que a onda está se propagando ao longo do eixo x_1 , e o eixo x_3 é perpendicular à superfície linear acústica. Em 1.91, q é o número de onda e α é o fator de caracterização da velocidade de oscilações de amortecimento ao longo da linha acústica ($\Re(\alpha) > 0$).

No processo de solução das equações acima, deve-se considerar no cálculo de q , que o mesmo seja um parâmetro independente de ω . Já a solução geral do sistema de equações 1.86-1.90 é uma combinação linear de quatro soluções particulares que devem satisfazer quatro condições de contorno: três condições “mecânicas” ($\sigma_{i3} = 0$) e uma condição “elétrica” (ou o potencial deve ser zero para x_3 para superfícies metalizadas, ou o vetor indução deve ser contínuo para superfícies piezoelétricas livres). Por outro lado, para obter uma solução não trivial, é necessário igualar o determinante desse sistema de

equações lineares a zero. A equação resultante é usualmente solucionada por métodos de interações: para um certo valor da velocidade ω/q , encontra-se os valores correspondentes α_k e $\phi^{(0)}$ através do primeiro sistema e define o determinante do segundo sistema. Então, a velocidade ω/q é mudada e o procedimento é repetido até que o determinante do sistema de condições de contorno seja zero (na prática, deve ser menor que um certo valor dado). O sistema de equações acima pode ser solvido por algoritmos computacionais, de modo a ter o comportamento de SAW em cristais.

Sabe-se da ciência dos materiais que não existem muitos materiais entre os milhares de cristais, incluindo os piezoelétricos utilizados em experimentos de laboratório, que podem satisfazer as altas demandas de produção em massa. Eles são: a existência de cristais com dimensões suficientemente grandes, a possibilidade de gerar uma onda em um dado corte, a estabilidade térmica, pequenas difrações de SAW, e entre outras. Como resultado, verifica-se que apenas poucos materiais (quartz, niobato de lítio, e o tantalato de lítio) podem ser usados. Como foi destacado anteriormente, existe um material em especial que pode ser utilizado nos efeitos de SAW em sólidos, nos referimos aqui, ao *GaAs*. Onde é evidenciado um estudo investigativo sobre o transporte de um único elétron de alta frequência em um canal de *GaAs* quasi-unidimensional mediado por ondas acústicas de superfície (SHILTON *et al.*, 1996). Este estudo foi estendido para o caso específico de um canal 1-*d* (TALYANSKII *et al.*, 1997). Os resultados experimentais encontrados pelos autores demonstraram que o transporte de “cargas” acústicas em um canal unidimensional pode ser um meio viável de produzir um padrão de corrente elétrica. Bem como, na investigação da transferência de elétrons entre pontos quânticos distantes (MCNEIL *et al.*, 2011). Nesta aplicação em especial, considerou-se um pulso de SAW para auxiliar na transferência de elétrons. Até o momento, no geral, nos referimos à SAW em materiais 2-*d*, mas o que ocorreria se o tema de estudo fossem ondas acústicas de superfície em um sistema unidimensional? A seguir, devem ser apresentados aspectos sobre ondas acústicas geradas por bombeamentos controlados.

- *SAW e Interação Elétron-Rede.*

Supondo uma rede unidimensional de N partículas de massa $m_i = m = 1$ ligadas por molas de acordo com a Lei de Hooke, isto é, uma rede com força linear nos deslocamentos das massas q_i , visto que, a força elástica F_{ela} entre as massas m seja $F_{ela} = -Kq$, com $K = 1$. Portanto, se a energia cinética devido ao movimento das massas seja dado por $E_{cin} = \sum_{i=1}^N \frac{P_i^2}{2m}$, com $P_i = m \frac{dq_i}{dt}$. E a energia potencial elástica dada por $E_{ela} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N F_{ela_i} \Delta q_i = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N K(q_i - q_{i-1})^2$. De acordo com Kittel, 2005, se considerarmos apenas as interações entre os primeiros vizinhos, a força total entre os sítios $i - 1$, i e $i + 1$ é dada por $F_{ela_i} = -K[(q_{i+1} - q_i) + (q_i - q_{i-1})]$ (KITTEL, 2005). E portanto, $E_{ela} = \frac{K}{4} \sum_{i=1}^N [(q_{i+1} - q_i)^2 + (q_i - q_{i-1})^2]$. Fazendo $m = K = 1$, tem-se que a hamiltoniana

da rede $H_l = E_{cin} + E_{ela}$ é dada por

$$H_l = \sum_{i=1}^N \frac{P_i^2}{2} + \frac{1}{4} \sum_{i=1}^N [(q_{i+1} - q_i)^2 + (q_i - q_{i-1})^2]. \quad (1.92)$$

Esta Hamiltoniana, nos permite obter, de acordo com as equações de Hamilton, a equação clássica que governa as vibrações na rede, dada por

$$\frac{d^2 q_i}{dt^2} = q_{i+1} - 2q_i + q_{i-1}. \quad (1.93)$$

A Eq. 1.93 representa o modo como os fônons viajam na rede, neste caso em uma rede cristalina (onde os átomos possuem características idênticas e se ligam todos da mesma forma). Pode-se utilizar vários métodos numéricos para resolver esta equação, como o método Runge-Kutta de quarta ou oitava ordem, o método de Euler, e entre outros métodos. Aqui, vamos ilustrar o referencial teórico resolvendo numericamente a Eq. 1.93, para tanto utilizamos uma técnica com discretização no tempo (método de diferença finita *DF*) (NETO *et al.*, 2016), onde reescrevemos a Eq. 1.93 da seguinte forma:

$$\frac{d^2 q_i}{dt^2} \approx \frac{q_i(t + \Delta t) - 2q_i(t) + q_i(t - \Delta t)}{(\Delta t)^2}. \quad (1.94)$$

De acordo com Neto *et al.*, 2016, podemos aplicar a fórmula anterior à equação clássica, de forma a obter uma equação que pode ser solvida numericamente,

$$q_i(t + \Delta t) \approx 2q_i(t) - q_i(t - \Delta t) + (\Delta t)^2 (q_{i+1}(t) - 2q_i(t) + q_{i-1}(t)), \quad (1.95)$$

onde devemos utilizar $\Delta t = 1 \times 10^{-3}$. Para gerar as ondas acústicas de superfície (SAW), vamos considerar $q_i(t = 0) = P_i(t = 0) = 0$ para i dentro do intervalo $[1, N]$. E levar em conta um bombeamento de ondas acústicas no extremo esquerdo da cadeia (no sítio $i = 0$), dadas por um pulso harmônico e gaussiano, respectivamente,

$$q_0 = Q_0 \cos \omega t, \quad (1.96)$$

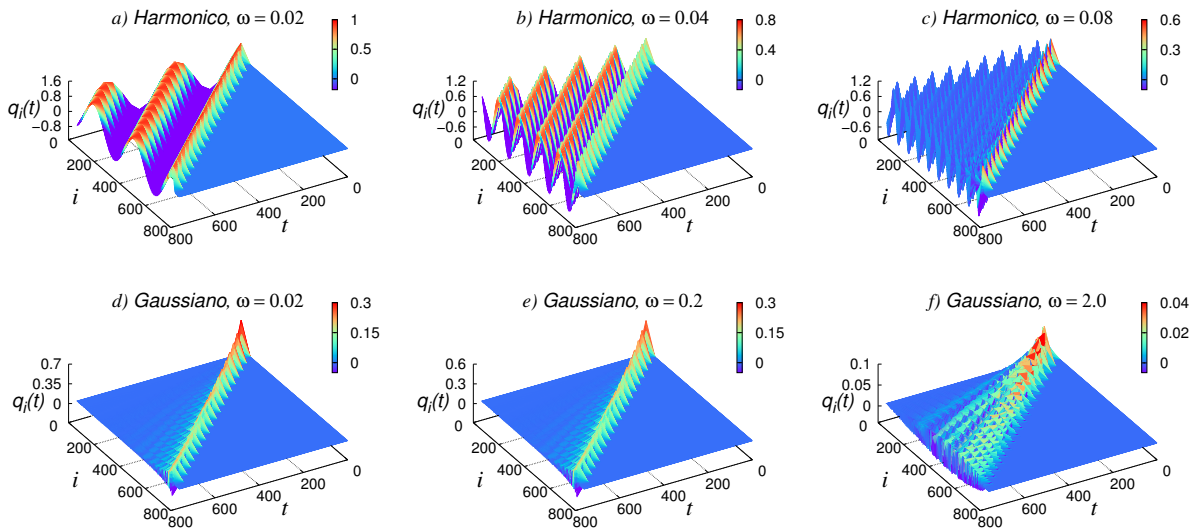
e

$$q_0 = Q_0 e^{-t^2/\zeta} \cos \omega t, \quad (1.97)$$

onde temos a constante $\zeta = 10$ e $Q_0 = 1$ sendo a amplitude de q_0 . Mostramos na Fig. 1.19 a solução numérica para q_i com ambos os bombeamentos representados acima.

A Fig. 1.19, mostra no geral, a influência da frequência ω sobre um pulso *Harmônico* (Figs. 1.19-(a), 1.19-(b) e 1.19-(c)) e *Gaussiano* (Figs. 1.19-(d), 1.19-(e) e 1.19-(f)) em uma rede harmônica unidimensional pura. Como medida estudamos o deslocamento q_i do

FIGURA 1.19 – Deslocamento q_i variando com a rede i e o tempo t para um pulso *Harmônico* (a), (b) e (c). E para um bombeamento *Gaussiano* (d), (e) e (f). Os resultados sugerem no geral, que o pulso *Gaussiano* tende a ser dominante na dinâmica acústica em relação ao pulso *Harmônico*. Além disso, a onda acústica gerada por um pulso *Gaussiano* se mostra pouco sensível à baixas frequências ($\omega = 0.02$ e 0.2) e tende a ficar mais espalhada e com menor intensidade para tempo longo ($t \rightarrow 800$) no caso de $\omega = 2.0$. Já no caso de um bombeamento *Harmônico*, o comportamento da onda acústica se mostra altamente sensível à variação da frequência ω como era de se esperar. Identificamos a formação de vários picos para $\omega = 0.02$ e 0.04 ((a) e (b), respectivamente) de intensidade similar, e a formação de um pico dominante para o caso $\omega = 0.08$ (c), sugerindo a presença de uma onda solitária.



Fonte: Autor, 2016.

i -ésimo átomo ao longo do tempo t , para tanto, investigamos vários valores de frequência ($\omega = 0.02, 0.04, 0.08, 0.2$ e 2.0). Os resultados indicados pelo pulso *Harmônico* estão de acordo com o aspecto periódico da função cosseno (Eq. 1.97), de modo que em certas frequências ($\omega = 0.02$, Fig. 1.19-(a) e $\omega = 0.04$, Fig. 1.19-(b)) a rede vibra periodicamente. Este comportamento promove a formação de vários picos, com aproximadamente a mesma intensidade e quantidade associada ao valor da frequência. Por outro lado, na Fig. 1.19-(c), observamos que as vibrações da rede geradas pelo bombeamento *Harmônico* continuam a formar vários picos associados ao valor da frequência, porém, agora observamos que a onda acústica propagada inicialmente em $t = 0$ tende a ser dominante em termos de intensidade. Em outras palavras, dizemos que a onda elástica propagada no início da dinâmica tem comportamento solitário. Esta onda elástica solitária é geralmente chamada de onda solitônica. Vale ressaltar que foi necessário aumentar substancialmente a frequência para adquirir o comportamento citado anteriormente. Utilizando agora o bombeamento gerado por uma gaussiana multiplicada por uma função periódica (Eq. 1.97). Observamos nas Figs. 1.19-(d), 1.19-(e) e 1.19-(f) a dominância da função gaussiana em relação a função periódica cosseno, tal indício é atribuído a formação de um único pico associado ao deslocamento q_i ao longo da rede i e do tempo t . Outro aspecto que vale ressaltar, é o efeito

da frequência sobre a única onda acústica formada neste cenário. Tendo este objetivo em mente, investigamos as frequências $\omega = 0.02, 0.2$ e 2.0 para o bombeamento *Gaussiano*. Os resultados sugerem que no limite de baixas frequências ($\omega = 0.02$ e 0.2) a onda acústica mostra aspectos físicos similares (intensidade, comprimento de onda, amplitude, etc). Porém, para $\omega = 2.0$, percebemos um comportamento singular, este comportamento se traduz pelo fato de que a onda acústica perde intensidade e tende a ficar mais espalhada ao longo da rede para tempos longos ($t \rightarrow 800$), como podemos perceber na Fig. 1.19. É importante deixar fixado, que os resultados e discussões são puramente especulativos, e tendem apenas a dar melhor compreensão sobre os temas de pesquisa que iremos abordar nos próximos capítulos, em especial o Capítulo 5.

Agora, iremos usar os conceitos estabelecidos na seção 1.4.1, mais especificamente, sobre o acoplamento elétron-rede segundo o Modelo SSH, para mostrar como as equações de dinâmica ficam, quando consideramos uma rede $1-d$ com átomos de características distintas sendo bombeada por um pulso *Harmônico* ou *Gaussiano* e acoplada a um elétron solto na mesma extremidade do pulso acústico. Fazendo uso da hamiltoniana SSH, descrita por

$$\begin{aligned}
H_{SSH} &= \sum_{i=1}^N \epsilon_i f_i f_i^\dagger + \sum_{i=1}^N (\tau_{i+1,i} f_{i+1}^\dagger f_i + H.c.) \\
&+ \sum_{i=1}^N \frac{P_i}{2m_i} \\
&+ \frac{1}{4} \sum_{i=1}^N \left[(q_{i+1} - q_i)^2 + (q_i - q_{i-1})^2 \right].
\end{aligned} \tag{1.98}$$

Onde temos considerado as constantes de vibração elásticas entre os átomos sendo idênticas e iguais a unidade. Daí, de modo análogo à seção 1.4.1, as equações que governam a dinâmica do elétron e das vibrações da rede são dadas por,

$$i\hbar \frac{d\phi_i(t)}{dt} = \epsilon_i \phi_i(t) - [1 - \alpha(q_{i+1} - q_i)] \phi_{i+1}(t) - [1 - \alpha(q_i - q_{i-1})] \phi_{i-1}. \tag{1.99}$$

e

$$\begin{aligned}
m_i \frac{d^2 q_i(t)}{dt^2} &= (q_{i+1} - q_i) - (q_i - q_{i-1}) \\
&+ \alpha [(\psi_{i+1}^* \phi_i + \phi_{i+1} \phi_i^*) - (\phi_i^* \phi_{i-1} + \phi_i \phi_{i-1}^*)].
\end{aligned} \tag{1.100}$$

Para tais equações, temos utilizado $|\Phi(t)\rangle = \sum_i \phi_i(t) |i\rangle$ e $\tau_{i+1,i} = -[\tau_0 - \alpha(q_{i+1} - q_i)]$ na Eq. 1.99, com τ_0 sendo *hopping* efetivo e α o parâmetro de acoplamento. Já a Eq. 1.100 é obtida por intermédio do formalismo das equações de Hamilton. Portanto, se tivermos novamente um pulso acústico sendo gerado no lado esquerdo da rede $1-d$, isto é, em

q_0 . E considerando $\phi_i(t = 0) = \delta_{i,1}$, teremos que a dinâmica das vibrações da rede gerada por um pulso acústico (ver Eq. 1.96 e 1.97) está acoplada à dinâmica do elétron. Contudo, a partir deste formalismo é possível investigar a influência de SAW na dinâmica eletrônica. Com base no formalismo descrito acima, Neto *et al.*, 2016, fez uma interessante investigação sobre a dinâmica de um pacote de ondas inicialmente localizado em cadeias unidimensionais desordenadas sob o efeito da interação elétron-rede e o bombeamento de ondas acústicas (bombeamento *Harmônico*). Neste trabalho, levou-se em conta que a energia de transferência (*hopping*) entre os átomos vizinhos varie exponencialmente com a distância efetiva entre os átomos. Os resultados apresentados pelo autor, indicam que mesmo dentro da aproximação harmônica, o acoplamento com uma onda acústica se propagando ao longo da rede pode promover o transporte de cargas (NETO *et al.*, 2016). Este trabalho compõe a segunda publicação como colaborador no doutorado, e se encontra na íntegra no anexo .

2 Espectro de Absorção e Estatística do Espaçamento entre Níveis em uma Liga Ternária Desordenada OU

2.1 Introdução

Quando pensamos na propagação de um único elétron em cadeias desordenadas, nos colocamos em uma temática que tem sido de grande interesse para a comunidade científica durante várias décadas (ABRAHAMS *et al.*, 1979; KRAMER *et al.*, 1993; GARCÍA-GARCÍA, 2008; VASQUEZ *et al.*, 2008; MODUGNO, 2009; TIAN *et al.*, 2010; TIAN *et al.*, 2009; STEINIGEWEG *et al.*, 2010; HONG-JUAN *et al.*, 2010; GASPARIAN *et al.*, 2011; GASPARIAN *et al.*, 2009; RODRIGUEZ *et al.*, 2009; RODRIGUEZ *et al.*, 2010; KRIVOLAPOV *et al.*, 2012; LEMARIÉ *et al.*, 2010; RODRIGUEZ *et al.*, 2011; KRICH *et al.*, 2011; ZHAO *et al.*, 2012; ZHANG *et al.*, 2012; BARANOVSKII *et al.*, 1991; THOULESS, 2010; JOHN, 1990; de MOURA, 2011; Costa *et al.*, 2011). A teoria de escala de Anderson tem por hipótese de que não existem autoestados estendidos em sistemas de baixa dimensionalidade para alguns níveis de desordem específicos. No entanto, a partir do fim da década de oitenta surgiram investigações em torno de sistemas desordenados de baixa dimensionalidade indicando a presença de estados estendidos ou uma transição localização-deslocalização na presença de correlação de curto ou longo alcance na distribuição de desordem (FLORES, 1989; DUNLAP *et al.*, 1990; WU *et al.*, 1991; de MOURA *et al.*, 1998; de MOURA *et al.*, 2004; dos SANTOS *et al.*, 2007; DOMÍNGUEZ-ADAME *et al.*, 2003; de MOURA, 2010; IZRAILEV *et al.*, 1999; IZRAILEV *et al.*, 2001; LIU *et al.*, 1999; ZHANG *et al.*, 2002; BELLANI *et al.*, 1999; SHIMA *et al.*, 2004; KUHL *et al.*, 1993; CHERAGHCHI *et al.*, 2005; SCHUBERT *et al.*, 2005; IZRAILEV *et al.*, 2012; LONG-YAN *et al.*, 2011; ESMAILPOUR *et al.*, 2007; CROY *et al.*, 2012; ALBRECHT *et al.*, 2012; PETERSEN *et al.*, 2013). Estes trabalhos apontam previsões teóricas de que seja possível observar a localização em um filtro de multicamadas desordenadas (HILKE, 2009; CRISANTI, 1990), originando assim, um novo campo de investigação, que tende a estudar os efeitos de desordem correlacionada em sistemas ópticos. Os formalismos teóricos de multicamadas dielétricas desordenadas podem ser mapeados na Hamiltoniana de

um elétron em um meio desordenado, onde existem certas familiaridades entre dímeros desordenados e versões desordenadas do termo fora da diagonal no modelo de Anderson (NASCIMENTO *et al.*, 2007). Os efeitos de desordem correlacionada envolvendo os problemas de transporte, em geral, são de grande interesse para a comunidade científica, mesmo os problemas que não abordam modelos de apenas um elétron. Como exemplo, verificamos na literatura estudos que investigam os efeitos de desordem correlacionada nos autoestados de magnos em ferromagneto desordenado (de MOURA *et al.*, 2002; de MOURA, 2007) e movimentos vibracionais coletivos de cadeias harmônicas desordenadas unidimensionais (1-*d*) (DOMÍNGUEZ-ADAME *et al.*, 1993; DATTA *et al.*, 1994; de MOURA *et al.*, 2003; ALBUQUERQUE *et al.*, 2005; de MOURA *et al.*, 2008). Nestes dois casos, os autores demonstraram que a desordem correlacionada leva a um novo grupo de modos não espalhados. De um modo geral, os trabalhos feitos nesta linha de pesquisa (desordem correlacionada), consideram sistemas em que as energias dos sítios sejam uniformemente distribuídas em uma escala finita de desordem $[-W, W]$, onde W , é comumente chamado de parâmetro de desordem. Em algumas linhas de investigação (ESMAILPOUR *et al.*, 2007; LAZO *et al.*, 2010; LAZO *et al.*, 2011; LONG-YAN *et al.*, 2011; SALES *et al.*, 2012), têm-se considerado formalismos onde a energia *on-site* pode assumir dois ou três valores diferentes, ou seja, modelos binários e ternários, respectivamente. O modelo de Anderson com desordem correlacionada de longo alcance baseada em uma sequência ternária, por exemplo, foi abordado por (ESMAILPOUR *et al.*, 2007). Sabe-se que, se a sequência das energias *on-site* é gerada por uma distribuição totalmente desordenada, o sistema é considerado como um isolante. Porém, de acordo com a literatura, a geração de uma desordem diagonal ternária com correlações de longo alcance, pode dar indícios de uma transição de fase localizado-deslocalizado (ESMAILPOUR *et al.*, 2007). Os efeitos de correlações de longo alcance na distribuição de capacitores de linhas transmissão clássicas (LT) foram estudados por (LAZO *et al.*, 2010; LAZO *et al.*, 2011). Nestes casos, a distribuição correlacionada ternária de capacitâncias é gerada através do método de filtragem de Fourier (LAZO *et al.*, 2010), e ainda pelo processo Ornstein-Uhlenbeck (OU) (LAZO *et al.*, 2011). E em ambos, observou-se uma transição de estados não condutores para estados condutores nas LT, tal aspecto foi atribuído a fortes níveis de correlação. Neste mesmo cenário, podemos citar o estudo em torno de cadeias harmônicas clássicas ternárias 1-*d* com a distribuição de massas construída a partir de um processo OU (SALES *et al.*, 2012). Onde os aspectos de localização de todos os autoestados vibracionais foram obtidos por meio do formalismo de matrizes de transferência. O consenso previsto pelos autores indica que apenas os modos de frequência não nulos podem se propagar através da cadeia, e portanto, indo de encontro a outras previsões (ESMAILPOUR *et al.*, 2007; LAZO *et al.*, 2010; LAZO *et al.*, 2011).

Os efeitos de desordem correlacionada nas propriedades de espectroscopia ótica (AS-SUNCÃO *et al.*, 2011; DÍAZ *et al.*, 2005; DOMÍNGUEZ-ADAME *et al.*, 1999; EISFELD *et al.*, 2010; EISFELD *et al.*, 2012; MALYSHEV *et al.*, 1999; WERPACHOWSKA *et al.*, 2012) é um tipo de pro-

blema comum no contexto da física da matéria condensada. Sabe-se que a espectroscopia ótica tem dificuldades em detectar transições do tipo localização-deslocalização. Mas no trabalho de (DÍAZ *et al.*, 2005), identificou-se numericamente um comportamento anômalo do espectro de absorção em uma rede 1- d com desordem diagonal correlacionada de longo alcance. Que consiste na presença do duplo pico do espectro de absorção, esta observação por sua vez é a única ferramenta espectroscópica para verificar a transição de Anderson. Além disso, na pesquisa de (ASSUNCÃO *et al.*, 2011), um duplo pico do espectro de absorção foi numericamente observado na rede 1- d com desordem correlacionada de longo alcance fora da diagonal. E ainda, em (EISFELD *et al.*, 2010), foi realizado um detalhado estudo em torno das propriedades óticas em modelos 1- d com distribuição de desordem Levy “heavy-tailed” (distribuições de probabilidade cujas caudas não são exponencialmente delimitadas, isto é, elas têm caudas mais preenchidas do que uma distribuição exponencial comum que tem a maioria dos pontos em torno do centro da distribuição). Os autores observaram uma ampliação das linhas óticas e uma escala não universal da distribuição dos comprimentos de localização dos excítons. A escala da largura de banda na absorção ótica e a não universalidade do comprimento de localização dentro de modelos com distribuição de desordem Levy foram revisadas em (EISFELD *et al.*, 2012) e (WERPACHOWSKA *et al.*, 2012). É importante salientar que a partir de uma revisão detalhada na literatura, percebemos que o estudo sobre propriedades de espectroscopia ótica em sistemas de baixa dimensionalidade com desordem correlacionada ternária, é ainda muito pouco explorado.

Salientamos que a existência ou a inexistência de uma transição de fase em modelos ternários com desordem correlacionada representa um interessante e controverso assunto (ESMAILPOUR *et al.*, 2007; LAZO *et al.*, 2010; LAZO *et al.*, 2011), com interesses do ponto de vista experimental e teórico. A possibilidade de gerar sistemas realísticos a partir de desordem correlacionada ternária, pode ser uma possível ferramenta para confrontar os procedimentos teóricos e experimentais, e também permitir a construção de novos materiais com propriedades convenientes ou ajustáveis. Contudo, uma análise estatística mais detalhada dos automodos e uma descrição das propriedades óticas nos modelos ternários eletrônicos é ainda ausente. No trabalho apresentado aqui, devemos mostrar algumas evidências ao longo desta linha de pesquisa. Nós estudaremos a absorção ótica e a distribuição de espaçamentos entre níveis em modelos 1- d com distribuição de desordem diagonal ternária seguindo o processo OU. A partir deste modelo, montamos uma distribuição de desordem diagonal, sendo inicialmente gerada pelo processo OU e mapeada em uma sequência de três valores diferentes. A probabilidade de cada valor é controlada por um parâmetro fixo b . Desta forma, podemos gerar um potencial diagonal ternário com correlações de longo alcance. Uma vez construído o modelo, realizamos uma diagonalização numérica exata para calcular a distribuição de espaçamentos entre níveis e o espectro de absorção ótica. Os resultados obtidos, indicam que a distribuição de espaçamentos entre níveis próxima do centro da banda tem aspectos de uma distribuição

de Poisson. Esse resultado nos informa que todos os autoestados são localizados, e assim contradizendo outras investigações que destacam a existência de estados estendidos em modelos com desordem correlacionada diagonal ternária (ESMAILPOUR *et al.*, 2007). Dentro do contexto do espectro de absorção ótica, os resultados indicam um grupo de picos inesperados dentro do espectro de absorção. Nas seções que se sucedem, veremos em detalhes a origem de cada pico.

2.2 Modelo Eletrônico Ternário

À semelhança de outros modelos eletrônicos, consideramos aqui, um Hamiltoniano *tight-binding* de um elétron com energia de *hopping* J e distribuição de desordem *on-site* ϵ_n (SALES *et al.*, 2012)

$$H = \sum_{n=1}^N \epsilon_n |n\rangle \langle n| - J \sum_{n=1}^{N-1} (|n\rangle \langle n+1| + |n-1\rangle \langle n|), \quad (2.1)$$

onde $|n\rangle$ é um estado localizado de Wannier no sítio n com a energia *on-site* ϵ_n . O acoplamento inter-sítio J é restrito apenas aos primeiros vizinhos e assume valores uniformes em toda a rede ($J = 1$). A fonte de desordem é a flutuação estocástica dos termos *on-site*. Estas flutuações estocásticas são calculadas através do processo OU (LAZO *et al.*, 2011; SALES *et al.*, 2012). O processo OU é definido pela equação diferencial estocástica:

$$\frac{dx}{dt} = -\gamma x(t) + \sqrt{C} \beta(t), \quad (2.2)$$

em que o parâmetro γ acima representa o coeficiente de viscosidade, C é o coeficiente de difusão e $\beta(t)$ é o termo estocástico (LAZO *et al.*, 2011; SALES *et al.*, 2012). $\beta(t)$ é um ruído branco Gaussiano gerado pelo processo Box-Muller com as seguintes propriedades: $\langle \beta(t) \rangle = 0$ e $\langle \beta(t) \beta(t+\tau) \rangle = \delta(\tau)$. Esse processo estocástico contém correlações entre cada incremento, os quais são definidos por $\langle x(t) x(t+\tau) \rangle = \frac{C}{2\gamma} e^{-\gamma\tau}$ (LAZO *et al.*, 2011; SALES *et al.*, 2012). Como complemento ao procedimento, geramos a desordem diagonal através do processo OU. Para tanto, consideramos o formalismo numérico descrito em (GILLESPIE, 1996), que possui como suporte a versão discreta da Eq. 2.2. Na forma discreta, $x(t)$ é reescrito como x_n , sendo n o número de incrementos temporais ($t = n\Delta t$). Logo, a forma discreta da Eq. 2.2 é dada por (GILLESPIE, 1996)

$$x_{n+1} = (e^{-\gamma\Delta t})x_n + \left(\frac{C}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma\Delta t}) \right)^{1/2} \beta_n. \quad (2.3)$$

Agora, devemos encontrar apenas qual é a forma de β_n . Como notamos, β_n é uma sequência em n , que neste caso, usamos o algoritmo Box-Muller para determiná-la,

$$\beta_n = \left(2 \ln \frac{1}{r_n} \right)^{1/2} \cos 2\pi a_n, \quad (2.4)$$

onde r_n e a_n são números aleatórios uniformes definidos no intervalo $[0,1]$. O processo de normalização de x_n é feito de tal forma que o mesmo tenha média nula e que a variância seja igual a unidade. De acordo com (LAZO *et al.*, 2011) e (SALES *et al.*, 2012), devemos considerar $C = \gamma^2$ e, portanto, o grau de correlação do processo OU fica controlado por um simples parâmetro γ . Para $\gamma \rightarrow \infty$, a sequência OU se encontra envolvida no ruído branco Gaussiano. Para $\gamma \rightarrow 0$, o grau de correlação da sequência desordenada deve crescer. Usando a sequência normalizada x_n gerada pelo processo OU, nós nos tornamos capazes de construir uma distribuição de energias *on-site* ternária, como se segue abaixo:

$$\epsilon_n = \begin{cases} -\zeta & \text{se } x_n < -b, \\ 0 & \text{se } -b \leq x_n \leq b, \\ \zeta & \text{se } x_n > b \end{cases} \quad (2.5)$$

em que $b > 0$ governa a probabilidade de cada possível valor da energia *on-site*. A “largura” da distribuição de desordem depende do valor de ζ , isto é, é um parâmetro que podemos ajustar de acordo o valor de b (LAZO *et al.*, 2011; SALES *et al.*, 2012).

2.3 Medidas Numéricas

A fim de investigar o espectro de absorção e a distribuição de espaçamentos entre níveis para este modelo, fizemos um procedimento de diagonalização exata em redes com tamanho finito N . Para tanto, estudamos o espectro de absorção definido na forma (DÍAZ *et al.*, 2005; ASSUNCÃO *et al.*, 2011),

$$A(E) = \frac{1}{N} \sum_{\omega} \delta(E - E_{\omega}) F_{\omega}. \quad (2.6)$$

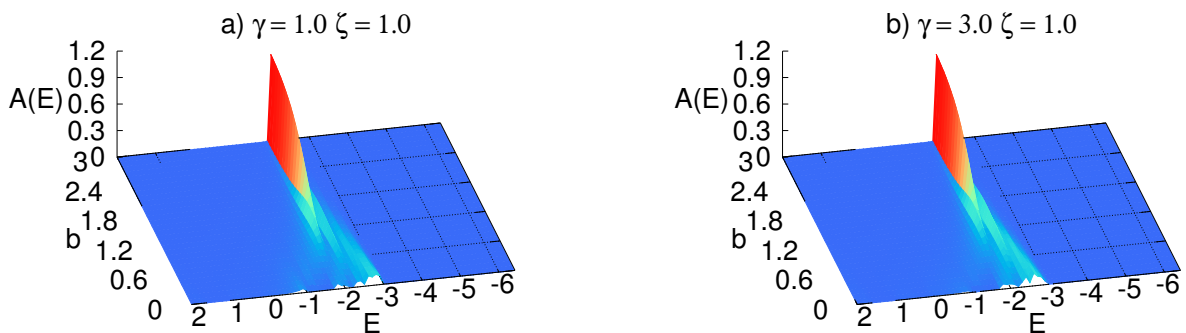
A quantidade F_{ω} descrita acima define a intensidade dos osciladores associada com o autovalor ω , dada matematicamente por $F_{\omega} = [\sum_n \phi_n(E_{\omega})]^2$. Em nossa abordagem, consideramos o fato de que quando o termo fora da diagonal é negativo e a diagonal é uma distribuição com desordem descorrelacionada, os autoestados com mais alta intensidade dos osciladores estão na borda inferior da banda. Como complemento a nossa análise, investigamos a estatística dos espaçamentos entre níveis de energia em torno do centro da banda. No caso de sistemas com apenas um elétron, os estados localizados são descorrelacionados em relação a energia e são distribuídos de acordo com uma lei de Poisson $P(S) = e^{-S}$,

onde S indica a medida dos espaçamentos entre os níveis em unidades do espaçamento médio. Por outro lado, autofunções estendidas repelem as restantes, e sua distribuição de espaçamento entre níveis assume a forma de Wigner $P(S) \propto Se^{CS^2}$ (MEHTA, 2004; LIMA *et al.*, 2004). Segundo a transição de Anderson, uma nova estatística crítica universal separa os comportamentos descritos pelas leis de Wigner e Poisson, sugerindo que seja uma consequência da multifractalidade das funções de ondas críticas (EVANGELOU *et al.*, 1996). Para encontrar a distribuição de espaçamentos entre níveis, foi utilizada uma janela de energia próxima do centro da banda $(-0.5, 0.5)$. Ciente deste objetivo, utilizamos um procedimento de desdobramento espectral, de forma a fazer a média dos espaçamentos entre níveis ser equivalente à unidade em cada segmento da janela de energia (EVANGELOU *et al.*, 1996).

2.4 Resultados e Discussões

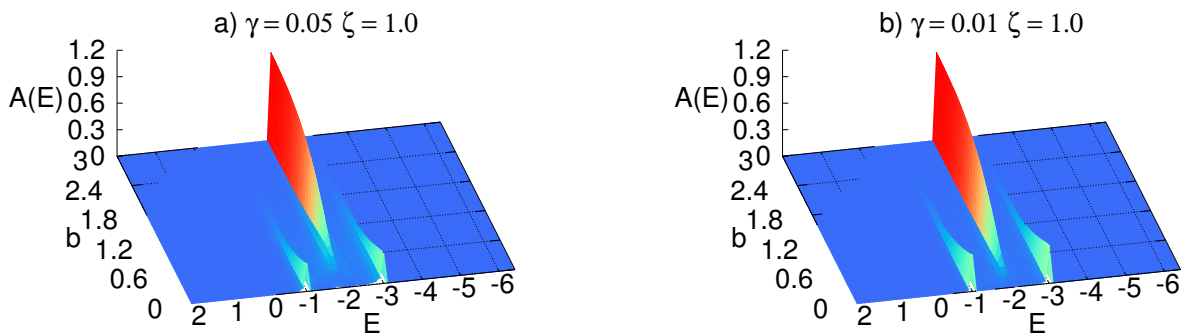
A partir da solução numérica da Eq. 2.6 usando uma rede unidimensional com $N = 10000$ sítios, $\zeta = 1$ e 10^2 amostras de desordem para cada valor de γ e b , produzimos as Figuras 2.1 e 2.2, estas figuras mostram a saída de dados destes cálculos. Em nossas análises, percebemos que no limite $b \gg 0$ e em todos os valores de γ estudados, a medida em estudo (espectro de absorção) mostra um simples pico, ligeiramente acima do limite da

FIGURA 2.1 – Cálculos numéricos da Eq. 2.6 usando $N = 10000$ sítios, $\zeta = 1.0$, 10^2 configurações de desordem, $\gamma = 1$ e 3 . Foi observado para $b \gg 0$, em ambos os painéis, que o espectro de absorção exibe um pico único ligeiramente acima do limite da banda inferior $E = -2$. Neste limite, o valor $\epsilon_n = 0$ é mais frequente que outros valores e portanto, podemos readquirir um modelo $1-d$ com desordem diagonal fraca. Daí, o arranjo estudado tem boa concordância, visto que, encontramos apenas um pico. Por outro lado, para $b \rightarrow 0$ o processo OU se torna uma série decorrelacionada. Logo, podemos obter um potencial binário decorrelacionado. Este comportamento explica o único e largo pico do espectro de absorção neste limite.



borda inferior $E = -2$ da cadeia periódica. Sugerindo, portanto um aspecto semelhante ao que é observado em sistemas 1- d com desordem diagonal fraca. No outro limite de valores de b , isto é, $b \rightarrow 0$, as Figs. 2.1-(a) e 2.1-(b) indicam que o espectro de absorção exibe um pico ligeiramente alargado acima da borda inferior $E = -2$. Logo, para valores de b na tendência $b \rightarrow 0$ é possível recobrar o comportamento do espectro de absorção observado em redes 1- d com uma desordem diagonal descorrelacionada. Quando estudamos valores pequenos de correlação, ou seja, as Figs. 2.2-(a) e 2.2-(b), devemos ter cálculos para $\gamma \rightarrow 0$ (limite de correlação forte). Neste cenário, observamos para b pequeno que $A(E)$ fornece indícios de um grupo de picos estreitos inesperados. Percebemos também que no limite de correlações fortes ($\gamma \rightarrow 0$), a depender do valor de b , conseguimos ver um grupo triplo de picos bem definidos (em torno de $b \approx 0.5$). Salientamos que em modelos desordenados tradicionais, costuma-se encontrar um único pico em torno do estado mais baixo (DÍAZ *et al.*, 2005; ASSUNÇÃO *et al.*, 2011).

FIGURA 2.2 – Resultado numérico do espectro de absorção no limite de fortes correlações ($\gamma \rightarrow 0$). Os cálculos mostrados abaixo são baseados na Eq. 2.6, e foram feitos para $N = 10000$ sítios, $\zeta = 1$ e 100 configurações de desordem. Podemos observar que no regime de b pequeno, forma-se um perfil do espectro de absorção não intuitivo. Outro aspecto importante é observado para $b \approx 0.5$, onde surge um conjunto de três picos bem definidos. Por fim, para $b \rightarrow 0$, os cálculos sugerem a presença de apenas dois picos bem formados.



Fonte: Autor, 2016.

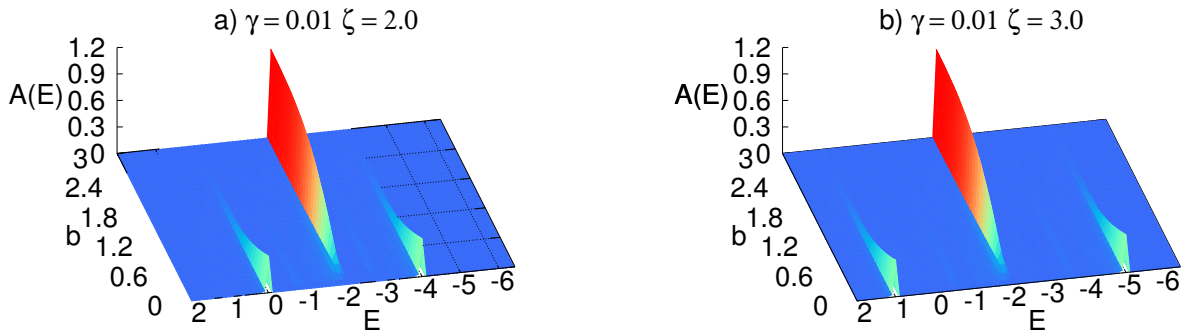
A compreensão desses novos grupos de picos do espectro de absorção deve vir através de um estudo detalhado das propriedades locais de desordem diagonal e da aplicação de um procedimento heurístico (DÍAZ *et al.*, 2005). A princípio, vamos lembrar que o parâmetro b governa a distribuição de probabilidade de cada valor $-\zeta, 0, \zeta$ da distribuição diagonal. Para todos os valores de γ e $b > 1$, o valor de $\epsilon_n = 0$ é mais frequente que os outros valores e assim, recobramos um modelo 1- d com fraca desordem diagonal. O único pico estreito visto nas Figs. 2.1-(a) e 2.1-(b) para b grande está em bom acordo com a absorção $A(E)$ para um modelo 1- d com desordem diagonal fraca (DÍAZ *et al.*, 2005). Para $b \rightarrow 0$, obtemos uma distribuição de desordem binária, ou seja, dois valores $(-\zeta, \zeta)$ distribuídos aleatoriamente.

Para $\gamma \gg 0$ e $b \rightarrow 0$ o processo OU fica descorrelacionado e a sequência binária de valores $(-\zeta, \zeta)$ obtida usando o mapeamento definido na Eq. 2.5 se torna também uma sequência descorrelacionada. Portanto, temos explicado o único pico largo no espectro de absorção mostrado nas Figs. 2.1-(a) e 2.1-(b) para $\gamma \gg 0$ e $b \rightarrow 0$. Para $\gamma \rightarrow 0$ e $b \rightarrow 0$ (como vemos nas Figs. 2.2-(a) e 2.2-(b)), a compreensão deve vir através de uma análise similar a estrutura de duplo pico mostrada acima. Como sabemos, para $\gamma \rightarrow 0$ o processo OU indica aspecto correlacionado. Em pesquisas passadas (GILLESPIE, 1996; LAZO *et al.*, 2011), têm-se demonstrado que o processo OU é identificado por um espectro de lei de potência do tipo $S(k) \propto k^{-2}$ para $\gamma \rightarrow 0$. Nós sabemos (dos SANTOS *et al.*, 2007; FEDER, 1988; TSONIS, 1992) que uma sequência estocástica com espectro de lei de potência $S(k) \propto k^{-2}$ têm sua distribuição envolvida nos limites do comportamento persistente e anti-persistente. Formalmente, uma sequência desordenada fica persistente se seu espectro se comporta como $S(k) \propto k^{-\nu}$ com $\nu > 2$. O valor $\nu = 2$ é o ponto de intersecção entre os comportamentos persistente e anti-persistente. Daí, neste limite a sequência desordenada exibe uma suavização inicial e começa seguir um comportamento típico do regime harmônico. Desta maneira, quando $\gamma \rightarrow 0$ e $b \rightarrow 0$ os termos diagonal ϵ_n exibem uma estrutura quase regular de segmentos finitos com valores $-\zeta$ e ζ . Logo, usando os argumentos heurísticos considerados em (DÍAZ *et al.*, 2005), nós podemos desacoplar esse modelo 1- d em uma coleção de duas cadeias entrelaçadas, uma delas com energia *on-site* $-\zeta$ e uma outra com termo diagonal ζ . Uma vez que tenhamos usado $\zeta = 1$ teremos duas sub-bandas, a primeira está dentro do intervalo $[-3, 1]$ e um segundo pico dentro do intervalo $[-1, 3]$. De acordo com (DÍAZ *et al.*, 2005), o espectro de absorção de tal sistema sugere mostrar dois picos, e estes são causados pelas transições do estado ligado para o estado mais baixo de cada sub-banda. Nós devemos salientar que estes valores, isto é, -3 e -1 estão em bom acordo com os cálculos numéricos apresentados nas Figs 2.2-(a) e 2.2-(b) para $b \rightarrow 0$. Contudo, o tripleto observado no espectro de absorção para $b \approx 0.5$ (ver Figs 2.2-(a) e 2.2-(b)) pode também ser compreendido através de uma metodologia similar. Para $b \approx 0.5$, a probabilidade de cada valor aparecer na distribuição diagonal é aproximadamente a mesma, e portanto podemos desacoplar o sistema em três cadeias entrelaçadas, cada uma delas com energias *on-site* $-\zeta$, 0 e ζ .

Para os valores $\zeta = 1$ usados em nossos cálculos devemos ter três sub-bandas, correspondendo respectivamente, a $[-3, 1]$, $[-2, 2]$ e $[-1, 3]$. Ainda de acordo com (DÍAZ *et al.*, 2005), o espectro de absorção tende a ter três picos relacionados ao estado inferior de cada sub-banda, ou seja, -3 , -2 , -1 . Essa previsão está novamente em bom acordo com nossos resultados numéricos (ver Figs. 2.2-(a) e 2.2-(b)). Ao fim desta etapa, devemos salientar a importância de se estudar a dependência das propriedades óticas com o parâmetro ζ . Para tanto, resgatamos os argumentos heurísticos para $b \rightarrow 0$ e certos ζ , a fim de entender que as posições dos picos deveriam ser respectivamente, $-2J - \zeta$ e $-2J + \zeta$. Seguimos nossa análise numérica, investigando nossos argumentos por meio da

solução da Eq. 2.6 para $N = 10000$ sítios, 100 amostras e $\zeta = 2$ e 3. Estes resultados estão descritos especificamente na Fig. 2.3. Onde observamos que nossa técnica heurística tem boa concordância com nossos resultados numéricos. Percebemos que à medida que o valor de ζ cresce, a distância entre cada pico aumenta de acordo com nossa previsão heurística.

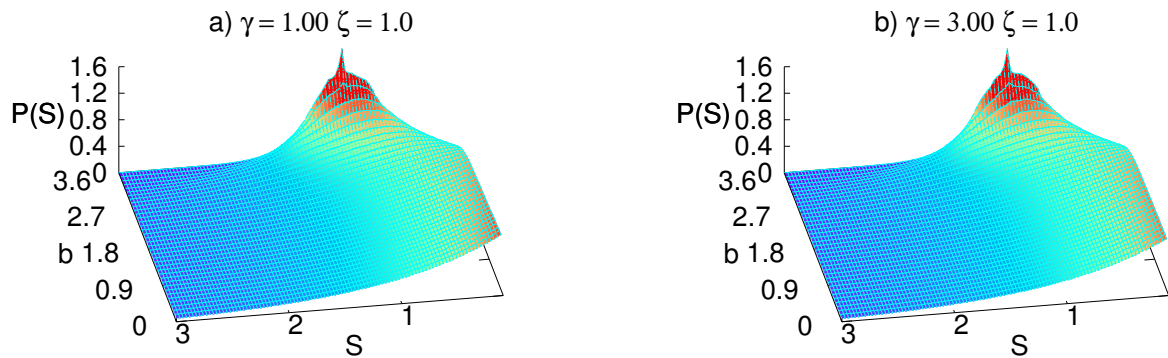
FIGURA 2.3 – Investigações do espectro de absorção para $N = 10000$ sítios, 100 amostras, $\zeta = 2$ e $\zeta = 3$. Os resultados expostos aqui confirmam que a estrutura de picos da absorção ótica é fortemente dependente das possíveis transições do estado ligado para o estado inferior de cada sub-banda. E para $b \rightarrow 0$ as posições dos dois picos está em bom acordo com as extremidades de cada sub-banda, isto é, $[-2J - \zeta]$ e $[-2J + \zeta]$.



Fonte: Autor, 2016.

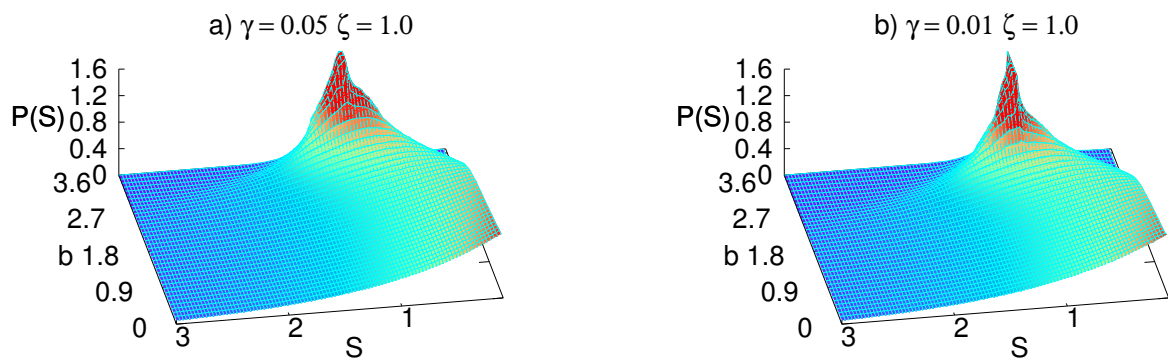
Na segunda etapa de nossa análise, vemos nas Figs. 2.4 e 2.5 os resultados para a estatística do espaçamento entre níveis próximo do centro da banda. Estes cálculos foram feitos utilizando o parâmetro $\zeta = 1$, a correlação $\gamma = 1, 3$ nas Figs. 2.4-(a) e 2.4-(b) e $\gamma = 0.05, 0.01$ nas Figs. 2.5-(a) e 2.5-(b). Vale lembrar que temos usado em nossos cálculos uma região de energia em torno do centro da banda $[-0.5, 0.5]$ e também um procedimento de desdobramento espectral para fazer os espaçamentos entre níveis médios igual a unidade (DIAS *et al.*, 2010; EVANGELOU *et al.*, 1996; LIMA *et al.*, 2004; MEHTA, 2004). A partir desta preparação inicial, observamos que todos os valores de γ estudados neste trabalho, revelam uma estatística de espaçamentos entre níveis similar aquela encontrada em cadeias sem desordem, nos cálculos realizados para $b \gg 0$ (EVANGELOU *et al.*, 1996), isto é, um único pico em torno do espaçamento entre níveis médio unitário ($S = 1$). Salientamos que em (SALES *et al.*, 2012), foi destacado a existência de uma transição desordem-ordem em sequências OU para $b > 4$. Logo, nossos cálculos sobre a estatística dos espaçamentos entre níveis corrobora com a existência dessa transição desordem-ordem para b grande (SALES *et al.*, 2012). Por outro lado, no limite de $b \rightarrow 0$, todos os cálculos de $P(S)$ indicam uma distribuição de Poisson padrão $P(S) = e^{-S}$ mesmo para correlações fortes $\gamma \rightarrow 0$ (como é possível ver nas Figs. 2.4 e 2.5). Portanto, a distribuição de Poisson obtida em nossos cálculos para $b \rightarrow 0$ garante a ausência de autoestados eletrônicos

FIGURA 2.4 – Cálculo numérico da estatística do espaçamento entre níveis próxima do centro da banda para $\zeta = 1$ e $\gamma = 1, 3$. Nossos resultados numéricos para $b \gg 0$ revelam um único pico em torno do espaçamento entre níveis médio unitário $S = 1$. Essa estatística de espaçamento entre níveis é semelhante a encontrada em cadeias sem desordem. Para o limite de $b \rightarrow 0$, todos os cálculos da $P(S)$ indicam uma distribuição de Poisson padrão $P(S) = e^{-S}$, corroborando assim com a natureza localizada dos autoestados.



Fonte: Autor, 2016.

FIGURA 2.5 – Estatística do espaçamento entre níveis próxima do centro da banda para $\zeta = 1$ e $\gamma = 0.05, 0.01$. Para b grande encontramos um pico em torno de $S = 1$, correspondendo a uma assinatura clara de uma cadeia pura. Para $b \rightarrow 0$, mesmo no limite de correlações fortes, nossos resultados revelam um comportamento do tipo Lei de Poisson, estando de acordo com a natureza localizada de todos autoestados.



Fonte: Autor, 2016.

estendidos em ligas ternárias com distribuição de desordem correlacionada OU. Nós reafirmamos que os resultados apresentados aqui vão de encontro a trabalhos passados que destacam a existência de uma transição de fase de Anderson em modelos eletrônicos 1- d com desordem correlacionada (de MOURA *et al.*, 2002).

2.5 Conclusão

Neste trabalho, nós investigamos uma cadeia eletrônica ternária 1- d com distribuição *on-site* construída a partir de um processo OU. A distribuição de desordem diagonal ternária foi gerada por meio de um mapeamento do processo OU na presença de correlação, em uma sequência de três valores distintos. A probabilidade de cada valor surgir é controlada por um parâmetro fixo b . Desta forma, temos gerado um potencial diagonal ternário com correlações de longo alcance. Em nossa técnica numérica, estudamos a diagonalização exata, e assim, pudemos calcular o espectro de absorção ótica e a distribuição de espaçamentos entre níveis para este modelo ternário. Dentro do contexto envolvendo o espectro de absorção, nossos resultados indicam um novo cenário com respeito aos picos dentro da banda de energia. Em nossas discussões, pudemos explicar em detalhes a origem destes novos picos, para tanto, consideramos a possibilidade de uma transição do estado ligado para o estado inferior de cada sub-banda permitida. De modo geral, conseguimos demonstrar que é possível controlar a posição de cada pico do espectro de absorção. Ressaltamos que esta habilidade foi adquirida devido a conveniência de poder mudar a intensidade da desordem diagonal. Salientamos que essa estrutura de multi picos do espectro de absorção nunca foi observada antes em modelos desordenados 1- d . Por fim, gostaríamos de destacar que nossos resultados em torno da distribuição de espaçamentos entre níveis revelam uma distribuição de Poisson para pequenos valores de b . É importante garantir que esse resultado está em bom acordo com tratamentos passados em torno da ausência de estados estendidos em modelos ternários com distribuição de desordem correlacionada OU (SALES *et al.*, 2012). Portanto, nossos resultados contrariam trabalhos passados (ESMAILPOUR *et al.*, 2007; LAZO *et al.*, 2010; LAZO *et al.*, 2011) que destacam a existência de uma transição de fase metal-isolante de Anderson em modelos com distribuição de desordem correlacionada ternária. É importante enfatizar que a escolha do processo OU como a fonte de desordem não restringe nossos principais resultados para esta classe de desordem correlacionada de longo alcance. Em um panorama geral, o processo OU consiste em uma fácil maneira para gerar uma distribuição de desordem com correlações de longo alcance. Basicamente, um certo processo aleatório com densidade espectral tipo lei de potência deve ser usada como a fonte da desordem, e deste modo construir a distribuição atômica ternária com correlações de longo alcance. Logo, com base em nossos cálculos, estamos confiantes que nossos resultados sejam válidos para outras distribuições de desordem ternárias com correlações de longo alcance. É importante frisar que é possível (BELLANI *et al.*, 1999; BELLANI *et al.*, 2000), por meio de técnicas de epitaxia em feixes moleculares (técnicas usadas na síntese de camadas finas), a construção de um arranjo desordenado correlacionado de três tipos de barreiras relacionadas às regras de correlações consideradas aqui. De fato, imaginamos que um esquema experimental possa ser muito útil para reproduzir nossos resultados em torno da absorção ótica

na presença de uma distribuição de desordem correlacionada ternária. Contudo, dentro do cenário da absorção ótica, nós devemos deixar claro que temos calculado teoricamente a absorção através dos excítons de Frenkel, enquanto que em super redes semicondutoras devemos encontrar apenas excítons de Wannier-Mott devido ao grande valor da constante dielétrica geralmente considerada. Nós desejamos que o trabalho exposto aqui seja estimulante tanto em investigações teóricas, como em abordagens experimentais ao longo desta linha de pesquisa. Este trabalho foi publicado em **International Journal of Modern Physics C** como vemos no anexo .

3 Dinâmica Elétron-Sóliton em Cadeias com Não-Linearidade Cúbica

3.1 Introdução

A temática de vibrações na rede e a possibilidade de acoplarmos estas com a dinâmica eletrônica (as interações elétron-fônon) mostram importantes regras no transporte eletrônico efetivo (ALDER *et al.*, 1997; ASTAKHOVA *et al.*, 2012; BRIZHIK *et al.*, 2012; BRIZHIK *et al.*, 1995; CANTU ROS *et al.*, 2011; CHEN *et al.*, 1993; CHETVERIKOV *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2013; CONWELL *et al.*, 2000; DAVYDOV, 1979; DAVYDOV, 1977; DAVYDOV, 1981; de MOURA, 2013; de MOURA *et al.*, 2009; de MOURA *et al.*, 2010; de MOURA *et al.*, 2012; de OLIVEIRA NETO *et al.*, 2009; DIAS *et al.*, 2012; EBELING *et al.*, 2013; HENNIG *et al.*, 2007; HENNIG *et al.*, 2006; HENNIG *et al.*, 2008; HIRAI *et al.*, 2013; IVANCHENKO *et al.*, 2009; KIM *et al.*, 2007; KOPIDAKIS *et al.*, 1995; KOPIDAKIS *et al.*, 2008; KOPIDAKIS *et al.*, 1996; LI *et al.*, 2010; MAKAROV *et al.*, 2006; MARCHAND *et al.*, 2010; SCOTT, 1992; TERAMOTO *et al.*, 2009; VELARDE, 2010; VELARDE *et al.*, 2005; VELARDE *et al.*, 2009; VELARDE *et al.*, 2012; VELARDE *et al.*, 2011; VELARDE *et al.*, 2008; VOS *et al.*, 1996; WEI *et al.*, 2005). Em (HIRAI *et al.*, 2013), apresentou-se resultados de que o estado supercondutor do *IrGe* é um efeito do forte acoplamento elétron-fônon. Na abordagem de (KIM *et al.*, 2007), foi também demonstrado que o forte acoplamento elétron-fônon é o motivo da supercondutividade de La_2C_3 . De acordo com Davydov e investigações associadas, sabemos que o aspecto da não-linearidade do acoplamento elétron-rede pode levar ao transporte de cargas (ALDER *et al.*, 1997; ASTAKHOVA *et al.*, 2012; BRIZHIK *et al.*, 2012; BRIZHIK *et al.*, 1995; CANTU ROS *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2013; DAVYDOV, 1979; DAVYDOV, 1977; DAVYDOV, 1981; de MOURA, 2013; EBELING *et al.*, 2013; HENNIG *et al.*, 2007; HENNIG *et al.*, 2006; HENNIG *et al.*, 2008; SCOTT, 1992; VELARDE, 2010; VELARDE *et al.*, 2005; VELARDE *et al.*, 2009; VELARDE *et al.*, 2012; VELARDE *et al.*, 2011; VELARDE *et al.*, 2008). O formalismo proposto por Davydov consiste de uma Hamiltoniana que descreve a dinâmica eletrônica sobre a influência de vibrações na rede. Nos últimos anos

a existência de um par *elétron-sóliton* foi estudada como um possível mecanismo que leva ao transporte de cargas (ALDER *et al.*, 1997; BRIZHIK *et al.*, 1995; CANTU ROS *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2013; EBELING *et al.*, 2013; VELARDE, 2010; VELARDE *et al.*, 2005; VELARDE *et al.*, 2009; VELARDE *et al.*, 2012; VELARDE *et al.*, 2011; VELARDE *et al.*, 2008). Essa “quasi-partícula” *elétron-sóliton* tem sido chamada de *solectron* (ALDER *et al.*, 1997; BRIZHIK *et al.*, 1995; CANTU ROS *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2011; VELARDE, 2010; VELARDE *et al.*, 2005; VELARDE *et al.*, 2009; VELARDE *et al.*, 2012; VELARDE *et al.*, 2011; VELARDE *et al.*, 2008). Nestas abordagens, demonstrouse por exemplo, a possibilidade da condução elétrica supersônica não-Ôhmica mediada pela dinâmica *solectron* (VELARDE, 2010). Em (VELARDE *et al.*, 2012), os autores apresentaram uma evidência numérica definitiva para a possibilidade do rápido transporte elétron-sóliton ao longo dos eixos cristalográficos de redes anarmônicas 2-*d*. Por outro lado, a dinâmica eletrônica em uma cadeia desordenada Fermi-Pasta-Ulam com interação elétron-rede foi considerada em (de MOURA, 2013). De acordo com a seção 1.4.1, a interação elétron-rede foi introduzida considerando as energias de *hopping* como uma função da distância entre os átomos vizinhos. Assim, por meio da solução numérica das equações da dinâmica, mostrou-se evidências que as excitações solitônicas induzidas pela interação cúbica não-linear pode governar a dinâmica eletrônica ao longo de toda a rede. O *solectron* evidenciado por (de MOURA, 2013) foi uma consequência direta da não-linearidade cúbica do modelo α -Fermi-Pasta-Ulam que está descrito com detalhes na seção 1.4.2. É importante ressaltar que em uma boa porção dos trabalhos de Velarde *et al.* (ALDER *et al.*, 1997; BRIZHIK *et al.*, 1995; BRIZHIK *et al.*, 2012; CHETVERIKOV *et al.*, 2011; HENNIG *et al.*, 2008; MAKAROV *et al.*, 2006; HENNIG *et al.*, 2006; CANTU ROS *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2011; VELARDE, 2010; VELARDE *et al.*, 2005; VELARDE *et al.*, 2009; VELARDE *et al.*, 2011; VELARDE *et al.*, 2008), o par elétron-sóliton foi encontrado através do potencial de Morse não-linear. Neste cenário, a possibilidade de obtermos a condução elétrica induzida pela elasticidade não-linear é um tema geral com vários caminhos para campos distintos da física da matéria condensada. Em (CHETVERIKOV *et al.*, 2013), a propagação de elétrons mediada por excitações exclusivas de sólitons foi estudada em várias redes anarmônicas 2-*d*, especialmente, em uma rede quadrada semelhante às redes cuprate (redes à base de compostos não-estequiométricos). Os autores oferecem evidências computacionais da possibilidade de sempre propagar elétron-sólitons perdidos-livres ao longo dos eixos cristalográficos. No entanto, salientamos que existe um questionamento em aberto em torno da existência e estabilidade de sólitons térmicos (e *solectrons*) acima de temperaturas relativamente altas, ou seja, temperaturas locais ou fisiológicas (VELARDE, 2010). Nos últimos anos, o problema da propagação eletrônica em redes térmicas foi investigado por (HENNIG *et al.*, 2006; VELARDE *et al.*, 2008; EBELING *et al.*, 2013). Estes cálculos numéricos mostram que o transporte *solectron*-carga na rede Toda-Morse aparenta ser estável acima de temperaturas locais (em torno de 300K).

A origem das motivações físicas para o desenvolvimento dos temas abordados nas referências citadas acima está na identificação de possíveis mecanismos do transporte de cargas em cadeias de DNA, polipeptídeos, moléculas biológicas, e redes desordenadas (ASTAKHOVA *et al.*, 2012; ASTAKHOVA *et al.*, 2013; CORDES *et al.*, 2009; GENEREUX *et al.*, 2010; GILLESPIE *et al.*, 2008; LIKHACHEV *et al.*, 2013; KAWAI *et al.*, 2009; MALLAJOSYULA *et al.*, 2010). Em (ASTAKHOVA *et al.*, 2012) vários modelos teóricos em torno de mecanismos que suportam o transporte de cargas em modelos de DNA foram discutidos e um estudo detalhado de suas aplicações foi realizado. Em particular, os autores deram ênfase ao transporte de cargas induzido pela mecânica polarônica. O procedimento considerado em (ASTAKHOVA *et al.*, 2012) é semelhante ao que foi usado por Velarde e colaboradores. Neste ponto, a dinâmica eletrônica foi tratada por uma Hamiltoniana Quântica e as vibrações da rede por um formalismo clássico. Contudo, a interação elétron-rede considerada em (ASTAKHOVA *et al.*, 2012; ASTAKHOVA *et al.*, 2013) foi a aproximação SSH padrão (SUSCHRIEFFER-HEEGER, 1979). Envolvendo os trabalhos de Velarde (ALDER *et al.*, 1997; BRIZHIK *et al.*, 1995; BRIZHIK *et al.*, 2012; CHETVERIKOV *et al.*, 2011; HENNIG *et al.*, 2008; MAKAROV *et al.*, 2006; HENNIG *et al.*, 2006; CANTU ROS *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2011; VELARDE, 2010; VELARDE *et al.*, 2005; VELARDE *et al.*, 2009; VELARDE *et al.*, 2011; VELARDE *et al.*, 2008), o termo elétron-fônon foi introduzido como uma exponencial da distância entre os átomos vizinhos mais próximos, que é uma generalização da aproximação SSH linear. Além disso, o termo não-linear considerado em (ASTAKHOVA *et al.*, 2012; ASTAKHOVA *et al.*, 2013) foi o termo cúbico, sendo um modelo alternativo do potencial Toda-Morse considerado por Velarde. O potencial cúbico usado em (ASTAKHOVA *et al.*, 2012; ASTAKHOVA *et al.*, 2013) representa uma expansão do potencial Morse-Toda quando a variância da posição de equilíbrio não é considerável (ASTAKHOVA *et al.*, 2012).

Na abordagem apresentada aqui nós ressaltamos o progresso ao longo desta linha de pesquisa. Em nosso problema, consideramos a temática de transporte eletrônico mediado pelo acoplamento com ondas solitônicas. O modelo seguido consiste do movimento de um elétron em uma rede anarmônica e devemos “caminhar” na direção de entender a existência de um par elétron-sóliton similar ao obtido em (ALDER *et al.*, 1997; ASTAKHOVA *et al.*, 2013; BRIZHIK *et al.*, 1995; BRIZHIK *et al.*, 2012; CHETVERIKOV *et al.*, 2011; EBELING *et al.*, 2013; HENNIG *et al.*, 2008; MAKAROV *et al.*, 2006; HENNIG *et al.*, 2006; CANTU ROS *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2013; de MOURA, 2013; VELARDE, 2010; VELARDE *et al.*, 2005; VELARDE *et al.*, 2009; VELARDE *et al.*, 2012; VELARDE *et al.*, 2011; VELARDE *et al.*, 2008). No modelo que construímos, consideramos uma rede anarmônica 1- d com uma interação cúbica entre os sítios vizinhos mais próximos. A interação elétron-rede foi colocada através da energia de *hopping* seguindo a aproximação SSH, ou seja, uma função linear da distância entre os átomos vizinhos. Por meio da solução numérica das equações da dinâmica para o elétron e a rede. Daí, podemos então, determinar a dinâmica de um pacote de ondas inicialmente localizado. Os resultados

sugerem que as ondas solitônicas existentes dentro desta rede não-linear podem governar a dinâmica eletrônica ao longo de toda a rede. Como veremos na seção de resultados, foi feito um estudo detalhado sobre a formação de um estado elétron-sóliton que pode se mover ao longo da cadeia. Essa mobilidade do par elétron-sóliton pode ser um tipo de ingrediente para o transporte de cargas em uma cadeia não linear. Além disso, nós devemos investigar em detalhes a intensidade da interação elétron-rede necessária para promover o aparecimento deste par elétron-sóliton. Os cálculos sugerem que, mesmo em acoplamento elétron-rede forte, podemos encontrar uma dinâmica eletrônica não-mediada por ondas solitônicas.

3.2 Modelo com Interações Elétron-Fônon em uma Rede α -FPU

Em nosso formalismo consideramos um elétron se movendo em uma rede não-linear α -Fermi-Pasta-Ulam (FPU) unidimensional com N massas. Vamos levar em conta que cada massa esteja acoplada com sua vizinha mais próxima através de uma força cúbica. A dinâmica eletrônica foi considerada usando uma Hamiltoniana Quântica e a dinâmica das ondas elásticas usando uma Hamiltoniana Clássica. Aproveitando a dupla investigação do comportamento elástico e eletrônico na rede em relação ao tempo, nós consideramos também o acoplamento entre o movimento do elétron e as vibrações atômicas. A interação elétron-rede foi considerada de modo que pudesse seguir a bem conhecida aproximação SSH (SU-SCHRIEFFER-HEEGER, 1979). De acordo com a teoria SSH (ver seção 1.4), a energia cinética depende da distância efetiva entre os átomos vizinhos. A Hamiltoniana completa para um elétron acoplado com as vibrações de uma cadeia não-linear pode ser escrita como $H = H_{ele} + H_{rede}$, de acordo com a Eq. 1.40 temos,

$$\begin{aligned}
 H_{ele} &= \sum_{n=1}^N \epsilon_n g_n g_n^\dagger + \sum_{n=1}^N (V_{n+1,n} (g_{n+1}^\dagger g_n + g_n g_{n+1}^\dagger)) \\
 H_{rede} &= \sum_{n=1}^N \frac{p_n^2}{2m_n} \\
 &+ \frac{1}{4} \sum_{n=1}^N \left[\beta_n (q_{n+1} - q_n)^2 + \beta_{n-1} (q_n - q_{n-1})^2 \right] \\
 &+ \frac{\eta}{6} \sum_{n=1}^N \left[(q_{n+1} - q_n)^3 + (q_n - q_{n-1})^3 \right]. \tag{3.1}
 \end{aligned}$$

Como já foi explicitado anteriormente, g_n^\dagger e g_n representam aqui, respectivamente, os operadores de criação e aniquilação para o elétron no sítio n . O termo ϵ_n representa a energia potencial do elétron, ou energia *on-site*, e aqui nós devemos fazer $\epsilon_n = 0$. $V_{n+1,n}$, representa a energia cinética do elétron, ou como é comumente chamada, termo de

hopping. Na parte clássica, podemos identificar p_n e q_n como o momento e o deslocamento das massas no sítio n , respectivamente. Neste problema em particular, fizemos todas as massas e constantes elásticas serem idênticas, isto é, $\beta_n = m_n = 1$. Por fim, o parâmetro η fica com a responsabilidade de representar o quão intensa a não-linearidade cúbica aparece em nosso modelo. A Hamiltoniana Clássica com não-linearidade cúbica considerada aqui é o modelo α -Fermi-Pasta-Ulam (FPU) (FERMI *et al.*, 1955). Os elementos de *hopping* $V_{n+1,n}$ dependem de como as duas moléculas consecutivas estão distanciadas na cadeia, que de acordo com modelo SSH, fica:

$$V_{n+1,n} = -[V_0 - \alpha(q_{n+1} - q_n)] \quad (3.2)$$

o termo V_0 acima indica a integral de transferência entre os sítios vizinhos mais próximos na ausência de acoplamento elétron-rede. α define o acoplamento elétron-rede efetivo. De modo geral, em trabalhos passados que usam a aproximação SSH (CONWELL *et al.*, 2000; de OLIVEIRA NETO *et al.*, 2009; LI *et al.*, 2010; MARCHAND *et al.*, 2010; SU-SCHRIEFFER-HEEGER, 1979; VOS *et al.*, 1996; TERAMOTO *et al.*, 2009; WEI *et al.*, 2005), o parâmetro α foi escolhido de tal modo que $\alpha > V_0/a$ (em que a é o parâmetro da rede, e aqui usamos $a = 1$). Continuamos seguindo esta tendência, e consideramos $V_0 = 1$ e $\alpha > 1$. A função de onda dependente do tempo $|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|n\rangle$ foi encontrada através da solução numérica da equação de Schrödinger, como previamente discutimos. Daí, considerando o elétron inicialmente localizado no sítio $N/2$, ou seja, $|\Psi(t=0)\rangle = \sum_n c_n(t=0)|n\rangle$, em que $c_n(t=0) = \delta_{n,N/2}$. Usamos as amplitudes de Wannier na equação de Schrödinger dependente do tempo, e assim, obtemos:

$$i \frac{dc_n(t)}{dt} = -[1 - \alpha(q_{n+1} - q_n)]c_{n+1}(t) - [1 - \alpha(q_n - q_{n-1})]c_{n-1}(t). \quad (3.3)$$

Onde foi feito $\hbar = 1$. Já a equação que governa a dinâmica das vibrações na rede é escrita na forma

$$\begin{aligned} \frac{d^2 q_n}{dt^2} &= (q_{n+1} - 2q_n + q_{n-1}) \\ &+ \eta[(q_{n+1} - q_n)^2 - (q_n - q_{n-1})^2] \\ &+ \alpha[(c_{n+1}^* c_n + c_{n+1} c_n^*) - (c_n^* c_{n-1} + c_n c_{n-1}^*)]. \end{aligned} \quad (3.4)$$

O formalismo numérico usado teve como base soluções precisas das equações 3.3 e 3.4. As equações da dinâmica para $c_n(t)$ e $q_n(t)$ foram resolvidas usando um método numérico que consiste de uma combinação de uma expansão de Taylor de alta ordem (de MOURA, 2011) e um procedimento de Euler de segunda ordem (HAIRER *et al.*, 2008). Começamos resolvendo as equações da dinâmica para o elétron (Eq 3.3), que teve como ferramenta numérica um método de alta ordem baseado na expansão de Taylor do opera-

dor evolução temporal $U(\Delta t)$ (de MOURA, 2011),

$$U(\Delta t) = \exp(-iH_{ele}\Delta t) = 1 + \sum_{l=1}^{n_0} \frac{(-iH_{ele}\Delta t)^l}{l!}, \quad (3.5)$$

em que H_{ele} representa a Hamiltoniana de um elétron. Este método começa com a função de onda no tempo Δt ($|\Psi(\Delta t)\rangle = U(\Delta t)|\Psi(\Delta t)\rangle$), e daí, repetimos o processo recursivamente para encontrar a função de onda no tempo t ($|\Psi(t)\rangle$). Em conjunto a este método, as equações clássicas (Eq. 3.4) foram resolvidas através de um método de Euler de segunda ordem definido na referência (HAIRER *et al.*, 2008). Este método consiste em usar um método de Euler padrão para obter uma solução inicial para a posição no instante $t + \Delta t$, a qual rotulamos por $q_n(t + \Delta t)^*$. Analiticamente, esta previsão inicial é dada por

$$q_n(t + \Delta t)^* \approx q_n(t) + \Delta t \left. \frac{dq_n(t)}{dt} \right|_t. \quad (3.6)$$

Em seguida, aplicamos uma fórmula que tem o papel de corrigir 3.6. E daí, então podemos obter uma aproximação aperfeiçoada para $q_n(t + \Delta t)$

$$q_n(t + \Delta t) \approx q_n(t) + \frac{\Delta t}{2} \left[\left. \frac{dq_n(t)}{dt} \right|_t + \left[\left. \frac{dq_n(t)^*}{dt} \right|_{t+\Delta t} \right] \right]. \quad (3.7)$$

A partir desta metodologia numérica e analítica, obtemos nossos resultados através de um passo temporal $\Delta t = 10^{-3}$, e a soma da Eq. 3.5 truncada em $n_0 = 10$. Com este procedimento, conseguimos estabelecer uma precisão da função de onda em torno de $|1 - \sum_n |c_n(t)|^2| < 10^{-8}$ em todo o intervalo de tempo estudado. Como argumento de confiabilidade ao nosso procedimento numérico composto, comparamos nossos resultados com cálculos similares executados através do Runge-Kutta de quarta ordem padrão (RK4) (HAIRER *et al.*, 2008). Esta análise nos possibilitou ter a certeza de que nosso formalismo numérico está em excelente acordo com o (RK4), sendo seu uso para este problema muito mais vantajoso que o método (RK4), em termos de tempo computacional.

Com a finalidade de caracterizar o comportamento da dinâmica do pacote de ondas, calculamos uma quantidade típica desta área, que pode descrever o transporte eletrônico neste modelo não-linear. Esta quantidade é comumente chamada de função de participação, e é definida por (de MOURA, 2007; SALES *et al.*, 2012) como

$$\xi(t) = \frac{1}{\sum_n |c_n(t)|^4}. \quad (3.8)$$

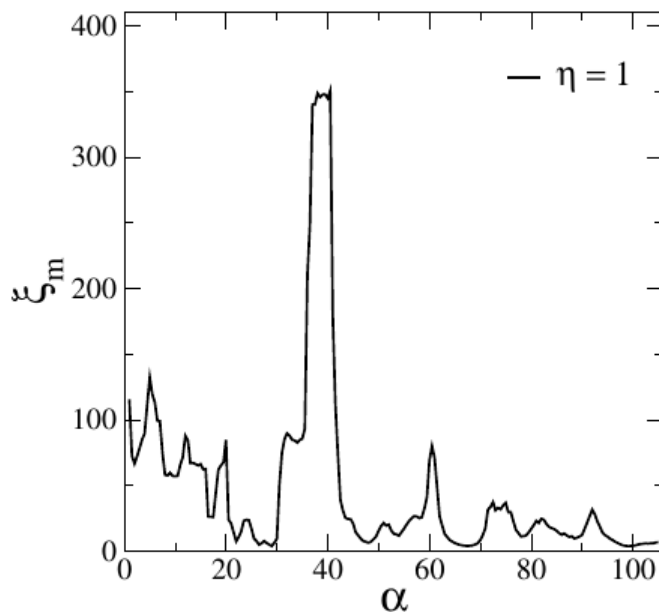
De acordo com Moura e colaboradores, a função de participação fornece uma estimativa do número de estados bases em que o pacote de ondas se propaga em um tempo t . De um modo mais detalhado, o número de participação assintótico se torna independente em termos de tamanho para pacote de ondas localizado. Se a função de participação tiver

um comportamento tipo $\xi(t \rightarrow \infty) \propto N$, isso indica um regime onde o pacote de ondas está uniformemente distribuído sobre a rede (de MOURA, 2007; SALES *et al.*, 2012).

3.3 Resultados e Discussões

Detalhamos na seção 1.4 as origens e as formas de alguns tipos de redes com potenciais não-lineares. No projeto de estudo abordado aqui, escolhemos investigar a dinâmica eletrônica e das vibrações elásticas em uma rede não-linear cúbica na presença de interações elétron-fônon variando linearmente com a distância efetiva entre os átomos vizinhos. Esta abordagem foi motivada pela grande quantidade de estudos feitos em redes não-lineares com potencial de Morse-Toda (CANTU ROS *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2009; CHETVERIKOV *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2012; CHETVERIKOV *et al.*, 2013; EBELING *et al.*, 2013; HENNIG *et al.*, 2007; HENNIG *et al.*, 2006; HENNIG *et al.*, 2008; VELARDE, 2010; VELARDE *et al.*, 2005; VELARDE *et al.*, 2009; VELARDE *et al.*, 2012; VELARDE *et al.*, 2011; VELARDE *et al.*, 2008), e redes não-lineares FPU (de MOURA, 2013). O principal foco nestes trabalhos é averiguar a possibilidade de ondas solitônicas intrínsecas da rede auxiliarem no transporte de cargas. Aqui, nós investigamos a evolução temporal de um pacote de ondas inicialmente localizado no centro de uma cadeia auto-expandida. Utilizamos a cadeia auto-expandida com a intensão de evitar os efeitos de borda, isto é, antecipar o encontro do pacote de ondas com as bordas na rede. De um modo mais prático, quando a probabilidade de encontrar o elétron nas extremidades da cadeia exceder 10^{-30} , doze novos sítios são adicionados em cada extremidade. Em nosso procedimento numérico, fazemos o pacote inicial ser definido por $c_n(t=0) = \delta_{n,n_0}$, onde n_0 representa o centro da rede auto-expandida. Como foi apresentado em nosso modelo, utilizamos um método de alta ordem baseado na expansão de Taylor do operador evolução temporal para resolver o grupo de equações acopladas de Schrödinger dependentes do tempo (Eq. 3.3), e o método de Euler de segunda ordem para resolver as equações clássicas da rede (Eq. 3.4). As equações da rede foram resolvidas considerando um impulso de energia inicial completamente localizado no centro (n_0) da cadeia auto-expandida, isto é, $q_n(t=0) = 0$ e $\dot{q}_n(t=0) = \delta_{n,n_0}$. A convergência numérica foi garantida checando a conservação da norma do pacote de ondas em cada passo do tempo. A partir dessa checagem, foi possível encontrar uma precisão $|1 - \sum_n |c_n(t)|^2| < 10^{-8}$ em toda a escala de tempo estudada, bem como foi informado em nosso modelo. Na Figura 3.1 mostramos a função de participação para tempo longo ($\xi_m = \lim_{t \rightarrow t_{max}} \xi(t)$) versus a intensidade de acoplamento elétron-rede α . Nossa análise foi baseada em 2×10^4 unidades de tempo, que corresponde ao tempo máximo t_{max} . Os parâmetros η e β , correspondentes ao aspecto cúbico e harmônico, respectivamente, da força de interação elástica entre as partículas, foram considerados iguais a unidade, isto é, $\eta = \beta = 1$. O resultado exposto na Fig. 3.1 mostra algumas regiões em que o número de participação é grande, e em contrapartida, outras regiões onde o número de participação

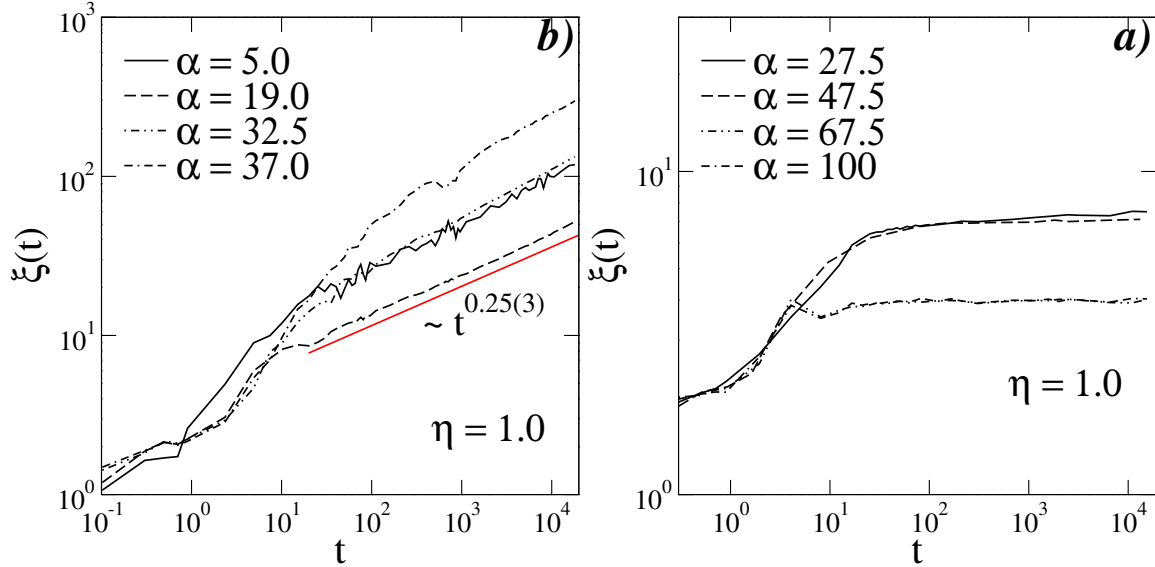
FIGURA 3.1 – Função de participação para tempo longo ($\xi_m = \lim_{t \rightarrow t_{max}} \xi(t)$) versus a intensidade de acoplamento elétron-rede α . Consideramos para o tempo máximo (t_{max}) algo em torno de 2×10^4 unidades, e as intensidades das forças cúbica e harmônica foram feitas iguais a unidade ($\eta = \beta = 1$).



Fonte: Autor, 2016.

ξ_m é menor que 10 sítios (que chamamos de vales). Podemos previamente afirmar que a depender do valor de α escolhido, o pacote de ondas pode ficar extremamente localizado ou exibir algum tipo de propagação ao longo da rede. Diante das evidências iniciais com respeito à Fig. 3.1, percebemos que é de suma importância entender a dinâmica do pacote de ondas ao longo da cadeia para os “vales” e “picos” mostrados acima. Para tanto, nós estudamos o número de participação dependente do tempo $\xi(t)$ versus o tempo t para vários valores de acoplamento elétron-rede α (ver Figs. 3.2-(a) e b)). Através de uma análise minuciosa da Fig. 3.1 conseguimos estabelecer valores de α correspondentes a função de participação grande ($\alpha = 5, 19, 32.5, 37$), bem como, os casos onde o pacote de ondas fica localizado ($\alpha = 27.5, 47.5, 67.5, 100$). A princípio, na Fig. 3.2-a), observamos que o número de participação para $\alpha = 5, 19, 32.5, 37$ cresce com o tempo t em uma escala aproximada de $\xi \propto t^{0.25(3)}$. Comportamentos similares ao observado na Fig. 3.2-a) foram mostrados por (IVANCHENKO *et al.*, 2009; de MOURA *et al.*, 2012; KOPIDAKIS *et al.*, 2008). Nestes trabalhos, os autores investigaram a dinâmica eletrônica para uma equação de Schrödinger não-linear, observando uma propagação sub-difusiva para a função de ondas. É importante deixar claro que a não-linearidade efetiva usada em (IVANCHENKO *et al.*, 2009; de MOURA *et al.*, 2012; KOPIDAKIS *et al.*, 2008) está relacionada à interação com os fônons da rede. Portanto, o comportamento adquirido na Fig. 3.2-a) se encaixa no perfim sub-difusivo, estando assim, em perfeito acordo com a Fig. 3.1 para alguns valores de α . Em um viés “oposto”, os resultados mostrados na Fig. 3.2-b) para tempo pequeno indi-

FIGURA 3.2 – Em *a)* e *b)*, mostramos o número de participação dependente do tempo $\xi(t)$ versus o tempo t para alguns valores de acoplamento elétron-rede α . No painel *a)*, estudamos o caso do número de participação grande ($\alpha = 5, 19, 32.5, 37$), e no painel *b)* investigamos o caso em que o pacote de ondas se mostra completamente localizado ($\alpha = 27.5, 47.5, 67.5, 100$). Os resultados expostos aqui fornecem um ensaio para os nossos principais consensos sobre a dinâmica do pacote de ondas.

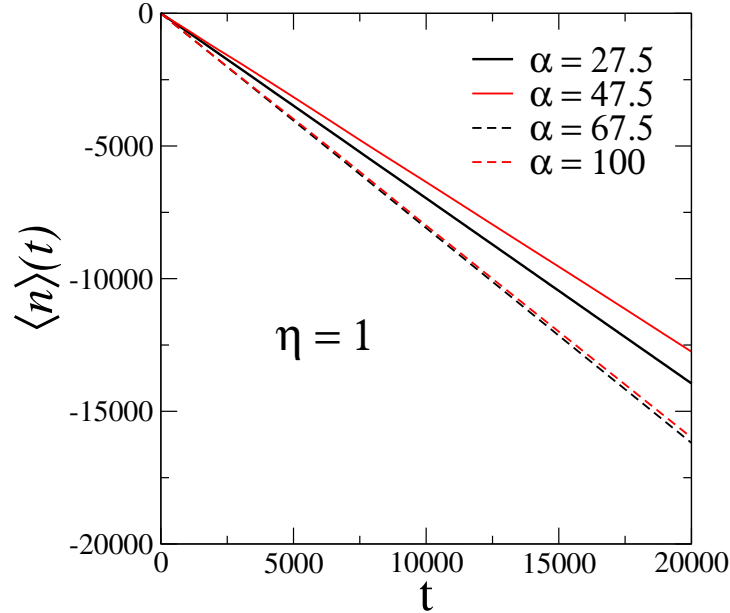


Fonte: Autor, 2016.

cam que a função de participação cresce em certos valores de acoplamento elétron-rede ($\alpha = 27.5, 47.5, 67.5, 100$). À medida que o tempo aumenta, percebemos uma saturação em um valor menor que 10, indicando que o pacote fica restrito a poucos sítios da rede. A saturação de $\xi(t)$ no limite de tempo longo corrobora com os cálculos do número de participação vistos nos vales da Fig. 3.1. É comum querermos um resultado que reforce nossas hipóteses. Sabendo disto, fizemos na Fig. 3.3, uma medida da posição média do pacote de ondas (centroide) para $\alpha = 27.5, 47.5, 67.5, 100$. Essa quantidade é definida por $\langle n \rangle(t) = \sum_n n |c_n(t)|^2$ (de MOURA, 2007; SALES *et al.*, 2012). Nossa principal intenção com a Fig. 3.3 é visualizar a mobilidade eletrônica para os casos de acoplamento não-linear α correspondentes aos vales da Fig. 3.1. É importante salientar que estes valores de α em questão caracterizam um comportamento localizado em tempos longos, em outras palavras, as função de onda é finita (Fig. 3.2-b)). Mas a questão é: O que ocorre com o centroide ao longo do tempo? Como vemos na Fig. 3.3, o pacote de ondas eletrônico é aprisionado pelas ondas solitônicas, e assim ganha mobilidade ao longo da rede, surgindo portanto a possibilidade que haja transporte de cargas dentro de nossa cadeia não-linear.

Portanto, como podemos observar na Fig. 3.3, a função de onda do elétron está localizada em uma pequena fração da rede, ao passo que se move ao longo da rede com o passar do tempo. Vamos agora, investigar com mais detalhes o aspecto de mobilidade observado na Fig. 3.3. Para tanto, calculamos a densidade de probabilidade da função de onda dependente do tempo $|c_n(t)|^2$. Esta análise, mostra a $|c_n(t)|^2$ versus t e n para

FIGURA 3.3 – Neste painel, observamos o cálculo da posição média do pacote de ondas $\langle n(t) \rangle$ para os casos onde temos o regime totalmente localizado, isto é, $\alpha = 27.5, 47.5, 67.5, 100$. A posição $\langle n(t) \rangle = 0$ representa o centro da cadeia, ou seja, a posição inicial do elétron na rede.

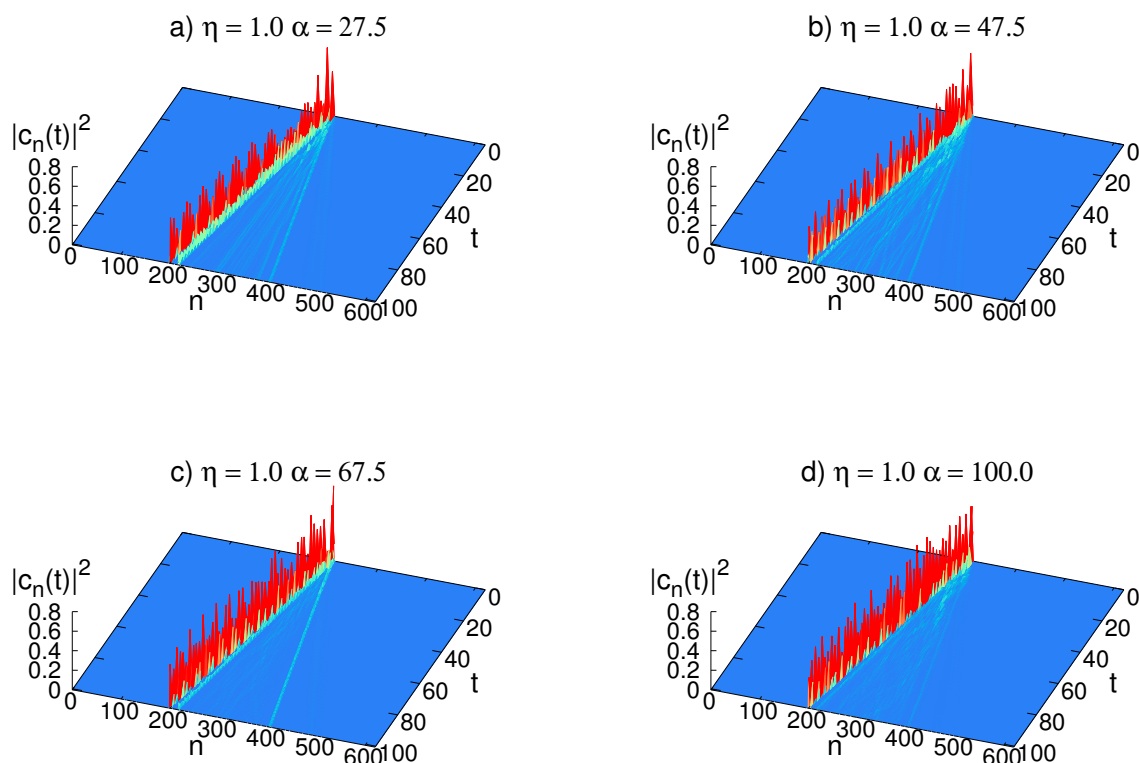


Fonte: Autor, 2016.

$\eta = \beta = 1$, e $\alpha = 27.5, 47.5, 67.5, 100$ como vemos nas Figs. 3.4. Os valores de α foram cuidadosamente escolhidos, de modo que garantissem o comportamento totalmente localizado da função de onda. Esses cálculos foram feitos em uma cadeia finita de 600 sítios. Informamos que estes resultados estão em perfeito acordo com as Figs. 3.1, 3.2-b) e 3.3. De acordo com as Figs. 3.4, o pacote de ondas permanece aprisionada em uma fração finita da rede, mesmo após os instantes iniciais. Daí, podemos dizer que o pacote de ondas está se movendo ao longo da cadeia. Essa mobilidade do elétron obtida em 3.4 corrobora exatamente com os resultados obtidos para o centroide na Fig. 3.3. Devemos lembrar que estamos estudando uma cadeia anarmônica com não-linearidade cúbica. Portanto, a interação não-linear entre os átomos vizinhos mais próximos promove o surgimento de um modo solitônico. (WAGNER *et al.*, 1992; ZAVT *et al.*, 1993; GARNIER *et al.*, 2003; FERMI *et al.*, 1955; dos SANTOS *et al.*, 2012). A dinâmica deste modo solitônico está diretamente relacionada ao tipo de não-linearidade usada e o tipo de condição inicial escolhida. No caso do modelo estudado aqui (modelo com forças não-lineares cúbicas) por exemplo, a direção do movimento pode ser invertida através de uma simples mudança no sinal da velocidade inicialmente excitada. Nossa análise segue investigando a evolução espacial e temporal da deformação da rede, definida aqui por $A_n(t) = \exp[q_n - q_{n-1}]$ (ver Fig. 3.5-a)), e da energia $h_n(t)$ das massas no sítio n (ver Fig. 3.5-b)).

Nossas medidas em torno das ondas solitônicas foram realizadas considerando a variação com o tempo t e com a rede para a cadeia anarmônica cúbica, onde usamos $\eta = 1$

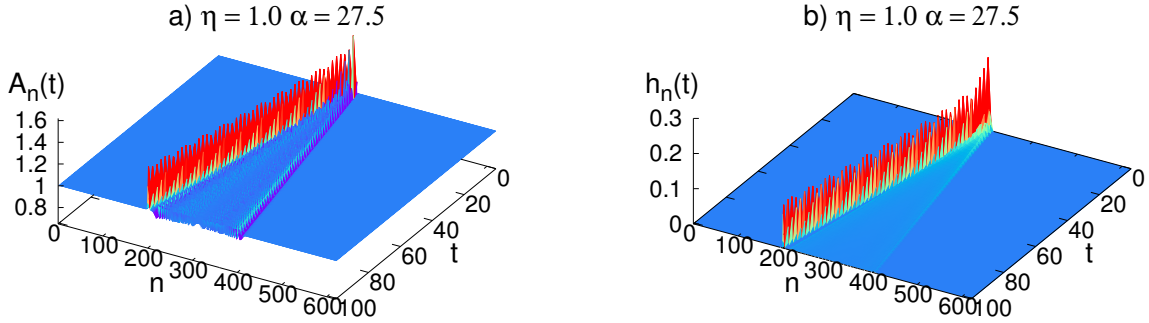
FIGURA 3.4 – Densidade de probabilidade da função de onda $|c_n(t)|^2$ versus o tempo t e a cadeia n para $\eta = \beta = 1$ e $\alpha = 27.5, 47.5, 67.5, 100$. Como vemos, a maior parte do pacote de ondas inicial é aprisionado pela onda solitônica, de tal forma, que o par elétron-sóliton formado tende a exibir mobilidade ao longo da rede.



Fonte: Autor, 2016.

e o acoplamento elétron-fônon $\alpha = 27.5$. Os resultados dão indícios de que a excitação inicial se propaga ao longo da cadeia clássica em um estado solitônico. Isso mostra que a deformação da rede $A_n(t)$ se move em uma forma invariante com velocidade constante através da cadeia. Além disso, nós observamos que a intensidade de energia deste modo solitônico permanece constante e se move ao longo da rede. O perfil do pulso de energia nas Figs. 3.5-*a* e 3.5-*b* é uma ótima assinatura da presença de um modo solitônico dentro da cadeia harmônica não-linear. Logo, os resultados apresentados na Fig. 3.5 estão em bom acordo com a dinâmica da função de onda encontrada nas Figs 3.4-(*a-d*). Esta observação dá sustentação à hipótese da formação do par elétron-sóliton. Portanto, nossos cálculos sugerem que a interação elétron-rede levada em consideração promove o aparecimento de um par elétron-sóliton móvel. A excitação elétron-sóliton encontrada em nossa abordagem é semelhante a obtida pelos pesquisadores (ALDER *et al.*, 1997; BRIZHIK *et al.*, 1995; CANTUROS *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2013; EBELING *et al.*, 2013; de MOURA, 2013; VELARDE, 2010; VELARDE *et al.*, 2005; VELARDE *et al.*, 2009; VELARDE *et al.*, 2011; VELARDE *et al.*, 2012; VELARDE *et al.*, 2008). Nós observamos que

FIGURA 3.5 – Cálculo da deformação da rede $A_n = \exp[(Q_n - Q_{n-1})]$ e a energia específica dos sítios h_n versus t e n de uma rede anarmônica com não-linearidade $\eta = 1$ e acoplamento elétron-rede $\alpha = 27.5$. Os resultados apresentados abaixo indicam que a excitação inicial se propaga ao longo da cadeia em um estado solitônico.

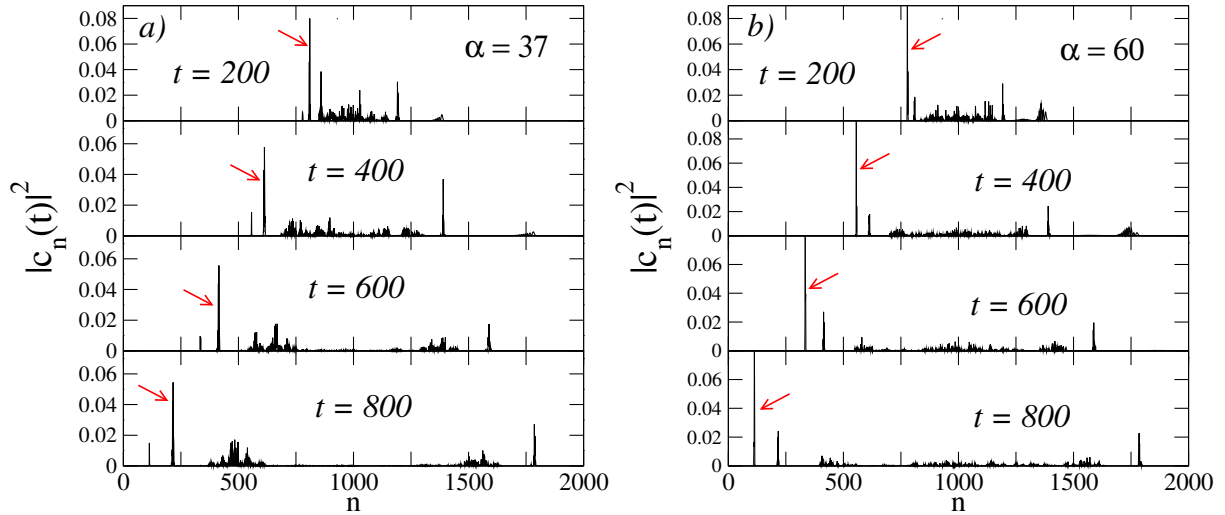


Fonte: Autor, 2016.

o modo solitônico pode aprisionar a maior parte do pacote de ondas eletrônico inicial. A dinâmica deste par elétron-sóliton aparenta ser dominada pela mobilidade do modo solitônico (ALDER *et al.*, 1997; BRIZHIK *et al.*, 1995; CANTU ROS *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2011; VELARDE, 2010; VELARDE *et al.*, 2005; VELARDE *et al.*, 2009; VELARDE *et al.*, 2011; VELARDE *et al.*, 2012; VELARDE *et al.*, 2008).

Como contraste à evidência do par elétron-sóliton constado nas figuras anteriores, investigamos o perfil espacial da função de onda nos casos onde o número de participação aumenta com o tempo. O comportamento espacial da função de onda preenche totalmente o plano (t, n) . Portanto, uma apresentação tridimensional usando $(|c_n(t)|^2, t, n)$ não fornece uma boa perspectiva dos resultados neste caso. Daí, nós montamos na Fig. 3.6, o cálculo da função densidade de probabilidade $|c_n(t)|^2$ versus n para alguns instantes e acoplamentos elétron-fônon α . Os valores de α foram escolhidos de tal forma que o número de participação aumente com o tempo. Visto que estamos interessados em investigar a dinâmica eletrônica nos casos com ausência aparente do par elétron-sóliton. Esta tarefa foi desenvolvida em uma cadeia finita com $N = 2000$ sítios, onde consideramos $\eta = \beta = 1$, $\alpha = 37, 60$ e $t = 200, 400, 600, 800$. Lembramos que para estas circunstâncias, o número de participação cresce com o tempo e, assim, o par elétron-sóliton não deve surgir. Em nossa análise sobre as Figs. 3.6-a) e 3.6-b), percebemos que o pacote de ondas se propaga ao longo de toda a rede, estando portanto, em bom acordo o comportamento da função de participação obtido na Fig. 3.2-a). Contudo, nós observamos que mesmo em circunstâncias iniciais, o pacote de ondas se divide em uma estrutura com dois picos principais, que se movem em direções opostas. O fato mais importante de nossa observação foi em perceber que um destes picos (o pico à esquerda do centro da cadeia) mantém sua intensidade aproximadamente constante ao longo do tempo (ver painéis horizontais na Fig. 3.6).

FIGURA 3.6 – Função densidade de probabilidade $|c_n(t)|^2$ versus n para vários instantes e alguns valores de acoplamento elétron-fônon α . Estes cálculos foram feitos para $\alpha = 37$ e 60. Escolhemos os valores de α onde o número de participação cresce com o tempo t , e como vemos o par elétron-sóliton aparentemente não ocorre.



Fonte: Autor, 2016.

Frequentemente, no contexto de dinâmica eletrônica dependente do tempo, o pacote de ondas inicial deveria se dividir de uma estrutura de único pico para uma estrutura com dois picos estáveis que se movem em direções opostas (KATSANOS *et al.*, 1995). Além disso, com base em (KATSANOS *et al.*, 1995), nós sabemos que estes dois picos deveriam exibir uma pequena largura finita, e que essa largura aumentasse com o tempo. Porém, em nosso estudo, a dinâmica de um elétron mostra um comportamento um pouco diferente da teoria padrão (KATSANOS *et al.*, 1995). A estrutura de picos encontrada na Fig. 3.6 exibe algumas semelhanças em relação ao perfil do pacote de ondas eletrônico observado em (de MOURA *et al.*, 2009). Nossos resultados sugerem que, em despeito do pacote de ondas propagado ao longo da cadeia, nós podemos encontrar certos elementos associados com a formação do par elétron-sóliton. Como por exemplo, o fato de que a mobilidade encontrada nos painéis da Fig. 3.6 sugerem que uma pequena fração finita do pacote de ondas inicial é aprisionada pelos modos solitônicos. Além disso, a maioria do pacote de ondas é desacoplada do modo solitônico e se propaga ao longo da cadeia. Portanto, estes fatos sugerem que mesmo nos casos onde o acoplamento elétron-fônon α é regulado nos picos mostrados na Fig. 3.1, uma pequena fração do pacote de ondas é aprisionada pelas ondas solitônicas. Ademais, a interação elétron-fônon nestes casos não é suficiente para manter uma dominância considerável sobre a dinâmica eletrônica.

3.4 Conclusão

Nosso trabalho investigou a dinâmica de um elétron em uma cadeia anarmônica na presença da interação elétron-rede. Este ingrediente anarmônico da rede foi colocado através do formalismo de Fermi-Pasta-Ulam com o potencial cúbico. O transporte eletrônico foi tratado de acordo com a aproximação *tight-binding* quântica, e as vibrações longitudinais da rede foram descritas usando um formalismo clássico. A interação entre o elétron e a rede foi considerada de tal forma que a integral de transferência entre os átomos vizinhos seja dependente da distância efetiva entre os átomos vizinhos. Para este feito, nós usamos a aproximação SSH, significando que o termo de *hopping* seja definido como uma função linear da distância entre os átomos vizinhos. Através de um poderoso procedimento numérico, nós resolvemos as equações de dinâmica para o elétron e para a rede, e medimos a propagação de um pacote de ondas eletrônico inicialmente localizado. Nossas perspectivas em torno dos resultados foram satisfeitas até com um certo nível de surpresa e satisfação, de modo que nossos resultados sugerem um tipo de controle do modo solitônico sobre a dinâmica eletrônica ao longo da rede não-linear adotada. Nossos resultados revelam um tipo de estado elétron-sóliton se movendo ao longo da cadeia. Esta aparente mobilidade do par elétron-sóliton se mostra com velocidade aparentemente constante, e pode ser um ingrediente crucial no transporte de cargas em cadeias não-lineares. Esses resultados estão em ótimo acordo com recentes trabalhos nesta linha de pesquisa (ALDER *et al.*, 1997; BRIZHIK *et al.*, 2012; BRIZHIK *et al.*, 1995; CANTU ROS *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2011; de MOURA, 2013; HENNIG *et al.*, 2006; HENNIG *et al.*, 2008; MAKAROV *et al.*, 2006; VELARDE, 2010; VELARDE *et al.*, 2005; VELARDE *et al.*, 2009; VELARDE *et al.*, 2011; VELARDE *et al.*, 2008), que pontuam a existência de uma nova excitação resultante do aprisionamento de um elétron pela onda solitônica. Ademais, nós demonstramos a escala de valores de α necessária para promover o surgimento deste par elétron-sóliton. Os consensos de nossas análises sugerem que mesmo em forte acoplamento elétron-rede α , nós podemos determinar a ausência da dinâmica elétron-sóliton. Sendo este, um resultado não-intuitivo. Em geral, nós deveríamos esperar que quando o acoplamento elétron-fônon α aumentasse, seria mais fácil promover o aprisionamento do elétron e, por conseguinte, a formação do par elétron-sóliton. Contudo, dentro do contexto de não-linearidade cúbica estudada aqui, nossos resultados sugerem que isto não é verdade. Nós ressaltamos que estes cálculos foram realizados em uma rede Fermi-Pasta-Ulam com potencial cúbico, e o termo elétron-rede considerado teve como base a aproximação SHH. Nós também destacamos que uma comparação direta com os resultados apresentados nos trabalhos de Velarde é uma tarefa delicada. Visto que, Velarde e colaboradores obtiveram o par elétron-sóliton considerando o **potencial de Morse** e o termo de *hopping* seguiu uma exponencial da distância entre os átomos vizinhos. O potencial cúbico na aproximação SSH levado em conta aqui são propriedades semelhantes à abordagem de Velarde no

limite de vibrações fracas. Portanto, nós suspeitamos que o comportamento apontado em nosso trabalho deveria também aparecer dentro da abordagem usada por eles. Além disso, nós também salientamos que não consideramos a diferença τ entre a escala de tempo da dinâmica eletrônica e a escala de tempo das vibrações da rede. Velarde e colaboradores usaram um artifício para multiplicar o lado direito da equação de Schrödinger quântica por τ , e em seguida incluir a diferença entre ambas as escalas de tempo. Por fim, é importante colocar em ênfase que este procedimento representa um aumento da intensidade do *hopping* eletrônico e promove uma mudança na escala de valores do acoplamento elétron-rede. Todos estes resultados e discussões mostradas aqui foram publicadas na **J. Phys. Cond. Matt.** em 2014 (ver o anexo). Esperamos por fim que esta contribuição científica estimule discussões ao longo desta linha de pesquisa, bem como, temos como perspectivas investigações semelhantes utilizando rede não-lineares FPU para visualização do par *elétron-sóliton*.

4 Transporte Eletrônico Sub-difusivo em uma Cadeia Simples de DNA com Acoplamento Elétron-Fônon

4.1 Introdução

Nos últimos anos têm surgido grandes avanços de métodos em física e bioquímica que oferecem sustentação à hipótese de que bio-moléculas podem ser uma poderosa ferramenta no transporte de cargas. Sobre esta temática, vários estudos com o objetivo de caracterizar o fluxo de corrente através de moléculas de DNA de dupla hélice conectadas com eletrodos metálicos sugeriram uma grande variedade de regimes. Tais regimes podem variar desde a alta mobilidade eletrônica até o comportamento isolante ([CHEN *et al.*, 1993](#); [KASUMOV *et al.*, 2004](#); [KLOTSA *et al.*, 2005](#); [PORATH *et al.*, 2000](#); [WINFREE *et al.*, 1998](#); [XU *et al.*, 2004](#); [YAMADA, 2004](#)). Os diferentes comportamentos observados estão intimamente ligados à características do contato com os eletrodos, o ambiente, a tensão mecânica, a orientação molecular, bem como, sobre a integridade da própria molécula ([ENDRES *et al.*, 2004](#); [SHINWARI *et al.*, 2010](#)). De um modo geral, bio-estruturas mostram topologias complexas com alta flexibilidade e muitos graus de liberdade ([SHINWARI *et al.*, 2010](#)). A capacidade de organismos biológicos construir tais moléculas complexas é um dos principais mecanismos de pesquisas em bio-eletrônicos. Essa importante característica contrabalança com seu baixo tempo de vida devido a degradação, bem como, sua reatividade com a água e outras substâncias (ver trabalho de revisão ([ALBUQUERQUE *et al.*, 2014](#))). Considerando o crescente interesse tecnológico no desenvolvimento de dispositivos bio-eletrônicos baseados em moléculas orgânicas ([SHINWARI *et al.*, 2010](#)), é muito importante compreender profundamente o transporte de cargas através de moléculas orgânicas, em especial DNA, RNA e proteínas. Em torno desta ideia, novas metodologias matemáticas e numéricas são necessárias ao estudo destas moléculas devido seus aspectos

de compressão, quando comparamos com os materiais no estado sólido mais tradicionais.

Na determinação das propriedades de biomoléculas, a estrutura molecular deve ser calculada e uma teoria de transporte adequada deve ser usada para descrever a evolução temporal da distribuição de cargas apropriada. Para a molécula de DNA, a possibilidade de replicar e realizar a sua função biológica implica em rápidos deslocamentos estruturais, medidas por deformações não-lineares dramáticas conduzindo à localização de Anderson, ou seja, à localização exponencial dos estados eletrônicos, e assim, uma significativa redução da condução (ALBUQUERQUE *et al.*, 2014; CHEN *et al.*, 1993; KLOTSA *et al.*, 2005; YAMADA, 2004). Uma descrição teórica desses efeitos é usualmente realizada no âmbito das teorias polarônicas (BASKO *et al.*, 2002; CONWELL, 2005), apesar que o deslocamento tenha uma amplitude suficientemente alta.

A interação de um subsistema eletrônico de DNA (considerado na aproximação de uma banda) com os modos vibracionais da atividade conformacional da cadeia (considerada como uma sequência simbólica de um alfabeto de quatro letras, chamadas de guanina-G, citosina-C, adenina-A e timina-T) é, na maioria dos casos, não-linear (STARIKOV, 2005). O acoplamento elétron-rede é considerado principalmente para descrever a interação elétron-DNA com o alongamento/estreitamento transversal dos modos vibracionais harmônicos da cadeia de DNA (TROISI *et al.*, 2002). Esses deslocamentos podem ocorrer ou em uma maneira sincronizada (modo normal de propagação) (MACIÁ, 2007) ou, incoerentemente (movimento térmico) (GUTIÉRRES *et al.*, 2006; REN *et al.*, 2006; SENTHILKUMAR *et al.*, 2005).

Em sistemas de baixa dimensionalidade, como a maioria das moléculas biológicas, o efeito de não-linearidade parece ser dominante sobre a regra exibida pela desordem. Por exemplo, a propagação de um pacote de ondas inicialmente localizado em uma rede desordenada onde a função de onda é proveniente da equação de Schrödinger não-linear discreta 1- d , teve uma importante abordagem. Nessa abordagem, observou-se que a localização de Anderson é suprimida e a dinâmica sub-difusiva toma espaço sobre uma certa intensidade de não-linearidade crítica (KOPIDAKIS *et al.*, 2008). A dinâmica do pacote de ondas eletrônico em uma geometria de escada torcida imitando um segmento de DNA foi abordada considerando uma interação elétron-fônon dentro da aproximação adiabática (de MOURA *et al.*, 2009). Os resultados sugerem uma propagação tipo difusiva do pacote de ondas eletrônico induzida pela não-linearidade (de MOURA *et al.*, 2011).

Modelos *tight-binding* descrevendo a dinâmica do pacote de ondas eletrônico em segmentos de DNA representaram com êxito a localização de Anderson dos auto-estados do elétron (ALBUQUERQUE *et al.*, 2014; ALBUQUERQUE *et al.*, 2005; ALBUQUERQUE *et al.*, 2005; YAMADA, 2004). Como sabemos, devido a distribuição desordenada em bases distintas, os auto-estados eletrônicos ficam exponencialmente localizados em pequenos segmentos da cadeia de DNA, apesar de que nestes casos, a presença de alguns graus de

correlação na distribuição de desordem oferecerem limitações sobre a natureza desses auto-estados (ALBUQUERQUE *et al.*, 2005). Além disso, modelos simplificados, que consideram uma molécula de DNA “single-strand” (que no português significa algo como molécula de DNA em cadeia simples, que leva a sigla **ss-DNA** do inglês) são capazes de envolver os principais aspectos relacionados aos efeitos de desordem sobre a natureza dos auto-estados eletrônicos (ALBUQUERQUE *et al.*, 2005; ALBUQUERQUE *et al.*, 2005). Por outro lado, os modos vibracionais de uma molécula de DNA são de grande interesse da comunidade científica desta área, de modo que a constante de mola efetiva entre as bases vizinhas medidas pela coluna de fosfato de açúcar é muito maior que as constantes de mola entre as bases pareadas, isto é, o acoplamento inter-cadeia harmônico é muito mais fraco que o acoplamento intra-cadeia (PÁEZ *et al.*, 2010). Daí, a principal influência do acoplamento elétron-rede em segmentos de DNA pode estar sendo descrita por modelos de cadeias simples, evitando assim o uso de modelos mais “densos”. Mesmo que as moléculas de DNA “double-stranded” (molécula de DNA em uma cadeia dupla, **ds-DNA**) tenham maior relevância física e biológica.

A partir da construção de nosso modelo pretendemos investigar a dinâmica de um pacote de ondas eletrônico se propagando em uma molécula **ss-DNA** na presença de vibrações harmônicas, bem como, vibrações anarmônicas associadas com os deslocamentos das bases. A cadeia **ss-DNA** contém quatro valores distintos dos potenciais *on-site* simulando as quatro bases de uma molécula de DNA. Se formos mais além, podemos levar em conta um acoplamento direto entre a dinâmica do elétron e as vibrações locais. A energia de *hopping* eletrônica deve ser representada por meio das distâncias efetivas entre as bases vizinhas mais próximas, aumentando exponencialmente quando a distância entre as bases vizinhas diminui. Resolvendo numericamente as equações que descrevem a dinâmica do elétron e das vibrações da rede, nos tornamos capazes de determinar a propagação de um pacote de ondas eletrônico inicialmente localizado. A solução provinda destas equações deve sugerir que o termo elétron-fônon considerado aqui promova uma propagação sub-difusiva para tempo longo.

O plano piloto deste trabalho consiste nas seguintes etapas: na seção subsequente, iremos descrever a Hamiltoniana *tight-binding* efetiva em conjunto com a Hamiltoniana da rede para assim, descrever o movimento eletrônico. Com base neste modelo, detalharemos por conseguinte, os nossos principais resultados. Por fim, deveremos explanar nossas conclusões.

4.2 Modelo com Interações Elétron-Fônon em uma Cadeia de DNA

Semelhantemente ao Capítulo 3, nosso modelo teórico básico faz uso de uma Hamiltoniana *tight-binding* efetiva descrevendo o movimento de um elétron em um segmento de **ss-DNA** com N bases, acopladas às vibrações da rede harmônica, cuja expressão matemática é dada por (de MOURA, 2013):

$$H = H_e + H_r, \quad (4.1)$$

onde a parte eletrônica (H_e) é dada por

$$H_e = \sum_{n=1}^N \epsilon_n \gamma_n \gamma_n^\dagger + \sum_{n=1}^N \left[t_{n+1,n} (\gamma_{n+1}^\dagger \gamma_n) + t_{n,n-1} (\gamma_n \gamma_{n-1}^\dagger) \right], \quad (4.2)$$

sendo neste caso, γ_n^\dagger e γ_n os operadores de criação e aniquilação, respectivamente. Temos que ϵ_n são as energias de ionização no sítio n , e $t_{n\pm 1,n}$ é o termo de *hopping* eletrônico entre dois nucleotídios adjacentes. A Eq. 4.1 também possui o termo H_r , que representa a Hamiltoniana clássica descrevendo as vibrações harmônicas da rede, como vemos abaixo:

$$H_r = \sum_{n=1}^N \left[\frac{P_n^2}{2M_n} + \frac{1}{4} \left(\beta_n Q_+^2 + \beta_{n-1} Q_-^2 \right) \right]. \quad (4.3)$$

Em que temos representado $Q_+ = Q_{n+1} - Q_n$ e $Q_- = Q_n - Q_{n-1}$. As quantidades P_n e Q_n são as coordenadas de momento clássico e do deslocamento das bases de DNA (G, C, A, e T) no sítio n . Em nossa abordagem, consideraremos todas as constantes elásticas sendo um valor fixo, isto é, $\beta_n = \beta_{n-1} = \beta$. Já as energias de ionização no sítio n (ϵ_n) devem ser dadas pela seguinte receita: inicialmente, nós consideramos uma sequência desordenada descorrelacionada contendo quatro valores distintos das energias de ionização *on-site* imitando a sequência das bases de DNA. Para as energias *on-site*, usamos os valores $\epsilon_G = 7.75$, $\epsilon_C = 8.87$, $\epsilon_A = 8.24$, e $\epsilon_T = 9.14$, medidas em unidades de eV (ALBUQUERQUE *et al.*, 2014). A fração de cada base é a mesma encontrada na sequência do cromossomo 22 humano (*Ch22*), intitulada como NT_{011520} , cujo número fica em torno de 3.4×10^6 nucleotídios. Esta sequência cromossômica se encontra disponível na “page” do Centro Nacional de Biotecnologia da Informação. Contudo, é importante salientar que a sequência exata das bases de NT_{011520} não é relevante para o comportamento dinâmico geral, que nós queremos explorar. As bases usadas para o cálculo compreendem em (G, C, A, e T), que devem prover massas desordenadas. A distribuição de massas M_n é gerada de modo semelhante às energias *on-site* ϵ_n , ou seja, as massas de quatro bases distintas, considerando todas as massas em unidades da massa da citosina (m_C), ou seja,

$M_A = m_A/m_C = 135.13/111.10$, $M_G = m_G/m_C = 151.13/111.10$, $M_T = m_T/m_C = 126.11/111.10$, e $M_C = 1$ (ALBUQUERQUE *et al.*, 2014).

A interação entre o elétron e os modos vibracionais em nosso modelo faz uma relação do termo de *hopping* eletrônico $t_{n+1,n}$ com as coordenadas de deslocamento dos sítios de suas posições de equilíbrio (BRIZHIK *et al.*, 2012; HENNIG *et al.*, 2008; MAKAROV *et al.*, 2006; VELARDE, 2010):

$$t_{n+1,n} = -t_0 \exp[-\alpha(Q_+)]. \quad (4.4)$$

O coeficiente α , novamente, define como o termo de *hopping* eletrônico se relaciona com os deslocamentos relativos das unidades de rede, ou seja, determina a intensidade do acoplamento elétron-fônon. De acordo com (HENNIG *et al.*, 2008; MAKAROV *et al.*, 2006; VELARDE, 2010), a forma experimental do termo de *hopping* $t_{n+1,n}$ sustenta tanto o deslocamento relativo pequeno como grande, de modo que assim, é possível ir além da escala de interações considerada na teoria SSH (Su-Schrieffer-Heeger) (SALES *et al.*, 2014; SU-SCHRIEFFER-HEEGER, 1979). Para pequenos deslocamentos relativos, é possível recobrar a aproximação SSH, como vemos abaixo:

$$t_{n+1,n} \approx -t_0[1 - \alpha(Q_{n+1} - Q_n)]. \quad (4.5)$$

Em nossa abordagem, vamos investigar a evolução temporal de um pacote de ondas eletrônico inicialmente localizado. Para tanto, iremos construir a solução numérica da função de onda dependente do tempo $|\Phi(t)\rangle$ através da equação de Schrödinger com dependências temporais, onde a princípio, devemos localizar o elétron no sítio $N/2$, ou ainda,

$$|\Phi(t=0)\rangle = \sum_n c_n(t=0)|n\rangle, \quad (4.6)$$

onde $c_n(t=0) = \delta_{n,N/2}$. Em continuidade ao nosso procedimento, atuamos a Hamiltoniana completa H (Eq. 4.1) sobre o estado $|\Phi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|n\rangle$ ($H|\Phi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt}|\Phi(t)\rangle$). Em decorrência desta aplicação, e com base nas amplitudes de Wannier encontramos a equação de Schrödinger dependente do tempo com $\hbar = 1$

$$i \frac{dc_n(t)}{dt} = \epsilon_n c_n(t) - e^{-\alpha Q_+} c_{n+1}(t) - -e^{-\alpha Q_-} c_{n-1}(t). \quad (4.7)$$

Onde temos feito $t_0 = 1$. No sistema de unidades levado em conta aqui, o tempo é dado em unidades de $\hbar/eV = 4.13 \times 10^{-15} s$. Além disso, a equação da rede pode ser obtida através da equação de Hamilton para o momento ($\dot{P}_n = M_n \frac{d^2 Q_n(t)}{dt^2} = -\frac{\partial}{\partial Q_n} \langle H \rangle$), neste caso, H é a Hamiltoniana total dada na Eq. 4.1, e $\langle H \rangle$ é o seu valor esperado no estado

$|\Phi(t)\rangle$, ou seja, $\langle \Phi(t) | H | \Phi(t) \rangle$. Portanto, a equação da rede pode ser escrita como

$$\begin{aligned}
 M_n \frac{d^2 Q_n(t)}{dt^2} &= \left(\beta_n Q_+ - \beta_{n-1} Q_- \right) \\
 &+ \alpha \left[e^{-\alpha Q_+} (c_{n+1}^* c_n + c_{n+1} c_n^*) \right. \\
 &\left. - e^{-\alpha Q_-} (c_n^* c_{n-1} + c_n c_{n-1}^*) \right]. \tag{4.8}
 \end{aligned}$$

A constante elástica indicada acima é medida em unidades de $m_C e V^2 / \hbar^2 = 1.06 \times 10^4 N m^{-1}$, enquanto que os deslocamentos da rede são medidos em Å , e α em unidades de Å^{-1} . Nosso formalismo numérico se baseou na solução numérica precisa das equações acima, isto é, as equações 4.7 e 4.8. Este conjunto de equações diferenciais foi resolvido usando um método Runge-Kutta de oitava ordem Dormand-Prince padrão monitorando o truncamento local (HAIRER *et al.*, 2008), com passo temporal $dt \approx 10^{-3}$. O mais interessante em resolver as equações de dinâmica temporal é poder caracterizar o comportamento dinâmico do pacote de ondas, para tanto, nós medimos quantidades típicas que fornecem informações sobre o transporte eletrônico neste modelo, foram elas: a função de participação $\xi(t)$ e o deslocamento quadrático médio da função de ondas $\sigma(t)$.

De acordo com (de MOURA, 2007; SALES *et al.*, 2012), a função de participação é definida pela forma

$$\xi(t) = 1 / \sum_n |c_n(t)|^4, \tag{4.9}$$

que sugere uma estimativa do número de sítios em que o pacote de ondas é propagado no tempo t . Como destacamos no Cap. 3, a função de participação assintótica fica independente do tamanho quando o pacote de ondas é dito localizado. Em um outro viés, $\xi(t \rightarrow \infty) \propto N$ indica o regime onde o pacote de ondas é espalhado sobre a rede (de MOURA, 2013; de MOURA, 2007; SALES *et al.*, 2012).

O deslocamento quadrático médio do pacote de ondas $\sigma(t)$, de acordo com (de MOURA *et al.*, 2004) é dado por

$$\sigma(t) = \sqrt{\sum_n (n - n_0)^2 |c_n(t)|^2}. \tag{4.10}$$

É importante perceber que $\sigma(t)$ varia de 0, para uma função de ondas localizada em um dado sítio, para um termo proporcional ao número de sítios, para uma onda espalhada sobre todo o sistema.

Como complemento as nossas medidas, iremos investigar a função de auto-correlação

$C(t)$ definida em (de MOURA *et al.*, 2004; KAWARABAYASHI *et al.*, 1995) por:

$$C(t) = \frac{1}{t} \int_0^t R(t') dt', \quad (4.11)$$

onde $R(t') = |c_{N/2}(t')|^2$ se refere a probabilidade de retorno. No limite assintótico $t \rightarrow \infty$, a função de auto-correlação temporal decresce com $C(t) \propto 1/t^\theta$, sendo θ , para $d = 1$ (unidimensional), o expoente que governa a escala de tamanho da função de participação independente do tempo para baixas energias, isto é, $\xi(E \approx 0) \propto N^\theta$ (de MOURA *et al.*, 2004; KAWARABAYASHI *et al.*, 1995). Esta relação de escala é um efeito direto do caráter fractal das flutuações das auto-funções (CHALKER, 1990; HUCKESTEIN *et al.*, 1999). No regime de tempo longo, de interesse especial para nossa análise, a probabilidade de retorno satura em um valor finito quando o pacote de ondas fica aprisionado em uma região finita em torno da região onde o elétron é solto. Para os outros casos, ela desaparece à medida que o pacote de ondas se propaga interruptamente ao longo da rede (KRAMER *et al.*, 1993). Quando o sistema apresenta uma fase de estados totalmente estendidos, a função de auto-correlação desaparece linearmente com $1/t$. Um lento decaimento não-linear representa, usualmente, uma indicativa de um regime dinâmico intermediário. Veremos na seção a seguir, estas e muitas outras discussões em torno do regime de propagação do pacote de ondas em nossa rede simples de DNA com interações elétron-rede.

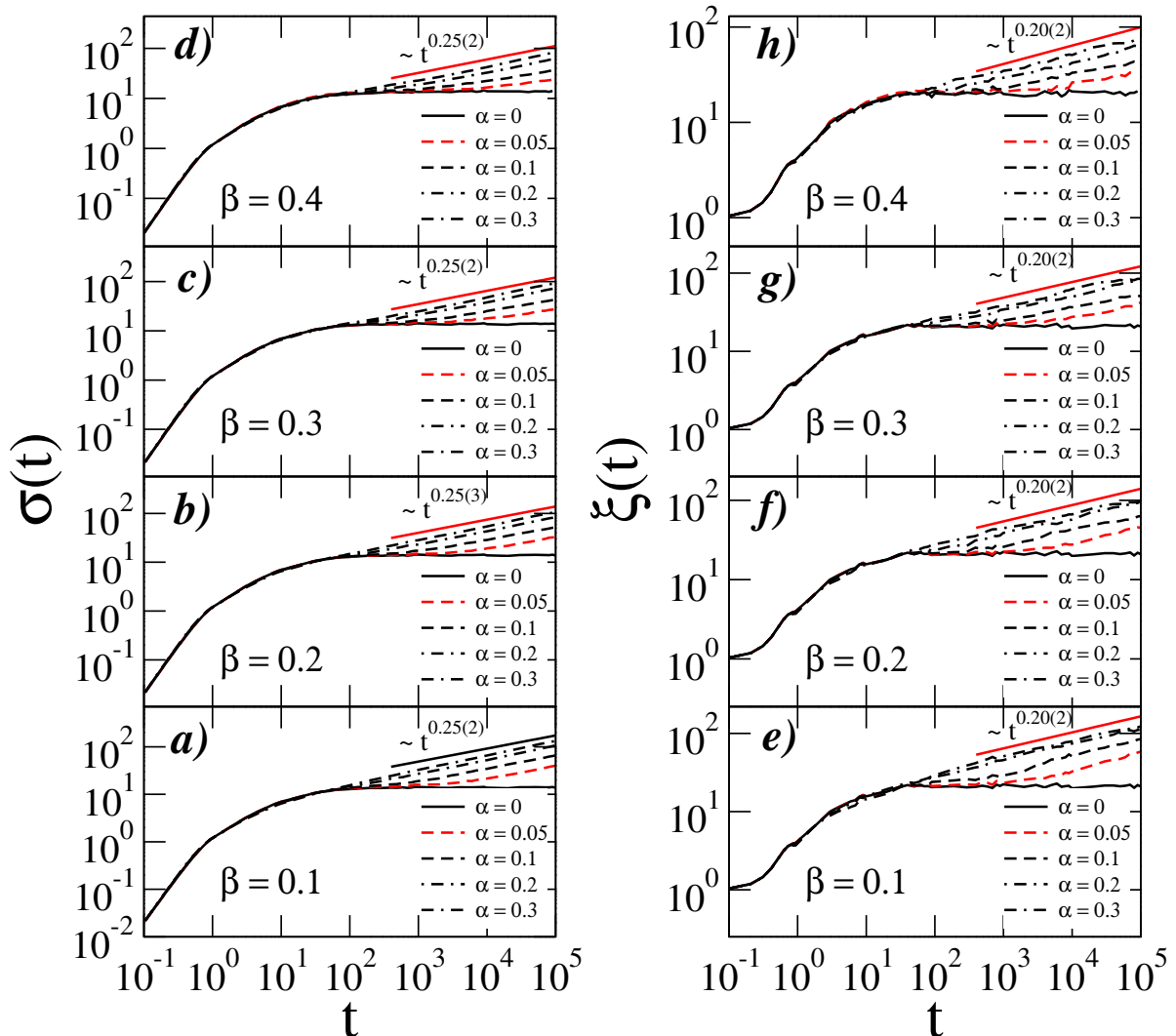
4.3 Resultados e Discussões

Uma vez que definimos nosso modelo, estaremos mostrando a seguir os principais resultados obtidos em nossa abordagem. A fim de evitar os efeitos de borda quando o pacote de ondas se aproxima das bordas de um segmento de DNA finito, nós realizamos nossos cálculos numéricos em uma cadeia auto-expandida (cadeia inicialmente fixa codificada para aumentar suas bordas quando as extremidades laterais do pacote de ondas alcançam os limites da cadeia inicial). De início, nós medimos a evolução temporal de um pacote de ondas inicialmente localizado no centro da cadeia auto-expandida, isto é, $c_n(t=0) = \delta_{n,N/2}$. Daí, através dessa medida, impomos a seguinte condição: quando a probabilidade de encontrar o elétron em uma das extremidades da cadeia superar 10^{-40} , então 15 novos sítios são adicionados às extremidades da cadeia. Portanto, por meio desta técnica, evitamos algum eventual efeito de tamanho finito na dinâmica do pacote de ondas. Esse “truque” computacional tem sido muito útil neste tipo de abordagem, onde se busca investigar a dinâmica do pacote de ondas eletrônico e encontrar resultados coerentes com a propagação assintótica de difusão do pacote de ondas (de MOURA *et al.*, 2012; de MOURA *et al.*, 2011; DUNLAP *et al.*, 1990; SALES *et al.*, 2012; SALES *et al.*, 2014). As equações da rede foram resolvidas considerando uma excitação inicial tipo impulso

($P_n = \delta_{n,N/2}$; $Q_n = 0$) de acordo com (ZAVT *et al.*, 1993). Realizamos 50 configurações de desordem, de modo que nossa precisão ficou em torno de $|1 - \sum_n |c_n(t)|^2| < 10^{-10}$ para todos os tempos medidos.

Começamos explanando nas Figuras 4.1(a)-(h), o deslocamento quadrático médio $\sigma(t)$ e o número de participação $\xi(t)$ para os seguintes valores da intensidade de acoplamento elétron-fônon $\alpha = 0, 0.05, 0.1, 0.2, 0.3$. Além disso, levamos em conta que a constante de mola β varie na escala de 0.1 a 0.4. Na ausência de acoplamento ($\alpha = 0$), identificamos um regime bem conhecido, típico da localização de Anderson, em que o pa-

FIGURA 4.1 – Em (a)-(d), mostramos o cálculo do deslocamento quadrático médio $\sigma(t)$, e em (e)-(h), o cálculo da função de participação $\xi(t)$ (em unidades do espaçamento da rede), ambas variando com o tempo e para vários valores da intensidade d acoplamento elétron-fônon fora da diagonal α , e constantes de mola β (as unidades são das no texto). Nossos resultados numéricos indicam que a não-linearidade fora da diagonal ($\alpha > 0$) induzem a propagação sub-difusiva do pacote de ondas, levando ao comportamento de escala $\sigma(t) \propto t^{0.25(2)}$ e $\xi(t) \propto t^{0.20(3)}$ (os números em parênteses padronizam a barra de erro no processo de ajuste feito).

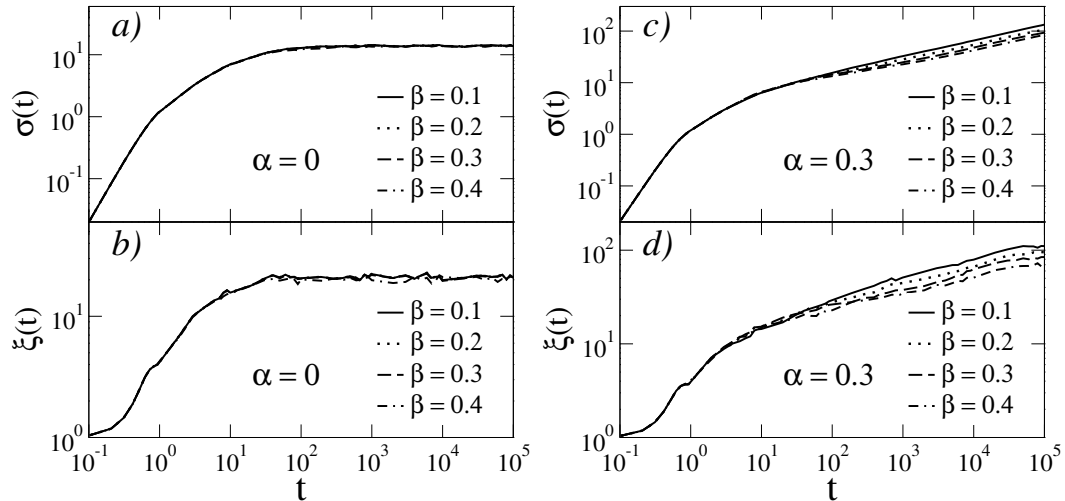


cote de ondas não se espalha (SALES *et al.*, 2012). Esse comportamento foi apresentado em detalhes por (ALBUQUERQUE *et al.*, 2005; ALBUQUERQUE *et al.*, 2005), além de vários tipos de desordem DNA diagonal. Entre outros detalhes, vemos também na Fig. 4.1 o regime sub-difusivo existente para $\alpha > 0$. Analisando estes dados nós encontramos que o deslocamento quadrático médio $\sigma(t)$ se comporta como $t^{0.25(3)}$, enquanto que a função de participação $\xi(t)$ tem uma dependência temporal $t^{0.20(3)}$. Sobre estes comportamentos de escala para $\sigma(t)$ e ξ , é importante destacar a ressalva de que os mesmos estão em bom acordo com os resultados explanados por (de MOURA *et al.*, 2011), onde os autores verificaram um comportamento sub-difusivo em correspondência à equação de Schrödinger não-linear DNA para uma geometria de escada torcida com uma interação elétron-fônon adiabática. Todavia, nestes trabalhos pré-citados, o acoplamento elétron-fônon levado em conta na equação de Schrödinger dependente do tempo, tem como base uma não-linearidade cúbica (na ausência de qualquer equação da rede), de tal modo que as vibrações da rede e seus acoplamentos com a dinâmica eletrônica foram tratados efetivamente usando uma equação de Schrödinger não-linear discreta. Assim, com base nesta configuração, os autores conseguiram também encontrar um regime sub-difusivo em modelos com equação de Schrödinger não-linear discreta com não-linearidade fora da diagonal (de MOURA *et al.*, 2012).

Em nosso modelo consideramos duas fontes distintas de desordem estática, que são elas: uma desordem dentro da distribuição de energias *on-site* das bases de DNA (Eq. 4.7), e também uma desordem dentro da distribuição de massas das bases (Eq. 4.8). Portanto, o Hamiltoniano eletrônico *tight-binding* e a Hamiltoniana clássica, que descreve as vibrações harmônicas da rede contendo desordem estática. Além dessa fonte de desordem estática, as amplitudes de *hopping* eletrônicas também mudam dinamicamente devido ao acoplamento com as vibrações da rede. Esse ingrediente acrescenta uma fonte dinâmica de desordem à propagação eletrônica. Analogamente, a propagação eletrônica acoplada aos deslocamentos da rede resultam em uma desordem dinâmica efetiva influenciando as vibrações da rede. Nossos resultados sugerem que mesmo na presença dessas duas distribuições de desordem estática o termo elétron-fônon pode promover transporte eletrônico. Nós enfatizamos que esse resultado evidencia a consistência dos dois formalismos, conhecidos como a equação de Schrödinger discreta não-linear usados em (de MOURA *et al.*, 2012; de MOURA *et al.*, 2011) e o tratamento clássico-quântico considerado no presente trabalho.

Na Figura 4.2, estudamos o deslocamento quadrático médio e da função de participação variando com o tempo para um sistema desacoplado ($\alpha = 0$), painéis (a) e (b) e um sistema acoplado $\alpha = 0.3$, painéis (c) e (b), e diversos níveis de constantes elásticas ($\beta = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4$). Nossas medidas corroboram com nossas principais hipóteses, onde o aumento nas constantes elásticas β para um sistema acoplado $\alpha = 0.3$, (ver Fig. 4.2(c)-

FIGURA 4.2 – Medidas do deslocamento quadrático médio e da função de participação variando com o tempo para um sistema desacoplado ($\alpha = 0$), painéis (a) e (b) e um sistema acoplado $\alpha = 0.3$, painéis (c) e (b), e diversos níveis de constantes elásticas ($\beta = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4$). Esta medida evidencia um declínio na otimização da propagação do elétron com o aumento de β . Indicando portanto, que as molas mais fortes retardam ligeiramente a dinâmica eletrônica.

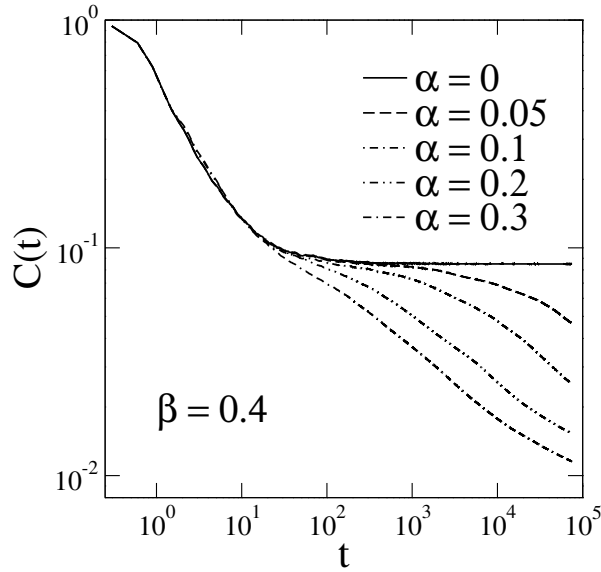


Fonte: Autor, 2016.

(d)) retarda a propagação do elétron ao longo da cadeia. Por outro lado, se a dinâmica eletrônica não estiver acoplada às vibrações da rede ($\alpha = 0$), a mudança de intensidade na constante de mola, aparentemente, não oferece consequência sobre a dinâmica eletrônica (ver Fig. 4.2(a)-(b)).

Em seqüência, investigamos a dinâmica eletrônica dentro do nosso modelo DNA usando a função auto-correlação temporal $C(t)$ (ver Fig. 4.3). Nossos cálculos foram feitos para constante de mola elástica $\beta = 0.4$, com intensidade de acoplamento elétron-rede α variando de 0 até 0.3. Na ausência do acoplamento elétron-fônon $\alpha = 0$, nós observamos que a função auto-correlação satura em tempo longo t . Nesta região, a desordem estática do modelo DNA, devido as duas fontes distintas descritas acima, promove a localização da função de onda eletrônica. Portanto, a probabilidade de retorno em tempo longo t satura em um valor finito, indicando que as auto-correlações ficam constantes no tempo. Para $\alpha > 0$, nós observamos um lento decaimento não-linear da função de auto-correlação temporal $C(t)$. Para $\alpha > 0.1$ e para tempos longos, nós podemos estimar $C(t) \approx t^{-0.40(1)}$.

Com argumentos mais rigorosos, quando o sistema apresenta uma fase de estados verdadeiramente estendidos, a função de auto-correlação cai linearmente com $1/t$. Neste modelo (DNA), os resultados sugerem um decaimento não-linear de $C(t)$ traduzindo que as auto-funções exibem uma natureza intermediária entre estados estendidos e totalmente localizados. Em (de MOURA *et al.*, 2004) foi investigado um modelo eletrônico com desordem correlacionada em que um regime de dinâmica intermediário não balístico foi associado com a presença de auto-funções fracamente localizadas. Nós enfatizamos que

FIGURA 4.3 – Função de auto-correlação temporal $C(t)$ versus t para intensidade de acoplamento elétron-fônon de $\alpha = 0$ até 0.3.


Fonte: Autor, 2016.

em nosso modelo não somos capazes de calcular diretamente essas auto-funções devido à dependência temporal das amplitudes de *hopping*. Como produto destes fatos, uma comparação do expoente da função auto-correlação e da escala de tamanho do número de participação estático não pode ser ilustrada.

Exaltamos a aproximação harmônica clássica feita sobre as vibrações harmônicas da rede inerentes da Eq. 4.3, que foi paralelamente levando em conta em várias outras abordagens (de MOURA *et al.*, 2012; de MOURA *et al.*, 2011; SU-SCHRIEFFER-HEEGER, 1979). Em um sistema que vibra, a aproximação harmônica é levada em conta apenas com pequenas amplitudes. Portanto, alguns efeitos térmicos podem promover fortes vibrações, daí, uma rede anarmônica pode ser uma opção importante. Fizemos então, com base na abordagem do Cap. 3, uma breve análise dos efeitos de forças atômicas anarmônicas em nossos resultados. Para tanto, nós fizemos a Hamiltoniana 4.3 tomar a forma de uma Hamiltoniana Clássica com Potencial Cúbico ($H_{C.P.C}$):

$$H_{C.P.C} = H_r + \frac{\eta}{6} \sum_{n=1}^N \left(Q_+^3 + Q_-^3 \right), \quad (4.12)$$

onde η indica a intensidade da não-linearidade cúbica considerada neste modelo. A equação de Schrödinger quântica (4.7) por sua vez permanece inalterada. O mesmo não se pode afirmar da equação da rede, visto que devido o termo não-linear cúbico provoca a

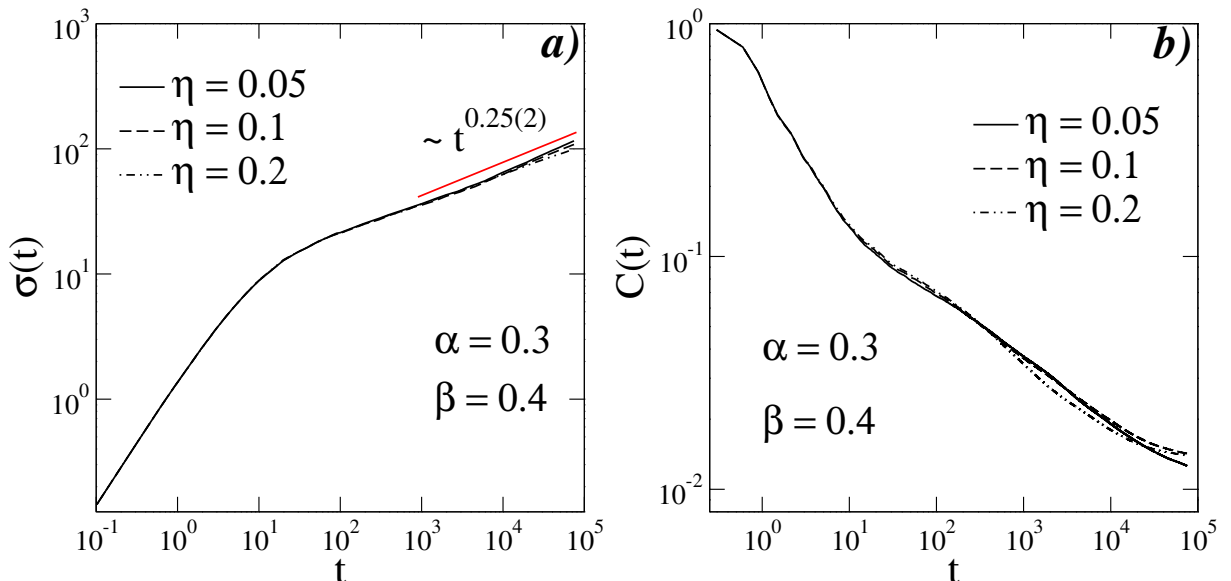
necessidade de incluirmos o termo anarmônico na mesma, isto é,

$$\begin{aligned}
 M_n \frac{d^2 Q_n(t)}{dt^2} &= \left(\beta_n Q_+ - \beta_{n-1} Q_- \right) + \eta \left(Q_+^2 - Q_-^2 \right) \\
 &+ \alpha \left[e^{-\alpha Q_+} (c_{n+1}^* c_n + c_{n+1} c_n^*) \right. \\
 &\left. - e^{-\alpha Q_-} (c_n^* c_{n-1} + c_n c_{n-1}^*) \right].
 \end{aligned} \tag{4.13}$$

A constante η é dada em unidades de $M_C e V^2 / \hbar^2 \text{\AA} = 1.06 \times 10^{-6} \text{Nm}^{-2}$. As Figs. 4.4(a) e (b) fornecem uma soma de nossos cálculos na presença de efeitos anarmônicos. Consideramos a constante de mola $\beta = 0.4$ e o acoplamento elétron-rede $\alpha = 0.3$ (este valor de acoplamento foi o mais alto dentro de uma precisão aceitável dos cálculos numéricos). Observamos que o tamanho do pacote de ondas $\sigma(t)$ diverge de forma sub-difusiva ($\sigma(t) \propto t^{0.25(2)}$) semelhante ao observado na ausência dos aspectos anarmônicos ($\eta = 0$). Além disso, a função de auto-correlação temporal (ver Fig. 4.4(b)) diminui com uma escala similar a encontrada para $\eta = 0$, sugerindo que no regime de fracos efeitos anarmônicos para o acoplamento elétron-fônon, a dinâmica sub-difusiva se faz presente na cadeia de DNA com uma única hélice.

Vamos agora fornecer um suporte analítico as nossas observações, que consiste em

FIGURA 4.4 – (a) Deslocamento quadrático médio $\sigma(t)$ e (b) a função de auto-correlação temporal $C(t)$ versus t para vários valores dos efeitos anarmônicos (de $\eta = 0.05$ até 0.2, com a unidade descrita no texto). A intensidade do acoplamento elétron-fônon fora da diagonal α foi considerada igual a 0.3, o valor mais intenso possível a ser medido em nossos cálculos numéricos. Nós observamos que, no regime de fracos efeitos anarmônicos, o acoplamento elétron-fônon promove uma dinâmica sub-difusiva em uma cadeia de DNA com hélice simples.



realizar uma análise de escala análoga a feita por (de MOURA *et al.*, 2011). Para fazer esta análise, iremos dividir o pacote de ondas eletrônico completo em duas partes:

(Λ) uma pequena fração em torno da posição inicial, ou seja, com a probabilidade de retorno se comportando de acordo com a expressão $c_{n < n_0}(t) \propto t^{-n_0}$, onde n_0 representa apenas alguns sítios;

(Ω) a lei de potência acima da calda de uma distância de corte x_m a partir da posição inicial (após essa distância de corte, um decaimento exponencial toma lugar).

Portanto, x_m para esta situação delimita a frente do pacote de ondas e se comporta com o tempo de acordo com $x_m \propto t^\gamma$, em acordo com (de MOURA *et al.*, 2011):

$$|c(t, n)|^2 \propto G_1 t^{-\nu} \quad \text{para } n < n_0 \quad (4.14)$$

$$|c(t, n)|^2 \propto G_2 t^{-\gamma\phi} n^{-\phi} \quad \text{para } n_0 < n < x_m \quad (4.15)$$

Sobre esta exposição analítica acima, para uma lei de potência tipo calda $x^{-\phi}$ com $\phi > 1$, a Eq. 4.15 não contribui para a normalização da função de onda. Assim, a Eq. 4.14 domina a normalização, significando que nós deveríamos ter $\nu = 0$ para fazer com que o pacote de ondas completo possa ser normalizado. Este caso com $\phi > 1$, foi investigado por (de MOURA *et al.*, 2011) e é completamente distinto do caso apresentado aqui, onde temos $\nu > 0$.

Por outro lado, para $\phi < 1$, a Eq. 4.15 deve contribuir para a normalização e assim nós precisamos tratar a mesma da seguinte forma:

$$\int_0^{n_0} G_1 t^{-\nu} dn = G_1 t^{-\nu} n_0 = cte. \quad (4.16)$$

Para realizar o processo de normalização, n_0 deveria ser proporcional a t^ν . Como uma consequência, o pacote de ondas eletrônico pode ser distribuído de acordo com:

$$|c(t, n)|^2 = \begin{cases} G_1 t^{-\nu} & \text{para } 0 < n < n_0 \propto t^\nu, \\ G_2 t^{-\gamma\phi} n^{-\phi} & \text{para } n_0 < n < x_m. \end{cases} \quad (4.17)$$

Se usarmos a hipótese de escala apresentada na equação anterior, podemos estimar analiticamente o comportamento de dependência temporal do alargamento do pacote de ondas eletrônico e o número de participação. O número participação $\xi(t)$ pode ser escrito, no limite contínuo como:

$$\xi(t)^{-1} = \int_0^{n_0} G_1 t^{-2\nu} dn + \int_{n_0}^{x_m} G_2^2 t^{-2\gamma\phi} n^{-2\phi} dn, \quad (4.18)$$

tornando-se na expressão aproximada:

$$\xi(t)^{-1} \propto I_1 t^{-2\nu} n_0 + I_2 t^{-2\gamma\phi} n^{-2\phi} n_0^{1-2\phi}. \quad (4.19)$$

Se usarmos a Eq 4.16, teremos

$$\xi(t)^{-1} \propto I_1 t^{-\nu} n_0 + I_2 t^{-2\gamma\phi - 2\phi\nu + \nu}. \quad (4.20)$$

Logo, o primeiro termo deve dominar a dinâmica, e comportamento de dependência temporal do número de participação é caracterizado por $\xi(t) \propto t^\nu$.

O alargamento eletrônico $\sigma(t)$ pode ser obtido de uma forma semelhante ao número de participação. Isto é, no limite contínuo $\sigma(t)^2$ é dado por:

$$\sigma(t)^2 = \int_0^{n_0} G_1 t^{-\nu} n^2 dn + \int_{n_0}^{x_m} G_2 t^{-\gamma\phi} n^{2-\phi} dn. \quad (4.21)$$

A segunda integração é dominada pelo limite $n = x_m$, daí, obtem-se:

$$\sigma(t)^2 \propto G_1 t^{-\nu} n_0^3 + H_2 t^{-\gamma\phi} x_m^{3-\phi}. \quad (4.22)$$

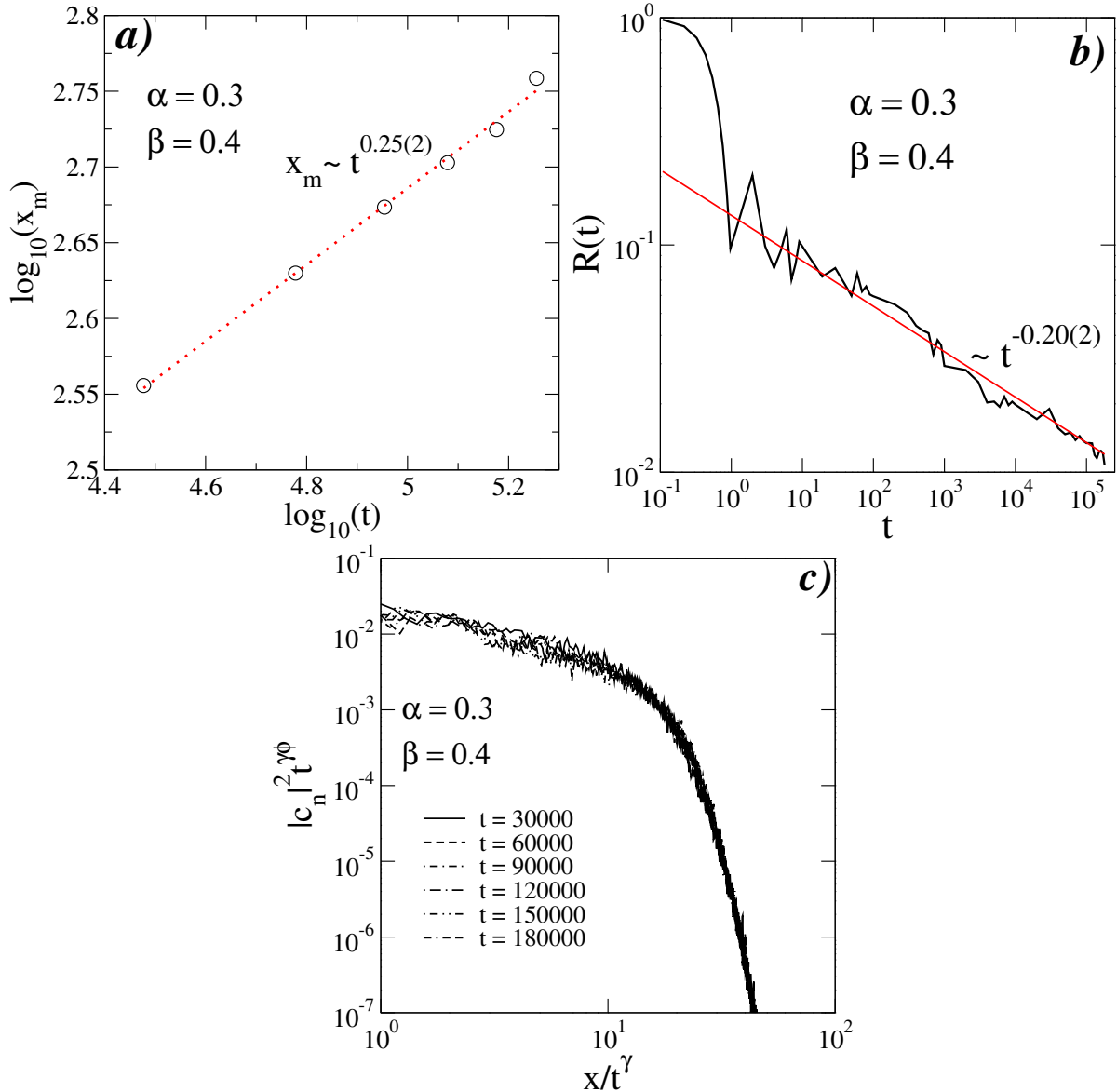
Por meio novamente da Eq. 4.16, em conjunto com a expressão $x_m \propto t^\gamma$ obtemos:

$$\sigma(t)^2 \propto G_1 t^{2\nu} + H_2 t^{\gamma(3-2\phi)}. \quad (4.23)$$

O segundo termo deve dominar a dependência temporal do alargamento do pacote de ondas, levando assim a $\sigma(t) \propto t^{\gamma(3-2\phi)/2}$.

Agora podemos pensar: É possível corroborar a análise acima com nossos resultados numéricos? Vamos checar então: Na Fig. 4.5(a), nós estimamos a posição de corte para tempos iniciando em $t = 3.0 \times 10^4$ até $t = 1.8 \times 10^5$. Nosso melhor ajuste indica que $x_m \propto t^\gamma$, com $\gamma = 0.25(2)$. Na Fig. 4.5(b), nós mostramos a probabilidade de retorno ($R(t) = |c_{N/2}|^2$) versus tempo. Neste caso, o melhor ajuste mostra que $R(t) \propto t^{-\nu}$ com $\nu = 0.20(2)$. Por fim, na Fig. 4.5(c), checamos nossa hipótese de escala através do colapso do perfil da função de onda para tempos distintos em uma única curva, para isto usamos $\phi = 0.5$, $\gamma = 0.25$, e $\nu = 0.2$, deste modo conseguimos recuperar com uma precisão aceitável, os expoentes da função de participação $\xi(t)$ e do deslocamento quadrático médio $\sigma(t)$.

FIGURA 4.5 – (a) Posição de corte x_m versus tempo para tempos de $t = 3.0 \times 10^4$ até $t = 1.8 \times 10^5$. O melhor ajuste mostra que $x_m \propto t^\gamma$ com $\gamma = 0.25(2)$. (b) A probabilidade de retorno ($R(t) = |c_{N/2}|^2$) versus o tempo t . Neste caso, o melhor ajuste nos permite estimar que $R(t) \propto t^{-\nu}$ com $\nu = 0.20(2)$. (c) Os dados colapsados do perfil da função de ondas para tempos distintos em uma única curva com $\phi = 0.5$.



Fonte: Autor, 2016.

4.4 Conclusões

Nós investigamos a dinâmica de um estado eletrônico se movendo em uma cadeia finita de DNA com uma única hélice contendo N bases, em que consideramos além da distribuição de desordem DNA intrínseca, o efeito das vibrações do DNA. Estudamos a dinâmica eletrônica usando a Hamiltoniana de um elétron *tight-binding*, e uma Hamiltoniana harmônica clássica para descrever as vibrações do DNA. O termo elétron-rede foi considerado de tal forma que a energia de *hopping* eletrônica pudesse depender da dis-

tância efetiva entre as bases mais próximas do DNA. Nossa análise foi feita ajustando a intensidade do acoplamento elétron-fônon α , bem como, a constante de mola harmônica β .

Nossos principais cálculos revelam que o acoplamento elétron-fônon pode transpor a localização de Anderson, promovendo o aparecimento de uma dinâmica sub-difusiva para tempos longos. Além disso, estudamos o efeito de correções anarmônicas sobre as interações de primeiros vizinhos entre as bases, levada em conta através de uma força cúbica semelhante à descrita no modelo Fermi-Pasta-Ulan ([FERMI et al., 1955](#)). O resultado numérico no limite de fracos efeitos anarmônicos garante que a intensidade do acoplamento elétron-fônon, de fato promove um alargamento sub-difusivo do pacote de ondas.

Desejamos que os consensos apresentados neste tema sejam contributivos e construtivos para os futuros leitores, bem como, esperamos realizar abordagens mais aprofundadas nesta linha de pesquisa, a fim de entender as importantes peculiaridades dos sistemas biológicos, em especial, a cadeia de DNA. Este problema foi publicado em 2015, na **Journal of Physical: Condense Matter** (veja o artigo na íntegra no Anexo).

5 SAW em Redes Desordenadas Não-Lineares de Morse-Toda

5.1 Introdução

O primeiro trabalho teórico sobre ondas elásticas se propagando em superfícies sólidas é remanescente de quase um século e meio, sendo inicialmente proposta por Lord Rayleigh, 1885. Neste trabalho, propõe-se investigar o comportamento de ondas sobre a superfície livre planar de um sólido elástico isotrópico homogêneo e infinito, de modo que as perturbações feitas ao sólido estejam confinadas a uma região restrita do sólido, com espessura comparável ao comprimento de onda (STRUTT, 1885). Quase um século após a construção deste trabalho, surgiu interesse na comunidade científica em construir os chamados materiais SAW, isto é, materiais baseados em ondas acústicas de superfície (SLOBODNIK, 1976). A expectativa com estas abordagens é em otimizar os dispositivos construídos a partir materiais SAW, isto é, materiais que possibilitam o transporte de ondas acústicas de superfície. Para tanto, a comunidade científica tem investigado os efeitos de parâmetros como, a velocidade, o coeficiente de acoplamento, coeficientes de temperatura, o regime de propagação das ondas, bem como, os parâmetros utilizados em circuitos equivalentes. Todos esses estudos tem objetivo de promover avanços na construção de dispositivos SAW (SLOBODNIK, 1976). A base teórica para estas investigações permeia algumas definições analíticas específicas da área. No trabalho realizado por Mayer, 1995, é feita uma interessante revisão teórica sobre SAW em meios com elasticidade não-linear e linear. No caso linear, os meios homogêneos são responsáveis pela propagação da ondas acústicas de superfície (MAYER, 1995). Por outro lado, os meios com elasticidade não-linear têm como representantes as ondas de Rayleigh (SAW), ondas Gulyaev-Bleustein, ondas “love” e outras ondas de torção, ondas em planos e estruturas em camadas, e ondas de superfície em cristais. Este conjunto de estruturas matemáticas permitem abordagens sobre meios com estruturas atômicas não organizadas, isto é, meios não-homogêneos (MAYER, 1995; BIRYUKOV *et al.*, 1995). Os conceitos analíticos referentes as estas estruturas estão detalhados na seção 1.4.3.

Diante deste cenário teórico sobre ondas acústicas de superfície, podemos nos perguntar sobre a viabilidade de aplicação destes conceitos teóricos em pesquisas experimentais. Um fato que embarreira esta aplicação é que não existem muitos materiais entre os milhares de cristais existentes na natureza que possam satisfazer as altas demandas de produção em massa do mercado tecnológico. Principalmente, devido a certas condições como: a existência de cristais que tenham dimensões suficientemente grandes, a possibilidade de gerar uma onda com determinadas especificações, a estabilidade térmica, pequenas difrações das SAW, e etc. Daí, apenas alguns materiais (quartzo, niobato de lítio, o tantalato de lítio e etc.) podem ser usados com estes fins. Entre os materiais utilizados, o *GaAs* parece ser uma opção. Sobre este material, foi feita uma investigação sobre o transporte de um único elétron de alta frequência em um canal de *GaAs* quasi-unidimensional mediado por ondas acústicas de superfície (SHILTON *et al.*, 1996). Este estudo foi estendido para o caso específico de um canal 1-*d* (TALYANSKII *et al.*, 1997). Os resultados experimentais apontados por estes autores demonstram que o transporte de “cargas” acústicas em um canal unidimensional pode ser um meio viável de produzir um padrão de corrente elétrica. Na investigação tematizando a transferência de elétrons entre pontos quânticos distantes (MCNEIL *et al.*, 2011), os autores consideraram um pulso de SAW com objetivo de mover elétrons. No âmbito biológico as ondas acústicas de superfície também podem ser utilizadas como ferramenta tecnológica, onde observamos na literatura a utilização de materiais biológicos e SAW na construção de bio-sensores (LÄNGE *et al.*, 2008) (ver Fig. 1.15). Ainda na linha biológica, destacamos o trabalho de Ding *et al.*, 2012, onde são utilizadas SAW na manipulação de micropartículas, como células e outros organismos. Essa técnica fornece significativas vantagens no manuseio de micropartículas biológicas, como biocompatibilidade e versatilidade (DING *et al.*, 2012) (ver Fig. 1.16).

O tema em torno de ondas acústicas de superfície (SAW) tem grande viabilidade em pesquisas científicas e tecnológicas. Como base neste conceito, é possível construir um modelo que possa prever a propagação de ondas acústicas em um sistema unidimensional influenciando na dinâmica eletrônica. Para tanto, é preciso selecionar na literatura estudos que tratam de interações elétron-rede (HENNIG *et al.*, 2006; HENNIG *et al.*, 2007; HENNIG *et al.*, 2008; SU-SCHRIEFFER-HEEGER, 1979). Nestas abordagens, têm-se interesse em particular na possibilidade de acoplar uma rede clássica 1-*d* com a dinâmica eletrônica. Assim, seguindo a modelagem proposta por (HENNIG *et al.*, 2006; HENNIG *et al.*, 2007; HENNIG *et al.*, 2008). Isto é, estudar a interação elétron-fônon para uma rede de Morse (MORSE, 1929) com o termo de interação dependendo exponencialmente com as distâncias efetivas entre os sítios primeiros vizinho. Têm-se a possibilidade de verificar os efeitos da interação elétron-rede e das ondas acústicas sobre o transporte de elétrons. Utilizando uma cadeia harmônica submetida às vibrações acústicas, e ao mesmo tempo acoplada à dinâmica eletrônica de acordo com o modelo de aproximação SSH, o trabalho de (NETO *et al.*, 2016) identificou um regime sub-difusivo para a dinâmica eletrônica. Além

disso, observou-se que à medida que a rede era acoplada com o elétron, o pacote de ondas eletrônico tendia a se espalhar pela rede. É importante ressaltar que o sistema adotado pelos autores levava em conta os efeitos de desordem, tanto nas massas das partículas como na energia potencial das mesmas. A seguir veremos detalhes sobre o modelo usado neste, logo depois são apresentados e discutidos os principais resultados, e por fim, as conclusões obtidas a partir deste estudo.

5.2 Modelo de Cadeia de Polipeptídeo

Nosso modelo consiste em um sistema desordenado $1d$ com N moléculas acopladas pelas forças de Morse (MORSE, 1929) onde um elétron é injetado na cadeia (HENNIG *et al.*, 2006; HENNIG *et al.*, 2007; HENNIG *et al.*, 2008). Estamos particularmente interessados em investigar como o pacote de ondas eletrônico se comporta na rede de Morse quando é submetida à influência do bombeamento de ondas acústicas. Neste casos, deveremos verificar uma possível mobilidade da onda eletrônica ao longo da rede devido a ação das ondas elásticas sobre a mesma, ou ainda, os efeitos de ondas acústicas de superfície sobre a condutividade elétrica. Essa hipótese deve ser baseada nas interações elétron-fônon, que construímos através do modelo não aproximado SSH (SU-SCHRIEFFER-HEEGER, 1979). O *hopping* (energia cinética) do elétron possui uma dependência exponencial com as distâncias relativas interatômicas entre as moléculas primeiras vizinhas. Sendo H_{ele} a Hamiltoniana eletrônica e $H_{rede-Morse}$ a Hamiltoniana da rede de Morse, montamos a Hamiltoniana de transporte de cargas, onde temos um elétron acoplado à rede não-linear de Morse,

$$H = H_{ele} + H_{rede-Morse}, \quad (5.1)$$

onde o termo que representa a mecânica quântica do transporte de elétrons sobre as moléculas nas circunstâncias de um sistema *tight-binding* (H_{ele})

$$H_{ele} = \sum_{n=1}^N \varepsilon_n f_n^\dagger f_n + \sum_{n=1}^N \tau_{n,n-1} (f_n^\dagger f_{n-1} + f_n f_{n-1}^\dagger). \quad (5.2)$$

Sobre a equação acima, n indica o local da n -ésima molécula na rede e a norma quadrática $|f_n|^2$ especifica a probabilidade de encontrar a carga ou elétron neste local. O termo $\tau_{n,n-1}$ informa os elementos da matriz de transferência, sendo portanto, o agente transportador dos elétrons entre os sítios vizinhos ao longo da cadeia. Além disso, o potencial *on-site* ε_n deve ser dado por uma sequência de números aleatórios uniformemente distribuídos dentro do intervalo $[-\frac{W}{2}; +\frac{W}{2}]$.

O termo clássico da Hamiltoniana total H (Eq. 5.1), isto é, a Hamiltoniana da rede de Morse $H_{rede-Morse}$ modela a dinâmica dos deslocamentos longitudinais das posições de

equilíbrio das moléculas, produzindo assim, alterações dos comprimentos das ligações. De acordo com (HENNIG *et al.*, 2006; HENNIG *et al.*, 2007; HENNIG *et al.*, 2008; CHETVERIKOV *et al.*, 2006; CHRISTIANSEN *et al.*, 1992; VEKHTER *et al.*, 1994; YOMOSA, 1985), a dinâmica das vibrações na rede pode ser aproximadamente construída através dos potenciais de Morse,

$$H_{rede-Morse} = \sum_{n=1}^N \left\{ \frac{p_n^2}{2M_n} + D(1 - \exp[-B(u_n - u_{n-1})])^2 \right\}. \quad (5.3)$$

Os momentos $p_n = M_n \dot{u}_n$ identificam as quantidades de movimento das moléculas, quando são excitadas. As massas M_n das moléculas são geradas por números aleatórios seguindo a fórmula $M_n = e^{\gamma_n}$, onde γ_n são números aleatórios uniformemente distribuídos dentro do intervalo $[-\frac{W}{2}; +\frac{W}{2}]$ (NETO *et al.*, 2016). A constante D indica a energia de desintegração de uma ligação, B é o parâmetro de escala do potencial de Morse (rigidez ou dureza), e finalmente, u_n rotula os deslocamentos das moléculas a partir de suas posições de equilíbrio ao longo do eixo molecular. Segundo (HENNIG *et al.*, 2007), o potencial de Morse exhibe uma parte repulsiva-exponencial, que previne o cruzamento de partículas da rede vizinha (moléculas) com grandes deslocamentos. É importante termos em mente que é possível expandir esta função exponencial e assim recobrar em baixa ordem o limite harmônico. Se tomarmos termos de mais alta ordem, podemos encontrar potenciais anarmônicos (tipo α -FPU e β -FPU (FERMI *et al.*, 1955)). Estas formas de potenciais são revidas em detalhes por (ASHCROF *et al.*, 1976; KITTEL, 2005).

Os termos de *hopping* $\tau_{n,n-1}$ tem o papel de construir a interação entre a dinâmica do elétron e os estados vibracionais da rede. Em nossa abordagem, faremos este termo depender da distância relativa entre duas moléculas consecutivas da rede de Morse, tomando assim a seguinte forma:

$$\tau_{n,n-1} = -\tau_0 e^{-\alpha(u_n - u_{n-1})}, \quad (5.4)$$

em que α regula o quão forte $\tau_{n,n-1}$ está relacionado com diferença $u_n - u_{n-1}$. Podemos afirmar ainda que este parâmetro representa a intensidade de acoplamento entre o elétron e a cadeia. τ_0 indica o termo de *hopping* na ausência de acoplamento elétron-fônon. Em um outro viés, a combinação do elétron e sua região de deformação longitudinal da cadeia molecular possibilita a formação do *polaron* (KITTEL, 2005). É importante deixar claro que a forma exponencial da rede levada em conta aqui, abrange tanto pequenos como grandes deslocamentos das unidades de rede, transpondo assim, as barreiras que as interações harmônicas estabelecem (ASHCROF *et al.*, 1976; CHRISTIANSEN *et al.*, 1992; DAVYDOV, 1977; KITTEL, 2005; SCOTT, 1992; VEKHTER *et al.*, 1994). Quando ocorrem pequenos deslocamentos relativos, a dependência exponencial do *hopping* com a rede pode resultar na famosa aproximação de Su, Schrieffer, Heeger (SSH) $\tau_{n,n-1} \approx -\tau_0[1 - \alpha(u_n - u_{n-1})]$ (SU-SCHRIEFFER-HEEGER, 1979).

Na modelagem feita aqui, geralmente considera-se que as quantidades em estudo

sejam reescaladas, fazendo com que as equações fiquem adimensionais. Para tanto, leve-se em conta a unidade de tempo Ω_{Morse}^{-1} ($t \rightarrow \Omega_{Morse} t$), em que $\Omega_{Morse} = \sqrt{2DB^2/M_n}$ representa a frequência de oscilações harmônicas (aproximações de primeira ordem para a exponencial de Morse). Já a energia possui a unidade de $(2D)$, no caso do deslocamento foi tomado como unidade B^{-1} , e por fim o momento tem a unidade de $(\sqrt{2M_n D})^{-1}$. Deste modo, a força de interação é medida por $\alpha\tau_0/2BD$, com o acoplamento sendo medido por (B^{-1}) unidades (VELARDE *et al.*, 2006). Portanto, por meio de novas quantidades adimensionais e considerando a função de onda dependente do tempo $|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|n\rangle$ podemos determinar a equação de Schrödinger dependente do tempo (VELARDE *et al.*, 2006):

$$i \frac{dc_n(t)}{dt} = \varepsilon_n c_n(t) - \nu (\exp[-\alpha(u_{n+1} - u_n)] c_{n+1}(t) + \exp[-\alpha(u_n - u_{n-1})] c_{n-1}(t)), \quad (5.5)$$

onde temos utilizado as amplitudes de Wannier e que $\hbar = 1$. Por outro lado, as equações responsáveis pela transmissão dos modos elásticos são dadas por

$$M_n \frac{d^2 u_n}{dt^2} = \{ [1 - e^{-(u_{n+1} - u_n)}] e^{-(u_{n+1} - u_n)} - [1 - e^{-(u_n - u_{n-1})}] e^{-(u_n - u_{n-1})} \} + \alpha\tau [(c_{n+1}^* c_n + c_{n+1} c_n^*) e^{-\alpha(u_{n+1} - u_n)} - (c_n^* c_{n-1} + c_n c_{n-1}^*) e^{-\alpha(u_n - u_{n-1})}]. \quad (5.6)$$

Onde $\nu = \tau/(\Omega_{Morse} \hbar)$ na Eq. 5.5 é chamado de parâmetro adiabático, e determina o grau de separação da escala temporal entre o processo eletrônico (rápido) e acústico (lento) (HENNIG *et al.*, 2007). Em geral, as escalas de tempo nas Eqs. 5.5 e 5.6 não são iguais (em termos de frequências se referem ao ultravioleta para o caso eletrônico e infravermelho no caso de acústico) para a maioria dos casos com elétrons e fônons. Especificamente em nossa abordagem, estaremos utilizando $\nu = 10$ e $\tau = 0.1$, assim como é feito em (HENNIG *et al.*, 2007).

Devido aos efeitos que a desordem no sistema causam sobre a precisão dos cálculos numéricos, nós aprimoramos a técnica de solução de equações diferenciais utilizada no Cap. 3. Inicialmente, a técnica não sofre alterações para a solução da parte eletrônica, isto é, a solução da equação que resulta na dinâmica eletrônica (Eq. 5.5) continua a ser resolvida através de um método de expansão de Taylor de alta ordem (de MOURA, 2011; SALES *et al.*, 2014). De forma análoga ao que vimos no Cap. 3, fazemos a expansão de Taylor do operador evolução temporal $\Upsilon(\Delta t)$

$$\Upsilon(\Delta t) = \exp(-iH_{ele}\Delta t) = 1 + \sum_{l=1}^{L_0} \frac{(-iH_{ele}\Delta t)^l}{l!}, \quad (5.7)$$

Tendo início com a função de ondas ($|\Psi(\Delta t)\rangle = \Upsilon(\Delta t)|\Psi(\Delta t)\rangle$), seguimos com a aplicação recursiva deste procedimento para encontrar a função de onda no tempo t ($|\Psi(t)\rangle$). Con-

juntamente a solução da Equação de Schrödinger, utilizamos o método de Euler de quarta ordem (HAIRER *et al.*, 2008), a fim de manter a precisão numérica bem comportada. Esse procedimento segue as seguintes etapas:

1 - usar o método de Euler padrão para obter uma solução inicial da posição no instante $t + \Delta t$, a qual rotulamos por $u_n^1(t + \Delta t)^*$. Matematicamente, esta previsão é descrita por

$$u_n^1(t + \Delta t)^* \approx u_n(t) + \Delta t \left(\frac{du_n^1(t)}{dt} \Big|_t \right). \quad (5.8)$$

2 - aplicar uma correção recursiva para corrigir a previsão inicial 5.8. Onde encontramos uma solução corrigida para $u_n(t + \Delta t)$, dada por

$$u_n(t + \Delta t) = u_n^4(t + \Delta t)^*, \quad (5.9)$$

sendo $u_n^4(t + \Delta t)^*$ calculado no procedimento a seguir

$$u_n^2(t + \Delta t)^* \approx u_n(t) + \frac{\Delta t}{2} \left[\frac{du_n(t)}{dt} \Big|_t + \left[\frac{du_n^1(t)^*}{dt} \Big|_{t+\Delta t} \right] \right],$$

$$u_n^3(t + \Delta t)^* \approx u_n(t) + \frac{\Delta t}{2} \left[\frac{du_n(t)}{dt} \Big|_t + \left[\frac{du_n^2(t)^*}{dt} \Big|_{t+\Delta t} \right] \right],$$

$$u_n^4(t + \Delta t)^* \approx u_n(t) + \frac{\Delta t}{2} \left[\frac{du_n(t)}{dt} \Big|_t + \left[\frac{du_n^3(t)^*}{dt} \Big|_{t+\Delta t} \right] \right]. \quad (5.10)$$

Para realização destes cálculos estaremos utilizando o passo $\Delta t \approx 1 \times 10^{-3}$ e $L_0 = 12$ na Eq. 5.5. Estas configurações foram suficientes para manter a norma da função de onda comportada em $|1 - \sum_n |c_n(t)|^2| < 10^{-12}$ em todo o intervalo de tempo estudado, isto é, $0 < t < t_{max}$, com $t_{max} = 2 \times 10^4$. Em nossa solução numérica, iremos considerar que o elétron está inicialmente localizado em um certo sítio n na cadeia $|\Psi(t=0)\rangle = \sum_n c_n(t=0)|n\rangle$, onde $c_n(t=0) = \delta_{n_0,n}$. Com respeito ao bombeamento, iremos considerar que a cadeia seja bombeada por ondas acústicas em uma das extremidades da cadeia, neste caso, no sítio $n = 0$. Vamos considerar a condição inicial de bombeamento Gaussiano (ver Eq. 1.97 do capítulo de revisão), dada por:

$$u_0 = Q_0 e^{-t^2/\zeta} \cos \omega t, \quad (5.11)$$

onde temos a constante $\zeta = 10$ e $Q_0 = 1$ sendo a amplitude de u_0 . Fazendo uso dessa

condição inicial, podemos investigar os possíveis efeitos do bombeamento acústico sobre a mobilidade do pacote de ondas eletrônico. Considerando esta hipótese, devemos soltar o elétron inicialmente no sítio $n = 1$, isto é, fazer $c_n(t = 0) = \delta_{1,n}$.

Nossas medidas devem ser realizadas através da Entropia de Shannon $S(t)$ (SANTOS *et al.*, 2006) e da posição média do pacote de ondas de spin $\langle n \rangle(t)$, dadas por

$$S(t) = - \sum_n |c_n(t)|^2 \ln(|c_n(t)|^2), \quad (5.12)$$

e

$$\langle n \rangle(t) = \sum_n (n - n_0) |c_n(t)|^2. \quad (5.13)$$

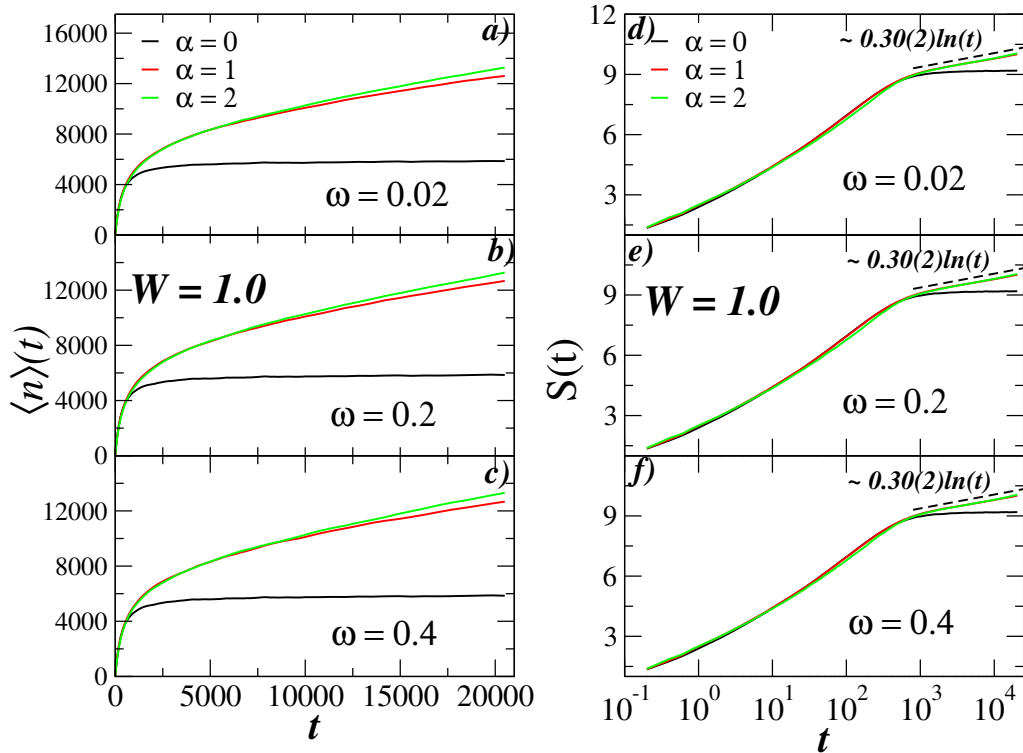
É importante perceber que $S(t) \rightarrow 0$ identifica uma função de onda confinada em um único sítio, e $S(t) \rightarrow \ln(N)$ quando a onda é uniformemente estendida sobre toda a cadeia (NAZARENO *et al.*, 1999; SANTOS *et al.*, 2006; SHANNON, 1949). Através dessas medidas, poderemos entender os possíveis efeitos do acoplamento e da onda acústica sobre o transporte de cargas.

Os resultados para a maioria dos trabalhos abordados por Velarde *et al* em redes de Morse sugerem, para parâmetros e circunstâncias específicas, que ondas solitônicas formadas no sistema aprisionam o elétron, permitindo que o mesmo tenha mobilidade ao longo da rede, este fenômeno é comumente conhecido como *self-trapping*. De um modo geral, é estabelecido que o sóliton seja capaz de mediar o transporte elétrico (CHETVERIKOV *et al.*, 2006; CHETVERIKOV *et al.*, 2013; CHETVERIKOV *et al.*, 2014; HENNIG *et al.*, 2006; HENNIG *et al.*, 2007; HENNIG *et al.*, 2008; VELARDE *et al.*, 2008; VELARDE *et al.*, 2005; VELARDE *et al.*, 2006; VELARDE, 2010; VELARDE *et al.*, 2014). Queremos agora compreender como estes modos solitônicos se comportam, quando a extremidade esquerda da rede é submetida a um bombeamento acústico Gaussiano descrito pela Eq. 5.11. Esta excitação elástica foi colocada no sítio $n = 0$, e ao mesmo injetamos um elétron no sítio $n = 1$. Ao realizar este experimento, deixamos que o sistema evoluísse no tempo. Daí, com a finalidade de evitar os efeitos de borda na extremidade direita da rede, impomos a condição de que se a probabilidade de encontrar o elétron na extremidade direita ultrapassar 10^{-20} , quinze novos sítios sejam adicionados à borda. Permitimos portanto, que a cadeia tenha o recurso de se auto-expandir.

5.3 Resultados

Em nossa abordagem sobre o problema, checamos a influência de três parâmetros sobre o espalhamento e a mobilidade do pacote ondas, a intensidade de acoplamento elétron-rede α , a frequência angular ω das ondas acústicas bombeadas e por fim, a in-

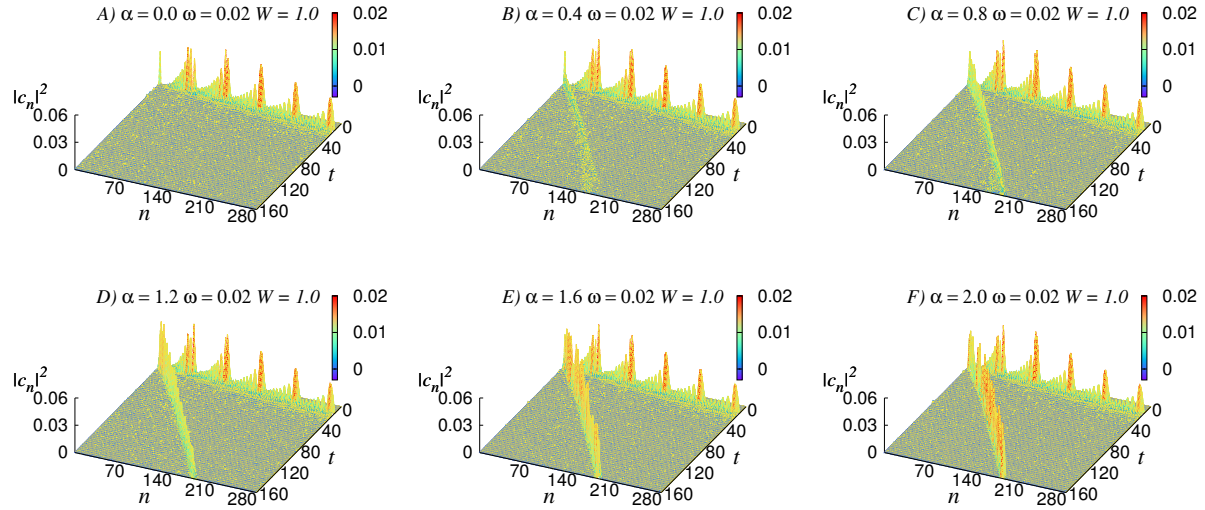
FIGURA 5.1 – Medidas da posição média do pacote de ondas $\langle n \rangle(t)$ (a), b), c)) e a entropia de informação de Shannon $S(t)$ (d), e), f)) para $\omega = 0.02, 0.2, 0.4$, respectivamente. Intensidade de desordem $W = 1.0$. E acoplamento elétron-rede $\alpha = 0.0, 1.0, 2.0$. Onde observamos um aumento na mobilidade do elétron com o aumento de acoplamento elétron-rede, e um regime sub-difusivo para a propagação do elétron.



Fonte: Autor, 2016.

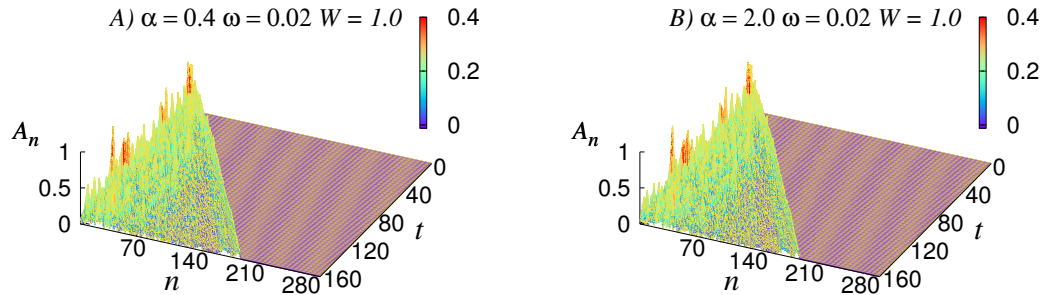
tensidade de desordem no sistema W . A princípio, investigamos na Fig. 5.1 o grau de desordem $W = 1.0$, onde medimos a posição média do pacote de ondas $\langle n \rangle(t)$ (a), b), c)) e a entropia de informação de Shannon $S(t)$ (d), e), f)) para $\omega = 0.02, 0.2, 0.4$, respectivamente. Podemos observar em 5.1, que a intensidade de acoplamento entre o elétron e as vibrações da rede influenciam diretamente na posição do pacote de ondas, bem como, na propagação do pacote de ondas eletrônico. De acordo com a Fig. 5.1 a), o aumento da interação elétron-rede faz o elétron ter maior mobilidade ao longo da rede. É importante perceber que na ausência de acoplamento $\alpha = 0.0$, o pacote de ondas se desloca até uma certa posição na rede, daí em diante, não mais se espalha ao longo da dinâmica temporal. Este resultado está em bom acordo com (NETO *et al.*, 2016; SALES *et al.*, 2012; SALES *et al.*, 2015). Apesar da notável evidência das diferenças de propagação devido a mudança do parâmetro α , não se pode afirmar o mesmo da frequência angular do bombeamento acústico. À medida que aumentamos a frequência para $\omega = 0.2$ e $\omega = 0.4$, a mobilidade do pacote de ondas se mostra invariante. Este mesmo fato se aplica as medidas realizadas a partir da entropia de Shannon $S(t)$, onde identificamos o mesmo tipo de regime sub-difusivo ($S(t) \propto 0.30(2)\ln(t)$) na presença de acoplamento elétron-rede $\alpha = 1$ e 2, para

FIGURA 5.2 – Vemos aqui uma análise da densidade de probabilidade $|c_n(t)|^2$ variando com o tempo t e a rede n , para $W = 1.0$, $\omega = 0.02$ e $\alpha = 0.0, 0.4, 0.8, 1.2, 1.6, 2.0$. Onde observamos que o par elétron-sóliton é realçado com o aumento na intensidade de α , isto é, o efeito *self-trapping* é favorecido pelo aumento das interações elétron-rede.



Fonte: Autor, 2016.

FIGURA 5.3 – Medidas sobre a deformação da rede A_n medida por $A_n = |\exp(u_n - u_{n-1}) - 1|$ versus o tempo t versus n , para $W = 1.0$, $\omega = 0.02$, $\alpha = 0.4$ e 2.0 . Neste caso, percebe-se que os modos solitônicos coincidem com a direção descrita pelo pacote de ondas eletrônico (ver Figs. 5.2).



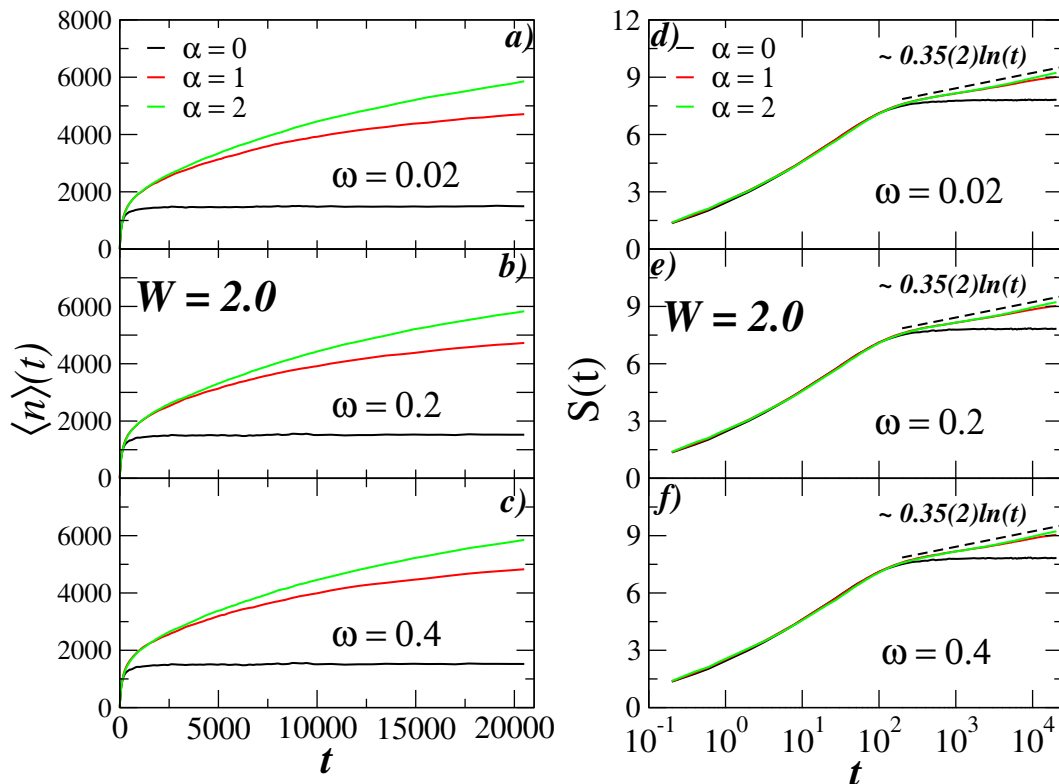
Fonte: Autor, 2016.

os três valores de ω estudados ($\omega = 0.02, 0.2, 0.4$). Esta dinâmica sub-difusiva está em acordo com estudos sobre a interação elétron-rede dependendo exponencialmente com as distâncias entre as moléculas primeiras vizinhas de uma cadeia de DNA com única hélice para redes com vibrações harmônicas e anarmônicas (NETO *et al.*, 2016; SALES *et al.*, 2015).

As Figs. 5.2 mostram o cálculo da densidade de probabilidade $|c_n(t)|^2$ variando com o tempo t e a rede n , para $W = 1.0$, $\omega = 0.02$ e $\alpha = 0.0, 0.4, 0.8, 1.2, 1.6, 2.0$. Identificamos que o par elétron-sóliton é realçado com o aumento na intensidade do acoplamento elétron-rede α , isto é, o efeito *self-trapping* é favorecido pelo aumento

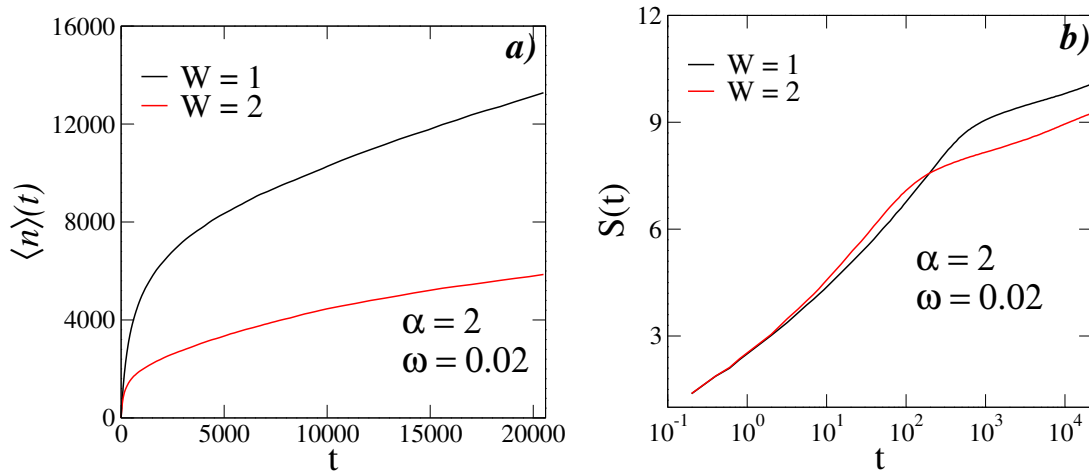
das interações elétron-rede. Esta evidência corrobora com os resultados mostrados nas Figs. 5.1a, 5.1b e 5.1c, onde a posição do pacote de ondas cresce com o aumento de α . Mas estamos levando em conta a presença do acoplamento elétron-rede, daí, além de investigarmos o comportamento do elétron, devemos medir o comportamento das ondas solitônicas ao longo da rede. Para tal objetivo, usamos a medida da deformação da rede A_n (ver Figs. 5.3), definida aqui por $A_n = |\exp(u_n - u_{n-1}) - 1|$. Fazendo esta função evoluir no tempo e na cadeia para os parâmetros $W = 1.0$, $\omega = 0.02$, $\alpha = 0.4$ e 2.0 , percebemos que os modos solitônicos coincidem com a direção descrita pelo pacote de ondas eletrônico (ver Figs. 5.2). Esta evidência comprova portanto, o aprisionamento do elétron pelos modos solitônicos intrínsecos da rede.

Até então, temos estudado os efeitos de ondas acústicas acopladas à dinâmica eletrônica apenas para a intensidade de desordem $W = 1.0$. Mas o que ocorre com a dinâmica do elétron ao crescer o valor de W ? Para responder este questionamento, nós repetimos as análises feitas nas Figs 5.1, 5.2, e 5.3 para intensidade de desordem $W = 2.0$. Daí, voltamos a investigar a posição média do pacote de ondas $\langle n \rangle(t)$ (a), b), c)) e da entropia de informação de Shannon $S(t)$ (d), e), f)) para $\omega = 0.002, 0.2, 0.4$, respectivamente. Intensidade de desordem $W = 2.0$. E acoplamento elétron-rede $\alpha = 0.0, 1.0, 2.0$. Nestas circunstâncias, os efeitos sobre a mobilidade do elétron e a dinâmica temporal são atenuados pelo maior grau de desordem.



pia de informação de Shannon $S(t)$ (*d*, *e*, *f*) para $\omega = 0.02, 0.2, 0.4$, respectivamente. Intensidade de desordem $W = 2.0$ e acoplamento elétron-rede $\alpha = 0.0, 1.0, 2.0$. Nestas circunstâncias, os efeitos sobre a mobilidade do elétron e a dinâmica temporal são atenuados pelo maior grau de desordem (ver Figs. 5.4). É notável que os efeitos do aumento na intensidade do acoplamento elétron-rede para este caso são ainda mais favoráveis que em $W = 1.0$ (ver resultados para o centroide $\langle n \rangle(t)$ nas Figs. 5.4*a*), 5.4*b*), 5.4*c*). Por outro lado, as medidas da entropia de Shannon indicam um comportamento sub-difusivo ($S(t) \propto 0.35(2) \ln(t)$) para a propagação do elétron. Esse regime se ratifica para todos os valores de ω estudados em 5.4. Porém, apesar de ter uma escala de crescimento temporal superior a observada para $W = 1.0$, a propagação do elétron para $W = 2.0$ abrange uma porção inferior da cadeia, como podemos observar nas Figs. 5.4*d*), 5.4*e*), 5.4*f*). Este resultado está de acordo com (NETO *et al.*, 2016), onde os autores preveem que a constante de difusão diminui com o aumento do parâmetro de desordem. Essa hipótese é comprovada pela figura ilustrativa 5.5, onde notavelmente, o aumento de desordem no sistema provoca efeitos no espalhamento do pacote de ondas, bem como, sobre a mobilidade do elétron.

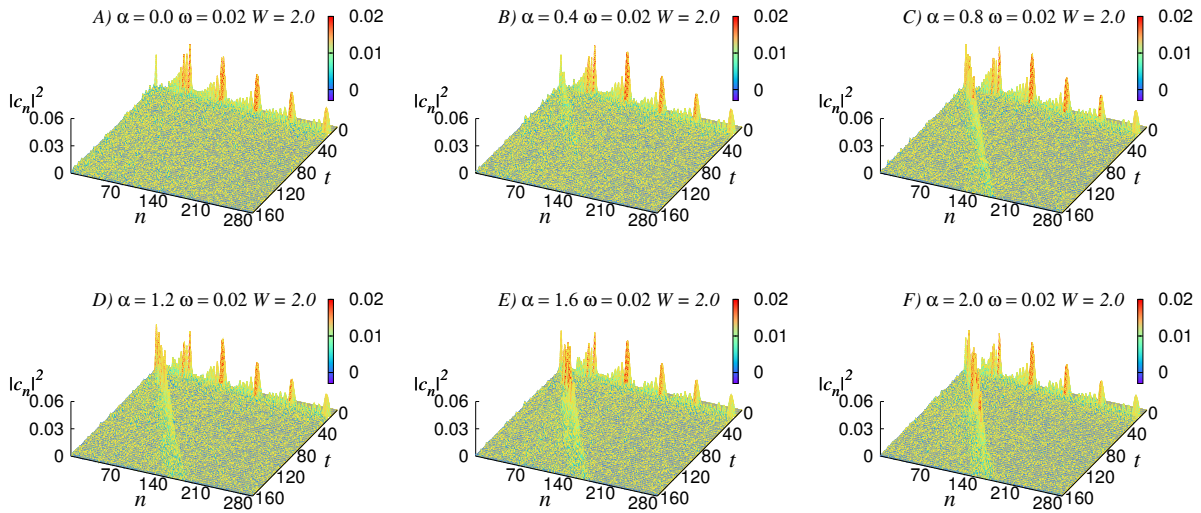
FIGURA 5.5 – Medida da posição média do pacote de ondas $\langle n \rangle(t)$ (*a*) e da entropia de informação de Shannon $S(t)$ (*b*) para $\omega = 0.02$, $W = 1.0, 2.0$, e $\alpha = 2.0$.



Fonte: Autor, 2016.

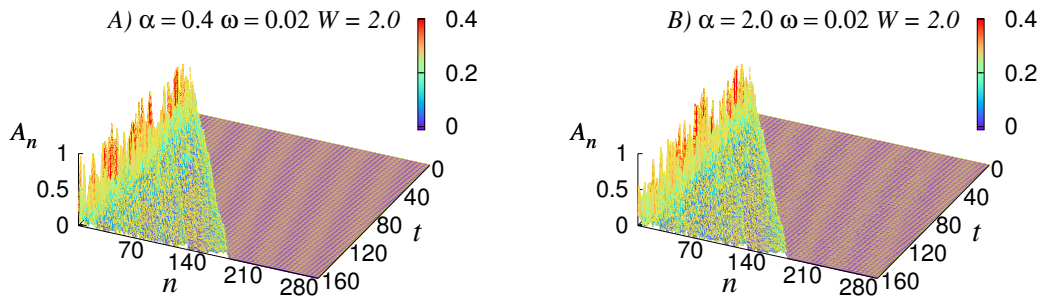
Com respeito as medidas da densidade de probabilidade $|c_n(t)|^2$ para maior grau de desordem ($W = 2.0$), observamos na Fig. 5.6 que o par elétron-sóliton tem maior dificuldade em se formar devido ao aumento na intensidade de desordem de $W = 1.0$ para $W = 2.0$ quando comparamos com as Figs. 5.2. No entanto, o aumento no parâmetro de acoplamento α continua a favorecer a mobilidade eletrônica. Daí, realizamos uma medida análoga a que foi feita na Fig. 5.3 para desordem $W = 1.0$. Porém, agora a medida de deformação da rede deve ser estudada para $W = 2.0$ (ver Fig. 5.7), onde é possível comprovar que as ondas solitônicas aprisionam o elétron para um sistema fortemente acoplado $\alpha = 2.0$.

FIGURA 5.6 – Medida da densidade de probabilidade $|c_n(t)|^2$ versus t versus n , para $W = 2.0$, $\omega = 0.02$ e $\alpha = 0.0, 0.4, 0.8, 1.2, 1.6, 2.0$. Observa-se que o par elétron-sóliton tem maior dificuldade em se formar devido ao aumento na intensidade de desordem de $W = 1.0$ para $W = 2.0$ quando comparamos com as Figs. 5.2. No entanto, o aumento no parâmetro de acoplamento α continua a favorecer a mobilidade eletrônica.



Fonte: Autor, 2016.

FIGURA 5.7 – Evidenciamos aqui, a deformação da rede A_n versus o tempo t versus n , para $W = 2.0$, $\omega = 0.02$, $\alpha = 0.4$ e 2.0 .



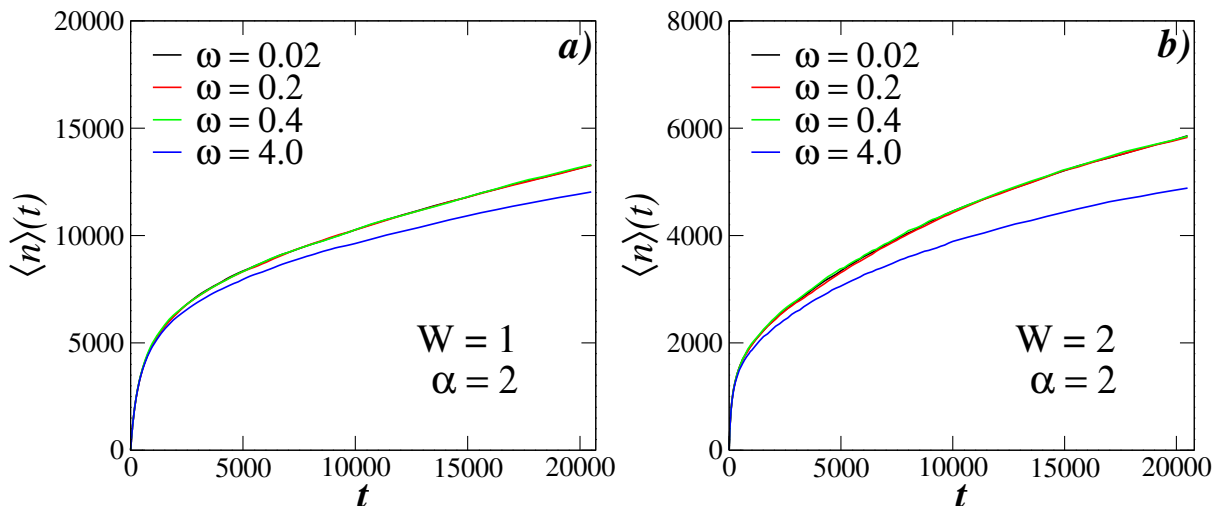
Fonte: Autor, 2016.

Os resultados anteriores apontam uma importante evidência sobre a propagação do pacote de ondas ao longo da rede, que nos chama a atenção pelo fato de que sistemas desordenados acoplados podem promover difusão eletrônica. No modelo de Anderson com desordem (ANDERSON, 1958), era estabelecido que o pacote de ondas se mostrava localizado para sistemas desordenados, porém aqui, apresentamos um meio alternativo de promover difusão eletrônica (sub-difusiva) em sistemas *tight-binding* desordenados. Este consiste, por sua vez, em acoplar as vibrações de uma rede de Morse à dinâmica do elétron, tendo ainda a presença de uma força vibracional Gaussiana controlada em umas

das bordas da cadeia. No estudo elaborado por (NETO *et al.*, 2016), observou-se os efeitos de difusão eletrônica semelhantes aos observados aqui (regime sub-difusivo). É importante ressaltar que neste estudo, também se leva em conta um sistema *tight-binding* desordenado. Porém, ao contrário de nosso estudo, os autores utilizaram uma rede harmônica em vez da rede Morse abordada neste trabalho. Com respeito ao tipo de bombeamento, os autores levaram em conta a presença do bombeamento de ondas acústicas tipo harmônica (NETO *et al.*, 2016).

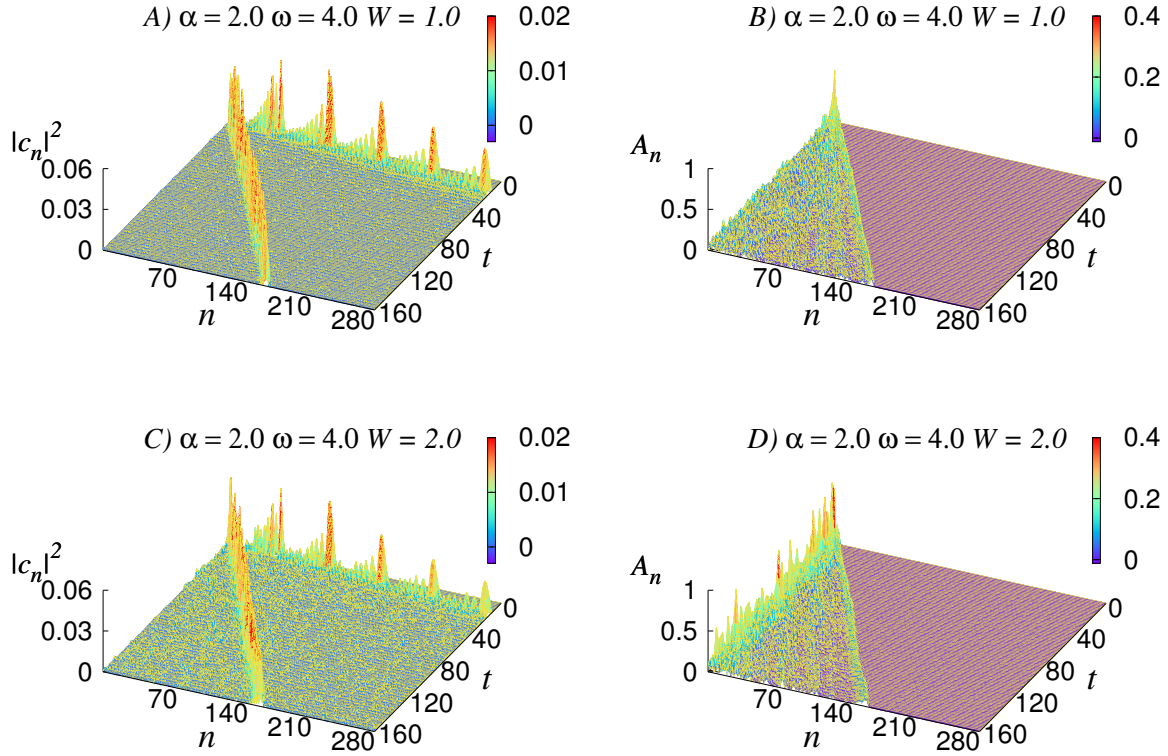
Temos investigado o modo como o pacote de ondas ganha mobilidade ao longo da rede para o aumento de acoplamento elétron-rede, para o aumento de desordem e também para a frequência angular do pulso Gaussiano na extremidade esquerda da cadeia, bem como, a forma em que o pacote de ondas se propaga ao longo da rede para estes mesmos parâmetros. Tendo em mente o fato de que o aumento na frequência angular para o bombeamento Gaussiano promove um maior alcance das vibrações elásticas ao longo da rede (ver Fig. 1.19), estudamos o efeito da frequência angular maior que a unidade ($\omega = 4$) para o sistema acoplado $\alpha = 2.0$. Mostramos inicialmente na Fig. 5.8, que a posição média do pacote de ondas sofre uma atenuação. Este fato é visto tanto para $W = 1.0$ como para $W = 2.0$. De fato o pacote de ondas tem mobilidade ao longo da rede para $\omega = 4.0$ e $\alpha = 2.0$, mesmo tendo uma escala de mobilidade espacial inferior a vista para $\omega < 1.0$ (ver Figs. 5.8). O que podemos pensar é: Este fato pode ser visto nas medidas de $|c_n(t)|^2$ variando com o tempo e a rede? De acordo com as medidas apresentadas nas Figs. 5.9 para a densidade de probabilidade da função de ondas $|c_n(t)|^2$ em um sistema acoplado $\alpha = 2.0$, frequência angular $\omega = 4.0$, desordem $W = 1.0$ (A) e $W = 2.0$ (C), o elétron realmente tem menor mobilidade do que os casos estudados para $\omega = 0.02$ (ver

FIGURA 5.8 – Medidas do centroide $\langle n \rangle(t)$ para $W = 1.0$ (painel a) e $W = 2.0$ (painel b), $\alpha = 2.0$, $\omega = 0.02, 0.2, 0.4$ e 4.0 . O fato inédito nesta figura consiste na medida para $\omega = 4.0$, onde identificamos um claro retardamento do pacote de ondas.



Fonte: Autor, 2016.

FIGURA 5.9 – Densidade de probabilidade da função de ondas $|c_n(t)|^2$ medida para um sistema acoplado $\alpha = 2.0$, frequência angular $\omega = 4.0$, desordem $W = 1.0$ (A) e $W = 2.0$ (C). Os mesmos parâmetros são usados para medir a deformação da rede $A_n(t)$, painéis B e D.



Fonte: Autor, 2016.

Figs. 5.2(F) e 5.6(F)). Além disso, notamos algo inédito neste estudo, a dissipação do par elétron-sóliton observada para $\omega = 0.02$ na Fig. 5.6(F), aparentemente é atenuada para $\omega = 4.0$ na Fig. 5.9(C). A direção do sóliton pode ser comprovada nas Figs. 5.9(B) e 5.9(D) para $W = 1.0$ e $W = 2.0$, respectivamente. Contudo, percebemos que além da intensidade de acoplamento elétron-rede, o bombeamento acústico tipo Gaussiano pode ser uma importante ferramenta para controlar a mobilidade eletrônica. Ou seja, podemos mediar o transporte de cargas modificando a forma com que uma rede de Morse é acoplada com a dinâmica eletrônica, bem como, a intensidade de uma força vibracional em uma das extremidades da rede é também uma ferramenta muito útil para auxiliar no transporte de cargas. Nossos resultados, portanto, estão em bom acordo com os estudos realizados por (CHETVERIKOV *et al.*, 2006; CHETVERIKOV *et al.*, 2009; CHETVERIKOV *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2012; CHETVERIKOV *et al.*, 2013; CHETVERIKOV *et al.*, 2014; EBELING *et al.*, 2013; HENNIG *et al.*, 2006; HENNIG *et al.*, 2007; HENNIG *et al.*, 2008; VELARDE *et al.*, 2008; VELARDE *et al.*, 2005; VELARDE *et al.*, 2006; VELARDE *et al.*, 2009; VELARDE, 2010; VELARDE *et al.*, 2011; VELARDE *et al.*, 2012; VELARDE *et al.*, 2014).

5.4 Conclusões

Neste trabalho, temos construído um sistema que acopla o modelo eletrônico *tight-binding* de Anderson (ANDERSON, 1958) a uma rede de Morse (MORSE, 1929). Além dos efeitos do acoplamento elétron-fônon, tivemos interessados em identificar os efeitos de uma força vibracional acústica tipo Gaussiana agindo em uma das extremidades da rede de Morse, onde as interações elétron-rede foram estruturadas de acordo com o modelo SSH não aproximado, isto é, com o *hopping* dependendo exponencialmente com as distâncias efetivas entre os sítios vizinhos. Em nossos principais resultados, percebemos que a ausência de acoplamento induz à localização do pacote de ondas em torno de uma região finita da rede, tal qual foi apontada por (NETO *et al.*, 2016; SALES *et al.*, 2012; SALES *et al.*, 2015). Por outro lado, quando estudamos os efeitos do acoplamento elétron-rede, percebemos uma dinâmica sub-difusiva para o elétron, estando portanto, de acordo com pesquisas realizadas por (NETO *et al.*, 2016; SALES *et al.*, 2015). Vale salientar que estivemos utilizando a intensidade de acoplamento $\alpha = 1.0$ e 2.0 nas medidas de dinâmica temporal. Quanto a intensidade de desordem e frequência angular das vibrações acústicas, notamos que o valor da intensidade de desordem W influencia drasticamente no regime de propagação temporal do pacote de ondas. Porém, para frequência angular $\omega < 1.0$, os efeitos sobre a dinâmica temporal do elétron são quase que não notáveis. Contudo, em uma análise um pouco mais detalhada, observamos para $\omega = 4.0$ que o pacote de ondas é retardado pela presença das ondas acústicas tipo Gaussiana.

Com respeito aos efeitos de nossos parâmetros (α , W e ω) sobre a mobilidade eletrônica, percebemos que o aumento na intensidade de acoplamento elétron-rede promove o surgimento do par elétron-sóliton, isto é, o elétron é aprisionado pelas ondas solitônicas, fazendo com que o mesmo tenha mobilidade ao longo da rede. Este efeito é conhecido por *self-trapping*, indicando o auto-aprisionamento do elétron pelo sólitons. Este resultado foi obtido para $\omega = 0.02$ e usando tanto $W = 1.0$ como $W = 2.0$. Além disso, para $\omega = 4.0$ os resultados referentes ao grau de aprisionamento do elétron são otimizados, e por outro lado, o grau de mobilidade eletrônica é atenuado para frequências $\omega > 1.0$. Em outras palavras, verificamos que é possível mediar o transporte de cargas modificando a forma com que uma rede de Morse é acoplada com a dinâmica eletrônica, bem como, a intensidade de uma força vibracional em uma das extremidades da rede é também uma ferramenta muito útil para auxiliar no transporte de cargas. Nossos resultados, portanto, estão em bom acordo com os estudos realizados por (CHETVERIKOV *et al.*, 2006; CHETVERIKOV *et al.*, 2006; CHETVERIKOV *et al.*, 2009; CHETVERIKOV *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2012; CHETVERIKOV *et al.*, 2013; CHETVERIKOV *et al.*, 2014; EBELING *et al.*, 2013; HENNIG *et al.*, 2006; HENNIG *et al.*, 2007; HENNIG *et al.*, 2008; VELARDE *et al.*, 2008; VELARDE *et al.*, 2005; VELARDE *et al.*, 2006; VELARDE *et al.*, 2009; VELARDE, 2010; VELARDE *et al.*, 2011; VELARDE *et al.*, 2012; VELARDE *et al.*, 2014).

6 Dinâmica Magnon-Sóliton em Cadeias Não-Lineares Cúbicas

6.1 Introdução

Desde o surgimento do modelo de aproximação SSH (SU-SCHRIEFFER-HEEGER, 1979), em 1979, as aplicações desta técnica com o objetivo de estabelecer uma dinâmica temporal conjunta entre as vibrações da rede e o elétron tem se intensificado. Tendo início com os trabalhos realizados pelos próprios autores de (SU-SCHRIEFFER-HEEGER, 1979), estes trabalhos são direcionados a utilização do modelo SSH no estudo de polímeros conjugados para a produção de semicondutores e polímeros metálicos (HEEGER, 2001). Nesta mesma temática (polímeros conjugados), identificamos trabalhos que investem na possibilidade de que polímeros possam conduzir cargas (BREDAS *et al.*, 1985). Em um enfoque mais moderno, destacamos os materiais denominados como semicondutores orgânicos, podendo fornecer indícios do transporte de cargas (BÄSSLER *et al.*, 2011). Este trabalho usa o modelo de banda semicondutora Su-Schrieffer-Heeger, a fim de investigar processos óticos atreladas a regimes de transporte de cargas. No processo de interação elétron-rede, ocorre a formação do sóliton em sistemas poliméricos, e desta forma, o armazenamento de cargas na cadeia polimérica induz à relaxação estrutural, que por sua vez, localiza o elétron (carga). O exemplo mais simples do efeito deste relaxamento estrutural é o sóliton em cadeias *trans*-poliacetileno (HEEGER, 2001). Um fato interessante sobre os modelos de cadeias *trans*-poliacetileno é entender a dinâmica dos sólitons (SU *et al.*, 1980). Nesta abordagem, os autores consideram que as equações de movimento do sistema elétron-fônon acoplado sejam integradas em tempo real ao modelo de cadeias de *trans*-poliacetileno.

Um interesse particular nos modelos com acoplamento elétron-rede consiste na possibilidade do transporte de cargas devido a este acoplamento. Este tema é amplamente discutido nos trabalhos de (CANTU ROS *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2009; CHETVERIKOV *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2012; CHETVERIKOV *et al.*, 2013; de MOURA, 2013; EBELING *et al.*, 2013; HENNIG *et al.*, 2007; HENNIG *et al.*, 2006; HENNIG *et al.*, 2008;

SALES *et al.*, 2014; VELARDE, 2010; VELARDE *et al.*, 2005; VELARDE *et al.*, 2009; VELARDE *et al.*, 2012; VELARDE *et al.*, 2011; VELARDE *et al.*, 2008), onde os autores fazem várias abordagens com o objetivo de induzir o transporte elétrico por meio da formação do par elétron-sóliton, tal efeito é chamado na literatura científica de *self-trapping*. No fenômeno do auto-aprisionamento os modos intrínsecos da rede (sóliton) capturam o elétron, permitindo que o mesmo desenvolva mobilidade ao longo da rede. Nos trabalhos de Manoel Velarde e colaboradores, a interação elétron-rede tem como base o modelo de aproximação SSH (SU-SCHRIEFFER-HEEGER, 1979), sendo a rede construída através do potencial de Morse-Toda (MORSE, 1929; TODA, 1967; TODA, 1970; TODA, 1975; TODA, 1989). Em paralelo a estas investigações, destacamos as abordagens de Moura e colaboradores em torno da observação do par *elétron-sóliton* (de MOURA, 2013; SALES *et al.*, 2014). Vale ressaltar que estes estudos, além da modelagem do modelo SSH, utilizam uma rede com correções não-lineares cúbicas (BIVINS *et al.*, 1973; FERMI *et al.*, 1955). Diante destes conceitos, nos motivamos em resolver o seguinte problema: acoplar um sistema ferromagnético de Heisenberg ($S = 1/2$) a uma rede não-linear cúbica α -FPU segundo a modelagem não aproximada SSH. Ou seja, com o termo de interação de troca $J_{j,j+1}$ (NUNES *et al.*, 2016; WOODS, 2002) dependendo exponencialmente com as distâncias efetivas entre os sítios primeiros vizinho.

A construção do nosso modelo, portanto, faz a junção de uma rede não-linear cúbica 1- d com um sistema ferromagnético de Heisenberg através do modelo não aproximado SSH. A utilização de interações magnon-fônon tem sido estudada com o objetivo de atenuar o magnon, e para outras circunstâncias em atenuar o fônon (CHENG *et al.*, 2008; CHENG *et al.*, 2007; CHENG *et al.*, 2006; CHENG *et al.*, 2009; CHENG *et al.*, 2007; WOODS, 2002). Entre outras descobertas apontadas por estas investigações, destacamos a possibilidade de aumentar o amortecimento do magnon com o aumento de acoplamento magnon-fônon (CHENG *et al.*, 2009). De acordo com (KIRBY *et al.*, 2006), materiais como $Nd_{0.6}Sr_{0.4}MnO_3$ permitem investigar a dinâmica de *spins*, bem como, as interações magnon-fônon. As aplicações da interação magnon-fônon não se restringem a estudos teóricos. Identificamos na literatura científica um estudo experimental sobre a observação do espalhamento de um magnon em filmes finos de $BiFeO_3$ policristalino multiferroico a $90K$ utilizando espectroscopia Raman (KUMAR *et al.*, 2008). Neste trabalho, os autores identificaram que a intensidade espectral de um magnon transferido para o modo vibracional inferior próximo da temperatura de reorientação do *spin* sugere a presença do acoplamento magnon-fônon. Nosso estudo por sua vez, segue a modelagem de ondas de *spin* acopladas a uma rede não-linear cúbica unidimensional segundo o modelo não aproximado SSH. Na etapa seguinte, nós expomos e discutimos nossos principais resultados, e por fim, descrevemos os principais consensos obtidos através de nossos resultados.

6.2 Modelo SSH Aplicado à Ondas de *spin*

Consideramos uma rede unidimensional com ligações não lineares entre os sítios vizinhos, ou seja, uma rede de acordo com o modelo FPU (BIVINS *et al.*, 1973; FERMI *et al.*, 1955). Vamos estudar um sistema com potencial cúbico, similar ao utilizado nos trabalhos de (de MOURA, 2013; SALES *et al.*, 2014) com respeito a rede clássica, que representamos pela hamiltoniana:

$$\begin{aligned}
 H_{r.c.} = & \sum_{n=1}^N \frac{P_n^2}{2m_n} + \sum_{n=1}^N \left(\frac{1}{4} [\nu_n (r_{n+1} - r_n)^2 + \nu_{n-1} (r_n - r_{n-1})^2] \right. \\
 & \left. + \frac{\eta}{6} [(r_{n+1} - r_n)^3 + (r_n - r_{n-1})^3] \right), \quad (6.1)
 \end{aligned}$$

onde temos definido $H_{r.c.}$ como sendo a hamiltoniana da rede clássica. Neste cenário, pretendemos considerar as interações da rede com a dinâmica de um magnon (**ondas de *spin***) ao longo de uma rede não-linear cúbica. Deste modo, supomos que os elétrons da camada de valência estejam suficientemente localizados, de tal forma que possamos associar um *spin* a cada átomo, ou seja, vamos considerar uma cadeia não-linear com N íons. O Hamiltoniano que prevê a interação entre os *spins* destes íons é dado pela seguinte equação:

$$H_{spin} = - \sum_{kn} J_{kn} \vec{S}_k \cdot \vec{S}_n, \quad (6.2)$$

É comum chamarmos este hamiltoniano (H_{spin}) de hamiltoniano de Heisenberg, onde J_{kn} é a constante de troca (*exchange*), \vec{S}_k e \vec{S}_n são os operadores de *spin* que agem nos sítios k e n , respectivamente (NUNES *et al.*, 2016; WOODS, 2002).

Quando consideramos um material ferromagnético (todos *spins* alinhados paralelamente uns aos outros e constante de troca, conseqüentemente positiva) em seu estado fundamental, uma excitação em um de seus *spins* origina uma perturbação conjunta de todos os *spins* do sistema. Esta perturbação gera a chamada onda de *spins* ou *magnon*. De modo que um magnon é definido pela quantização da onda de *spins*.

Para dar sustentação ao fenômeno do ferromagnetismo, levamos em conta uma abordagem em que uma cadeia ferromagnética contenha N *spins* $\vec{S} = S_x \hat{x} + S_y \hat{y} + S_z \hat{z}$ no hamiltoniano 6.2. Por simplicidade, vamos considerar a existência de interações apenas entre os sítios vizinhos. Sabendo disso, o hamiltoniano 6.2 é escrito na forma

$$H_{spin} = - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} \vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1}. \quad (6.3)$$

Portanto, a Hamiltoniana total H para este problema será a adição da Hamiltoniana da

rede clássica $H_{r.c.}$ com o Hamiltoniano das ondas de *spin* H_{spin} , ou seja,

$$H = H_{r.c.} + H_{spin}. \quad (6.4)$$

Agora, vamos unir a nossa descrição com os operadores S_n^+ e S_n^- , que são definidos por

$$\begin{aligned} S_n^+ &= S_n^x + iS_n^y \\ S_n^- &= S_n^x - iS_n^y, \end{aligned} \quad (6.5)$$

bem como os operadores,

$$\begin{aligned} S_n^x &= \frac{1}{2}(S_n^+ + S_n^-) \\ S_n^y &= -\frac{i}{2}(S_n^+ - S_n^-), \end{aligned} \quad (6.6)$$

Além destes operadores, é importante destacar as relações de comutação dos operadores de *spin*,

$$\begin{aligned} [S_l^+, S_w^-] &= 2S_l^z \delta_{lw}, & [S_l^z, S_w^+] &= S_l^+ \delta_{lw}, & [S_l^z, S_w^-] &= -S_l^- \delta_{lw}, \\ [S_l^x, S_w^y] &= iS_l^z \delta_{lw}, & [S_l^+, S_w^+] &= [S_l^-, S_w^-] = 0. \end{aligned} \quad (6.7)$$

Uma vez dados as relações e operadores acima, podemos reformular a equação 6.3 na forma

$$H_{spin} = - \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} \left\{ S_n^z S_{n+1}^z + \frac{1}{2}(S_n^+ S_{n+1}^- + S_n^- S_{n+1}^+) \right\}. \quad (6.8)$$

Considerando que um único desvio de *spin* seja introduzido no sítio j da rede, de modo que possamos aplicar o operador S_j^- no estado fundamental, e ainda que o sistema esteja inicialmente no estado ferromagnético, é possível assumir, de acordo com os estados magnéticos excitados, o estado fundamental como um estado de vácuo $|\varphi_0\rangle$. Portanto, o estado excitado do *spin* no sítio j é dado por $|\varphi_j\rangle = S_j^- |\varphi_0\rangle$. Contudo, é fácil perceber que a ação da Hamiltoniana 6.4 no estado $|\varphi_j\rangle$ resulta apenas na ação do Hamiltoniano

de *spin* H_{spin} (Eq. 6.8), isto é,

$$\begin{aligned}
 H|\varphi_j\rangle = H_{spin}|\varphi_j\rangle &= -\sum_{n=1}^N J_{n,n+1} \left\{ S_n^z S_{n+1}^z + \frac{1}{2}(S_n^+ S_{n+1}^- + S_n^- S_{n+1}^+) \right\} |\varphi_j\rangle \\
 &= -\sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_n^z S_{n+1}^z |\varphi_j\rangle - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_n^+ S_{n+1}^- |\varphi_j\rangle \\
 &\quad - \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_n^- S_{n+1}^+ |\varphi_j\rangle.
 \end{aligned} \tag{6.9}$$

A ação dos operadores acima sobre o estado $|\varphi_j\rangle$ pode ser solvida com o auxílio das relações de comutação 6.7. Por simplicidade, vamos calcular as três somas acima de modo separado, começando com:

$$\mathbf{I)} \quad H_I = -\sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_n^z S_{n+1}^z |\varphi_j\rangle$$

Para resolver este termo, dividimos a soma nos intervalos de n $[1, j-2]$ e $[j+1, N]$, onde os termos $n = j-1$ e $n = j$ estão explícitos,

$$\begin{aligned}
 H_I &= -\sum_{n=1}^{j-2} J_{n,n+1} S_n^z S_{n+1}^z |\varphi_j\rangle - (J_{j-1,j} S_{j-1}^z S_j^z |\varphi_j\rangle) \\
 &\quad - (J_{j,j+1} S_j^z S_{j+1}^z |\varphi_j\rangle) - \sum_{n=j+1}^N J_{n,n+1} S_n^z S_{n+1}^z |\varphi_j\rangle.
 \end{aligned} \tag{6.10}$$

Ou ainda,

$$\begin{aligned}
 H_I &= -\sum_{n=1}^{j-2} J_{n,n+1} S^2 |\varphi_j\rangle - \sum_{n=j+1}^N J_{n,n+1} S^2 |\varphi_j\rangle \\
 &\quad - (J_{j-1,j} S_{j-1}^z S_j^z |\varphi_j\rangle) - (J_{j,j+1} S_j^z S_{j+1}^z |\varphi_j\rangle).
 \end{aligned} \tag{6.11}$$

Onde temos feito $S_n^z |\varphi_j\rangle = S |\varphi_j\rangle$ e $S_{n+1}^z |\varphi_j\rangle = S |\varphi_j\rangle$, visto que, a condição $n \neq j$ promove o valor máximo S na direção z . Agora, utilizamos as relações de comutação entre S_j^z e S_j^- , e o fato de que $|\varphi_j\rangle = S_j^- |\varphi_0\rangle$ para resolver o terceiro (T^3) e o quarto termo (T^4) da equação acima,

$$\begin{aligned}
 T^3 &= J_{j-1,j} S_{j-1}^z S_j^z |\varphi_j\rangle \\
 &= J_{j-1,j} S_{j-1}^z (S_j^z S_j^- |\varphi_0\rangle) \\
 &= J_{j-1,j} [(S_{j-1}^z (S_j^- S_j^z - S_j^- \delta_{j,j}) |\varphi_0\rangle)] \\
 &= J_{j-1,j} (S_{j-1}^z S_j^- S_j^z |\varphi_0\rangle - S_{j-1}^z S_j^- |\varphi_0\rangle) \\
 &= J_{j-1,j} (S_{j-1}^z S_j^- S |\varphi_0\rangle - S_{j-1}^z |\varphi_j\rangle) \\
 &= J_{j-1,j} (S S_{j-1}^z |\varphi_j\rangle - S |\varphi_j\rangle) \\
 &= J_{j-1,j} S^2 |\varphi_j\rangle - J_{j-1,j} S |\varphi_j\rangle,
 \end{aligned} \tag{6.12}$$

e o termo T^4 fica

$$\begin{aligned}
 T^4 &= J_{j,j+1} S_j^z S_{j+1}^z |\varphi_j\rangle \\
 &= J_{j,j+1} S_j^z (S_{j+1}^z S_j^-) |\varphi_0\rangle \\
 &= J_{j,j+1} (S_j^z S_{j+1}^z S_j^- - S_j^z S_j^- S_{j+1}^z + S_j^z S_j^- S_{j+1}^z) |\varphi_0\rangle \\
 &= J_{j,j+1} [S_j^z (S_{j+1}^z S_j^- - S_j^- S_{j+1}^z) + (S_j^z S_j^- - S_j^- S_j^z + S_j^- S_j^z) S_{j+1}^z] |\varphi_0\rangle \\
 &= J_{j,j+1} [-S_j^z S_{j+1}^- \delta_{j+1,j} - (S_j^- \delta_{j,j} - S_j^- S_j^z) S_{j+1}^z] |\varphi_0\rangle \\
 &= J_{j,j+1} [-S(S_j^- - S_j^z)] |\varphi_0\rangle \\
 &= J_{j,j+1} S^2 |\varphi_j\rangle - J_{j,j+1} S |\varphi_j\rangle
 \end{aligned} \tag{6.13}$$

Substituindo os termos T^3 e T^4 na Eq. 6.11, observamos que é possível compor a soma de $j = 1$ a $j = N$ do termo $J_{j,j+1}$, como observamos no termo entre colchetes abaixo:

$$H_I = -S^2 \left[\sum_{n=1}^{j-2} J_{n,n+1} + J_{j-1,j} + J_{j,j+1} + \sum_{n=j+1}^N J_{n,n+1} \right] |\varphi_j\rangle + S(J_{j-1,j} + J_{j,j+1}) |\varphi_j\rangle, \tag{6.14}$$

onde o segundo e terceiro termo entre colchetes representam os termos $n = j - 1$ e $n = j$ da soma, respectivamente. Daí, ao agruparmos os quatro primeiro termos da equação acima, chegamos em um resultado reduzido para H_I ,

$$H_I = -S^2 \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} |\varphi_j\rangle + S(J_{j-1,j} + J_{j,j+1}) |\varphi_j\rangle. \tag{6.15}$$

O termo $-S^2 \sum_{n=1}^N J_{n,n+1}$ corresponde à energia E_0 do estado fundamental $|\varphi_0\rangle$. Portanto, a primeira parte da Eq. 6.9 tem a forma final dada por

$$H_I = E_0 |\varphi_j\rangle + S(J_{j-1,j} + J_{j,j+1}) |\varphi_j\rangle. \tag{6.16}$$

Prosseguindo nosso estudo analítico sobre a ação do Hamiltoniano de *spin* sobre o estado $|\varphi_j\rangle$, iremos usar agora simplificar o segundo termo da equação 6.9:

$$\text{II) } H_{II} = -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_n^+ S_{n+1}^- |\varphi_j\rangle$$

De forma análoga a H_I , vamos supor que $|\varphi_j\rangle = S_j^- |\varphi_0\rangle$, daí

$$H_{II} = -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_n^+ S_{n+1}^- S_j^- |\varphi_0\rangle. \tag{6.17}$$

Somando um termo nulo $-S_{n+1}^- S_n^+ S_j^- + S_{n+1}^- S_n^+ S_j^-$ e utilizando a relação de comutação

$[S_l^+, S_w^-] = 2S_l^z \delta_{lw}$ chegamos em

$$\begin{aligned}
 H_{II} &= -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} \{S_n^+ S_{n+1}^- S_j^- - S_{n+1}^- S_n^+ S_j^- + S_{n+1}^- S_n^+ S_j^-\} |\varphi_0\rangle \\
 &= -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} \{(S_n^+ S_{n+1}^- - S_{n+1}^- S_n^+) S_n^- + S_{n+1}^- (2S_n^z \delta_{n,j} + S_j^- S_n^+)\} |\varphi_0\rangle \\
 &= -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} \{(2S_n^z \delta_{n,n+1} S_n^- + 2S_{n+1}^- S_n^z \delta_{n,j}) |\varphi_0\rangle + S_{n+1}^- S_j^- S_n^+ |\varphi_0\rangle\}. \quad (6.18)
 \end{aligned}$$

A ação do operador S_n^+ sobre o estado $|\varphi_0\rangle$ resulta em zero ($S_n^+ |\varphi_0\rangle = 0$), visto que, todos os *spins* estão na direção positiva. Sabemos também que $\delta_{n,n+1} = 0$ para todo n . Desta forma, a equação 6.18 toma a forma

$$\begin{aligned}
 H_{II} &= -\sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_{n+1}^- S_n^z \delta_{n,j} |\varphi_0\rangle \\
 &= -J_{j,j+1} S_{j+1}^- (S_j^z |\varphi_0\rangle) \\
 &= -J_{j,j+1} S_{j+1}^- (S |\varphi_0\rangle) \\
 &= -J_{j,j+1} S (S_{j+1}^- |\varphi_0\rangle) \\
 &= -J_{j,j+1} S |\varphi_{j+1}\rangle, \quad (6.19)
 \end{aligned}$$

onde temos utilizado as propriedades $S_j^z |\varphi_0\rangle = S |\varphi_0\rangle$ e $S_{j+1}^- |\varphi_0\rangle = |\varphi_{j+1}\rangle$.

Por fim, o terceiro termo da Eq. 6.9:

$$\text{III) } H_{III} = -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_n^- S_{n+1}^+ |\varphi_j\rangle.$$

De um modo análogo ao que vimos antes, $|\varphi_j\rangle = S_j^- |\varphi_0\rangle$, daí,

$$\begin{aligned}
 H_{III} &= -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_n^- S_{n+1}^+ S_j^- |\varphi_0\rangle \\
 &= -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} \{S_n^- S_{n+1}^+ S_j^- - S_n^- S_j^- S_{n+1}^+ + S_n^- S_j^- S_{n+1}^+\} |\varphi_0\rangle \\
 &= -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} \{S_n^- (S_{n+1}^+ S_j^- - S_j^- S_{n+1}^+) |\varphi_0\rangle + S_n^- S_j^- (S_{n+1}^+ |\varphi_0\rangle)\}, \quad (6.20)
 \end{aligned}$$

sabendo que $[S_{n+1}^+, S_j^-] = S_{n+1}^+ S_j^- - S_j^- S_{n+1}^+ = 2S_{n+1}^z \delta_{n+1,j}$ e $S_{n+1}^+ |\varphi_0\rangle = 0$ temos

$$\begin{aligned}
 H_{III} &= -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} \{S_n^- (2S_{n+1}^z \delta_{n+1,j}) |\varphi_0\rangle\} \\
 &= -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^N J_{n,n+1} \{2S_n^- S_{n+1}^z \delta_{n+1,j} |\varphi_0\rangle\} \\
 &= -\sum_{n=1}^N J_{n,n+1} S_n^- S_{n+1}^z \delta_{n+1,j} |\varphi_0\rangle \\
 &= -J_{j-1,j} S_{j-1}^- (S_j^z |\varphi_0\rangle) \\
 &= -J_{j-1,j} S (S_{j-1}^- |\varphi_0\rangle) \\
 &= -J_{j-1,j} S |\varphi_{j-1}\rangle,
 \end{aligned} \tag{6.21}$$

onde temos utilizados as propriedades: $S_{j-1}^- |\varphi_0\rangle = |\varphi_{j-1}\rangle$ e $S_j^z |\varphi_0\rangle = S |\varphi_0\rangle$.

Substituindo os resultados obtidos para H_I , H_{II} e H_{III} na Eq. 6.9, temos como resposta a ação da Hamiltoniana total H sobre o estado $|\varphi_j\rangle$

$$H|\varphi_j\rangle = E_0|\varphi_j\rangle + S \{(J_{j-1,j} + J_{j,j+1})|\varphi_j\rangle - J_{j,j+1}|\varphi_{j+1}\rangle - J_{j-1,j}|\varphi_{j-1}\rangle\}. \tag{6.22}$$

Onde temos definido E_0 como a energia do estado fundamental ($-\sum_{j=1}^N J_{j,j+1} S^2$). A equação 6.22 mostra que um desvio no sítio j não fica localizado em j , pelo contrário, ele se propaga pela cadeia através de seus vizinhos $j+1$ e $j-1$. Esta propagação indica a excitação coletiva do sistema, compondo portanto, a onda de *spin*. Outro fato importante, é que $|\varphi_j\rangle$ não corresponde a um estado de H_{spin} . Logo, para construirmos o estado desta configuração, definimos $|\Phi\rangle$ como o estado de um magnon, isto é,

$$|\Phi\rangle = A \sum_{j=1}^N \psi_j |\varphi_j\rangle, \tag{6.23}$$

onde A é uma constante e os números ψ_n representam as amplitudes de probabilidade de ocorrer um único desvio no sítio j .

A hamiltoniana total H (Eq. 6.4) para este problema representa um sistema acoplado, onde levaremos em conta as interações de um magnon com a rede, de modo que as interações magnon-rede devem ser uma aproximação do modelo SSH (SU-SCHRIEFFER-HEEGER, 1979) ($J_{j+1,j} \approx J_0[1 - \alpha(r_{j+1} - r_j)]$), que definimos por

$$J_{j+1,j} = J_{j,j+1} = e^{-\alpha(r_{j+1} - r_j)}, \tag{6.24}$$

porém, com uma adequação ao problema de ordenamento ferromagnético, onde fazemos a constante de troca ($J_{n+1,n}$) ser positiva, a constante α representa a intensidade de aco-

plamento entre o magnon e a rede. A tarefa seguinte consiste em desenvolver ferramentas que nos permitam identificar como o pacote de ondas de *spin* se propaga ao longo de nossa rede não-linear na presença de acoplamento magnon-fônon. Antes de identificar qual/quais medidas estaremos utilizando, vamos desenvolver as equações de dinâmica temporal do magnon. Para tanto, vamos inicialmente demonstrar que $|\Phi\rangle$ é autoestado de H usando a equação de Schrödinger:

$$H|\Phi\rangle = E|\Phi\rangle. \quad (6.25)$$

Daí, usando as equações 6.22, 6.23 e 6.25 teremos o seguinte resultado:

$$\begin{aligned} H|\Phi\rangle &= A \sum_{j=1}^N \psi_j(H|\varphi_j\rangle) \\ &= A \sum_{j=1}^N \left[E_0 + S(J_{j-1,j} + J_{j,j+1})\psi_j|\varphi_j\rangle \right. \\ &\quad \left. - SJ_{j,j+1}\psi_j|\varphi_{j+1}\rangle - SJ_{j-1,j}\psi_j|\varphi_{j-1}\rangle \right] \\ &= E|\Phi\rangle. \end{aligned} \quad (6.26)$$

Ou ainda,

$$\sum_{j=1}^N S \{ (J_{j-1,j} + J_{j,j+1})\psi_j|\varphi_j\rangle - J_{j,j+1}\psi_j|\varphi_{j+1}\rangle - J_{j-1,j}\psi_j|\varphi_{j-1}\rangle \} = \epsilon \sum_{j=1}^N \psi_j|\varphi_j\rangle, \quad (6.27)$$

onde temos feito $\epsilon = E - E_0$. Fazendo $j = l$ na equação acima ficamos com

$$\sum_{l=1}^N S \{ (J_{l-1,l} + J_{l,l+1})\psi_l|\varphi_l\rangle - J_{l,l+1}\psi_l|\varphi_{l+1}\rangle - J_{l-1,l}\psi_l|\varphi_{l-1}\rangle \} = \epsilon \sum_{l=1}^N \psi_l|\varphi_l\rangle, \quad (6.28)$$

e considerando que $S = 1/2$ (ferromagnetismo), multiplicamos pela esquerda toda a Eq. 6.28 pelo estado *bra* $\langle\varphi_j|$, de modo que teremos

$$\sum_{l=1}^N \frac{1}{2} \{ (J_{l-1,l} + J_{l,l+1})\psi_l\langle\varphi_j|\varphi_l\rangle - J_{l,l+1}\psi_l\langle\varphi_j|\varphi_{l+1}\rangle - J_{l-1,l}\psi_l\langle\varphi_j|\varphi_{l-1}\rangle \} = \epsilon \sum_{l=1}^N \psi_l\langle\varphi_j|\varphi_l\rangle, \quad (6.29)$$

se tivermos $\langle\varphi_j|\varphi_l\rangle = \delta_{j,l} = 1$ para $j = l$, então

$$\begin{aligned} \sum_{l=1}^N \frac{1}{2} \{ (J_{l-1,l} + J_{l,l+1})\psi_l\delta_{j,l} - J_{l,l+1}\psi_l\delta_{j,l+1} - J_{l-1,l}\psi_l\delta_{j,l-1} \} &= \epsilon \sum_{l=1}^N \psi_l\delta_{j,l}, \\ \frac{1}{2} \{ (J_{j-1,j} + J_{j,j+1})\psi_j - J_{j-1,j}\psi_{j-1} - J_{j,j+1}\psi_{j+1} \} &= \epsilon\psi_j \end{aligned} \quad (6.30)$$

Se fizermos $\epsilon \rightarrow i\hbar\frac{\partial}{\partial t}$, podemos finalmente encontrar a equação de Schrödinger para o nosso modelo em termos de ψ_j e com $\hbar = 1$:

$$i\frac{d\psi_j(t)}{dt} = (J_{j-1,j} + J_{j,j+1})\frac{\psi_j(t)}{2} - J_{j-1,j}\frac{\psi_{j-1}(t)}{2} - J_{j,j+1}\frac{\psi_{j+1}(t)}{2}. \quad (6.31)$$

A solução numérica da Eq. 6.31 deve ser capaz de descrever a evolução temporal do pacote de ondas de *spin* inicialmente localizado em um certo sítio j da cadeia. É comum em trabalhos sobre dinâmica eletrônica, considerar que o elétron esteja inicialmente localizado no sítio $N/2$, vamos supor o mesmo para o magnon. De um modo mais claro, o estado em $t = 0$ deve ser dado pela condição $|\Phi(t=0)\rangle = \sum_j \psi_j(t=0)|j\rangle$, $\psi_j(t=0) = \delta_{j,N/2}$. A Eq. 6.31 pode ser reescrita ainda em termos da Eq. 6.24, de onde obtemos

$$\begin{aligned} i\frac{d\psi_j(t)}{dt} &= \frac{1}{2} \left[\left(e^{-\alpha(r_j - r_{j-1})} + e^{-\alpha(r_{j+1} - r_j)} \right) \psi_j(t) \right. \\ &\quad \left. - e^{-\alpha(r_j - r_{j-1})} \psi_{j-1}(t) - e^{-\alpha(r_{j+1} - r_j)} \psi_{j+1}(t) \right]. \end{aligned} \quad (6.32)$$

Agora que sabemos a equação de dinâmica do magnon, vamos determinar a equação de dinâmica da rede, visto que, temos um sistema acoplado. De modo que, as informações do magnon só podem ser determinadas se soubermos as informações da dinâmica temporal da rede, e vice-versa. A equação da rede será determinada por meio da equação de Hamilton $\dot{P}_j(t) = \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial r_j(t)}$. E assim, surge o primeiro problema nesta nova tarefa, que consiste em saber qual é a forma do termo $\langle H \rangle = \langle \Phi'(t) | H | \Phi(t) \rangle$. Vamos nos limitar a utilizar apenas o Hamiltoniano de *spin* (H_{spin}), a fim de simplificar a análise a seguir. Daí, iremos calcular portanto $\langle \Phi'(t) | H_{spin} | \Phi(t) \rangle = \langle H_{spin} \rangle$. Inicialmente, temos que considerar o estado *bra* conjugado da Eq. 6.23 e fazer um “sanduíche” com a Eq. 6.26, ou seja,

$$\begin{aligned} \langle H_{spin} \rangle &= |A|^2 \sum_j \sum_l \left[(E_0 + S(J_{j-1,j} + J_{j,j+1})) \psi_l^* \psi_j \langle \varphi_l | \varphi_j \rangle \right. \\ &\quad \left. - S J_{j,j+1} \psi_l^* \psi_j \langle \varphi_l | \varphi_{j+1} \rangle - S J_{j-1,j} \psi_l^* \psi_j \langle \varphi_l | \varphi_{j-1} \rangle \right] \\ &= \sum_j \sum_l \left[(E_0 + S(J_{j-1,j} + J_{j,j+1})) \psi_l^* \psi_j \delta_{l,j} \right. \\ &\quad \left. - S J_{j,j+1} \psi_l^* \psi_j \delta_{l,j+1} - S J_{j-1,j} \psi_l^* \psi_j \delta_{l,j-1} \right] \\ &= \sum_j \left[(E_0 + S(J_{j-1,j} + J_{j,j+1})) \psi_j^* \psi_j \right. \\ &\quad \left. - S J_{j,j+1} \psi_{j+1}^* \psi_j - S J_{j-1,j} \psi_{j-1}^* \psi_j \right]. \end{aligned} \quad (6.33)$$

Onde usamos $|A|^2 = 1$ (função de onda normalizada) e nos fazemos do fato de que a parte

clássica de H não tem ação sobre o estado $|\Phi(t)\rangle$. Se utilizarmos a nossa definição para $J_{j,j+1}$ e $J_{j-1,j}$ (Eq. 6.24), podemos reescrever a equação acima na forma

$$\begin{aligned} \langle H_{spin} \rangle &= \sum_j \left[E_0 \psi_j^* \psi_j + S \left(e^{-\alpha(r_j - r_{j-1})} + e^{-\alpha(r_{j+1} - r_j)} \right) \psi_j^* \psi_j \right. \\ &\quad \left. - S e^{-\alpha(r_{j+1} - r_j)} \psi_{j+1}^* \psi_j - S e^{-\alpha(r_j - r_{j-1})} \psi_{j-1}^* \psi_j \right]. \end{aligned} \quad (6.34)$$

Como sequência, vamos calcular a derivada $\frac{\partial \langle H_{spin} \rangle}{\partial r_j}$, dada por

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle H_{spin} \rangle}{\partial r_j} &= \frac{\partial}{\partial r_j} \left[E_0 \psi_j^* \psi_j + S e^{-\alpha(r_j - r_{j-1})} (\psi_j^* \psi_j + \psi_{j-1}^* \psi_{j-1}) \right. \\ &\quad + S e^{-\alpha(r_{j+1} - r_j)} (\psi_j^* \psi_j + \psi_{j+1}^* \psi_{j+1}) \\ &\quad - S e^{-\alpha(r_{j+1} - r_j)} (\psi_{j+1}^* \psi_j + \psi_j^* \psi_{j+1}) \\ &\quad \left. - S e^{-\alpha(r_j - r_{j-1})} (\psi_{j-1}^* \psi_j + \psi_j^* \psi_{j-1}) \right]. \end{aligned} \quad (6.35)$$

Sabendo que $\frac{\partial}{\partial r_j} e^{-\alpha(r_j - r_{j-1})} = -\alpha e^{-\alpha(r_j - r_{j-1})}$ e $\frac{\partial}{\partial r_j} e^{-\alpha(r_{j+1} - r_j)} = \alpha e^{-\alpha(r_{j+1} - r_j)}$, obtemos o seguinte resultado:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle H_{spin} \rangle}{\partial r_j} &= -\alpha S e^{-\alpha(r_j - r_{j-1})} (\psi_j^* \psi_j + \psi_{j-1}^* \psi_{j-1}) \\ &\quad + \alpha S e^{-\alpha(r_{j+1} - r_j)} (\psi_j^* \psi_j + \psi_{j+1}^* \psi_{j+1}) \\ &\quad - \alpha S e^{-\alpha(r_{j+1} - r_j)} (\psi_{j+1}^* \psi_j + \psi_j^* \psi_{j+1}) \\ &\quad + \alpha S e^{-\alpha(r_j - r_{j-1})} (\psi_{j-1}^* \psi_j + \psi_j^* \psi_{j-1}) \Big]. \end{aligned} \quad (6.36)$$

Portanto, se adicionarmos a Hamiltoniana da rede clássica $H_{r.c}$ a nossos cálculos com a equação da rede não-linear cúbica,

$$\begin{aligned} \frac{d^2 r_j}{dt^2} &= (r_{j+1} + r_{j-1} - 2r_j) + \eta \left[(r_{j+1} - r_j)^2 - (r_j - r_{j-1})^2 \right] \\ &\quad + \frac{\alpha}{2} \left[e^{-\alpha(r_j - r_{j-1})} (\psi_j^* \psi_j + \psi_{j-1}^* \psi_{j-1}) - e^{-\alpha(r_{j+1} - r_j)} (\psi_j^* \psi_j + \psi_{j+1}^* \psi_{j+1}) \right. \\ &\quad \left. + e^{-\alpha(r_{j+1} - r_j)} (\psi_{j+1}^* \psi_j + \psi_j^* \psi_{j+1}) - e^{-\alpha(r_j - r_{j-1})} (\psi_{j-1}^* \psi_j + \psi_j^* \psi_{j-1}) \right]. \end{aligned} \quad (6.37)$$

onde temos feito $S = \frac{1}{2}$ e $\nu_j = \nu = m_j = m = 1$.

A solução numérica das equações 6.32 e 6.37 deve ser feita através de uma estrutura conjunta dos métodos de expansão de Taylor de alta ordem e um procedimento de Euler. Esses métodos são detalhados na referência (SALES *et al.*, 2014). Nossas medidas devem ser realizadas através do número de participação $\xi(t)$ (de MOURA, 2013; SALES *et al.*,

2014, 2014; SANTOS *et al.*, 2006), da Entropia de Shannon $S(t)$ (SANTOS *et al.*, 2006) e da posição média do pacote de ondas de *spin* $\langle n \rangle(t)$, dadas por

$$\xi(t) = \frac{1}{\sum_j |c_j(t)|^4}, \quad (6.38)$$

$$S(t) = - \sum_j |\psi_j(t)|^2 \ln(|\psi_j(t)|^2), \quad (6.39)$$

e

$$\langle n \rangle(t) = \sum_j (j - j_0) |\psi_j(t)|^2. \quad (6.40)$$

Devemos perceber que $S(t) \rightarrow 0$ identifica uma função de onda confinada em um único sítio, e $S(t) \rightarrow \ln(N)$ quando a onda é uniformemente estendida sobre toda a cadeia (NAZARENO *et al.*, 1999; SANTOS *et al.*, 2006; SHANNON, 1949). Com respeito ao número de participação, tem-se uma ideia do número de estados sobre os quais o pacote de ondas é espalhado no tempo t . Em uma definição mais específica, quando o pacote de ondas fica restrito a um único sítio, a função de onda é caracterizada como localizada. Por outro lado, se $\xi \propto N$ teremos um pacote de ondas uniformemente distribuído sobre a rede (de MOURA, 2013; SALES *et al.*, 2014, 2014; SANTOS *et al.*, 2006; WEGNER, 1980). Fazendo uso dessas medidas, podemos investigar os possíveis efeitos dos parâmetros de acoplamento sobre a dinâmica do pacote de ondas de *spin*.

6.3 Resultados

Em nossos resultados temos utilizado um procedimento conjunto do método de expansão de Taylor de alta ordem e um procedimento de Euler de segunda ordem. De acordo com o Cap. 3, a equação de dinâmica do magnon (Eq. 6.31) pode ser solvida através de um método de alta ordem baseado na expansão de Taylor do operador evolução temporal $U(\Delta t) = \exp(-iH_{spin}\Delta t) = 1 + \sum_{l=1}^{L_0} \frac{(-iH_{spin}\Delta t)^l}{l!}$ (de MOURA, 2011), onde H_{spin} representa a Hamiltoniano do magnon. Este método consiste em ter a função de onda inicialmente no tempo Δt ($|\Phi(\Delta t)\rangle = U(\Delta t)|\Phi(0)\rangle$), e como sequência, fazer a aplicação recursivamente até encontrar a função de onda no tempo t ($|\Phi(t)\rangle$). A precisão foi controlada pelos parâmetros L_0 e Δt , os quais usamos como $L_0 = 10$ e $\Delta t = 2 \times 10^{-3}$. Esta codificação foi suficiente para manter a norma da função de ondas de *spins* em $|1 - \sum_n |\psi_j(t)|^2| < 10^{-11}$, que obtemos através de uma checagem contínua em cada passo Δt para toda a escala de tempo estudada. Com respeito, a equação da rede 6.37, seguimos novamente o procedimento descrito no Cap. 3. Neste caso, a equação da rede foi resolvida usando um método de Euler padrão de ordem 2 para obter uma solução inicial para posição no instante $t + \Delta t$,

a qual rotulamos por $r_j(t+\Delta t)^*$ (HAIRER *et al.*, 2008), isto é, $r_j(t+\Delta t)^* \approx r_j(t) + \Delta t \left. \frac{dr_j(t)}{dt} \right|_t$. Na sequência, aplicamos uma fórmula que tem o papel de corrigir essa previsão inicial, e portanto, obtemos uma aproximação corrigida para $r_j(t+\Delta t)$. As equações da rede foram resolvidas considerando um impulso de energia inicial completamente localizado no centro ($j_0 = N/2$) da cadeia auto-expandida, isto é, $r_j(t=0) = 0$ e $\dot{r}_j(t=0) = \delta_{j,j_0}$, bem como, fizemos que a onda de *spin* estivesse inicialmente localizada no centro de nossa cadeia auto-expandida $\psi_j(t=0) = \delta_{j,j_0}$. A utilização de uma cadeia auto-expandida se justifica pelo fato que é necessário evitar o choque do pacote de ondas de *spin* com as bordas de nossa cadeia finita, visto que, os efeitos de borda ocasionam eventuais divergências nos resultados. O procedimento de auto-expandir a cadeia foi feito seguindo a seguinte regra: quando a probabilidade de encontrar o magnon nas extremidades da rede superar 10^{-20} , quinze novos sítios são adicionados em cada extremidade da mesma. Nos cálculos para tempo longo ($t_{max} = 2 \times 10^4$), esta regra foi suficiente para evitar que o pacote de ondas de *spin* atingisse as bordas.

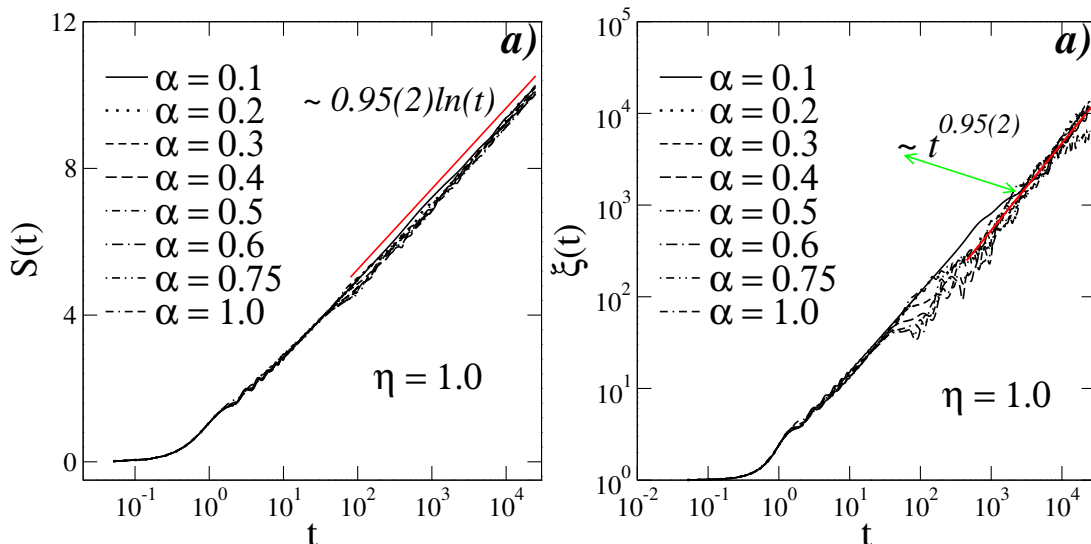
O aprisionamento de um elétron por um estado solitônico tem sido amplamente estudado pelos físicos da matéria condensada (CANTU ROS *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2009; CHETVERIKOV *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2012; CHETVERIKOV *et al.*, 2013; de MOURA, 2013; EBELING *et al.*, 2013; HENNIG *et al.*, 2007; HENNIG *et al.*, 2006; HENNIG *et al.*, 2008; SALES *et al.*, 2014; VELARDE, 2010; VELARDE *et al.*, 2005; VELARDE *et al.*, 2009; VELARDE *et al.*, 2012; VELARDE *et al.*, 2011; VELARDE *et al.*, 2008). Estes estudos numérico-analíticos tem como principal objetivo, investigar a dinâmica eletrônica na presença de acoplamento elétron-rede segundo a aproximação do modelo SSH (SUSCHRIEFFER-HEEGER, 1979). Além do fato de utilizarem a interação elétron-rede em seus modelos, estes trabalhos se assemelham por levarem em conta redes não-lineares. Ou seja, redes baseadas no potencial Morse-Toda (MORSE, 1929; TODA, 1967; TODA, 1970; TODA, 1975; TODA, 1989), e as redes com correções não-lineares cúbicas e quárticas (modelos α -FPU e β -FPU (FERMI *et al.*, 1955), respectivamente). Nossa análise prevê a visualização de um possível aprisionamento do magnon por parte da onda solitônica, bem como, a percepção do comportamento dinâmico do pacote de ondas de *spin*. Devemos considerar uma rede não-linear tipo α -FPU (FERMI *et al.*, 1955), bem como, foi feito por (de MOURA, 2013; SALES *et al.*, 2014).

De acordo com (WOODS, 2002), a constante de interação de troca ou simplesmente constante de troca $J_{j,j+1}$, definida em nosso trabalho pela Eq. 6.24, é proporcional à integral de *hopping* $t_{j,j+1}$. Isso é argumentado pelo fato de que seja possível assumir que existem momentos magnéticos “efetivos” localizados nos sítios $j, j+1$, acoplados por uma interação de Heisenberg ferromagnética. Uma modelagem semelhante foi realizada por Cheng *et al.*, onde é investigado a influência do acoplamento magnon-fônon sobre a dispersão do magnon em sistemas ferromagnéticos de Heisenberg bidimensionais (CHENG *et*

al., 2008; KIRBY *et al.*, 2006). Bem como, os efeitos da interação magnon-fônon sobre fônons amortecidos (CHENG *et al.*, 2007) e sobre magnons amortecidos (CHENG *et al.*, 2006; CHENG *et al.*, 2009) de sistemas ferromagnéticos de Heisenberg bidimensionais em temperatura finita. Além ainda de efeitos sobre excitações fônicas acústicas transversas em temperatura finita (CHENG *et al.*, 2007). Em nosso trabalho, iremos estudar a reação das ondas de *spin* (magnon) de um sistema ferromagnético de Heisenberg ao serem acopladas com uma rede não-linear cúbica seguindo o modelo SSH não aproximado ($J_{j,j+1} = \exp[-\alpha(r_{j+1} - r_j)]$).

Ao contrário do Cap. 4, temos aqui a possibilidade de investigar uma maior escala de valores da intensidade de acoplamento α . Desta forma, mostramos na Fig. 6.1, resultados em torno da dinâmica do pacote de ondas de *spin* para $\alpha = 0.1, 0.20, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.75, 1.00$ e não-linearidade cúbica $\eta = 1$. A Fig. 6.1 expõe o comportamento temporal da entropia de informação de Shannon $S(t)$ (6.1(a)) e do número de participação $\xi(t)$ (6.1(b)). Os resultados sugerem um comportamento super-difusivo ($S(t) \propto 0.95(2) \ln(t)$ e $\xi(t) \propto t^{0.95(2)}$). Neste regime de difusividade, o pacote de ondas fica não-uniformemente distribuído sobre a cadeia (SANTOS *et al.*, 2006). Ou seja, a função de ondas de *spin* se espalha pela maior parte da cadeia auto-expandida, deixando um pequeno percentual da rede sem ser visitada pelo magnon. Este resultado entra em desacordo com o comportamento sub-difusivo observado por (de MOURA, 2013) para um sistema com fraca interação elétron-rede ($\alpha = 1.0$). Vale ressaltar que este estudo leva em conta uma rede não-linear cúbica, tal qual foi investigada neste trabalho. Bem como, a interação elétron-rede cai exponencialmente com as distâncias efetivas entre os sítios vizinhos mais próximos. Uma

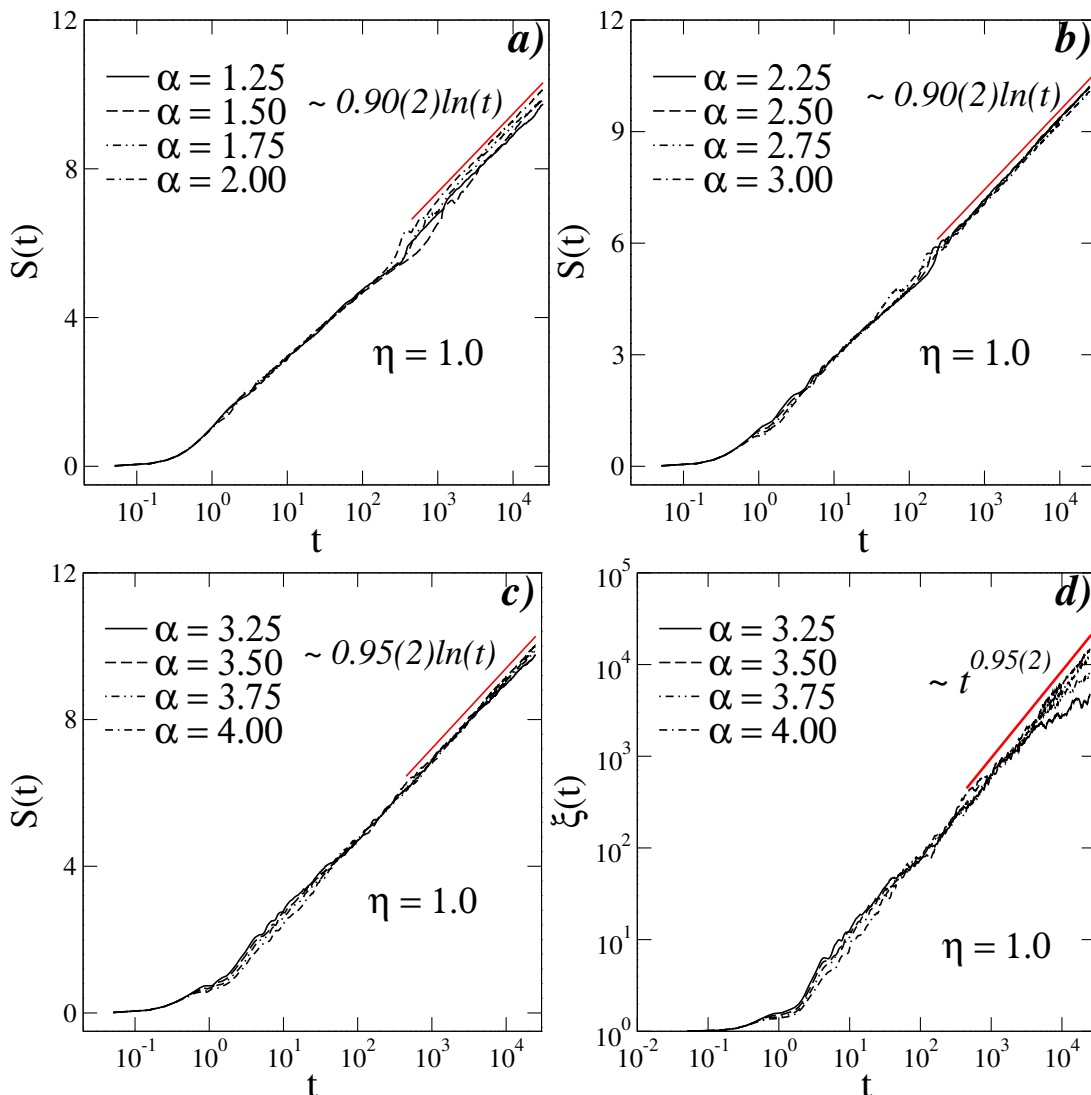
FIGURA 6.1 – Medidas numéricas da entropia de Shannon $S(t)$ (painel (a)), e do número de participação $\xi(t)$ (painel (b)) para intensidade de acoplamento $\alpha = 0.1, 0.20, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.75, 1.00$, e não-linearidade cúbica $\eta = 1.0$. Os resultados indicam um comportamento super-difusivo por ambas as medidas para os níveis de acoplamento estudados.



comparação direta com o modelo investigado por (de MOURA, 2013) pode ser feita desde que saibamos que o modelo em questão leva em conta uma distribuição de constantes de mola β desordenada na presença de correlações de longo-alcance. Ainda que neste caso, aborda-se a dinâmica eletrônica, e aqui estamos investigando a dinâmica do magnon. Em um olhar mais aprofundado sobre a ref. (de MOURA, 2013), notamos que em um certo valor da intensidade de correlação $\gamma = 1.0$, o regime super-difusivo observado na Fig. 6.1 para $\alpha \leq 1.0$ possui boa correspondência, isto é, em certas circunstâncias nossos resultados corroboram com o trabalho de (de MOURA, 2013).

Acima de $\alpha > 1.0$, podemos observar na Fig. 6.2 para $1.0 < \alpha \leq 4.0$, que o re-

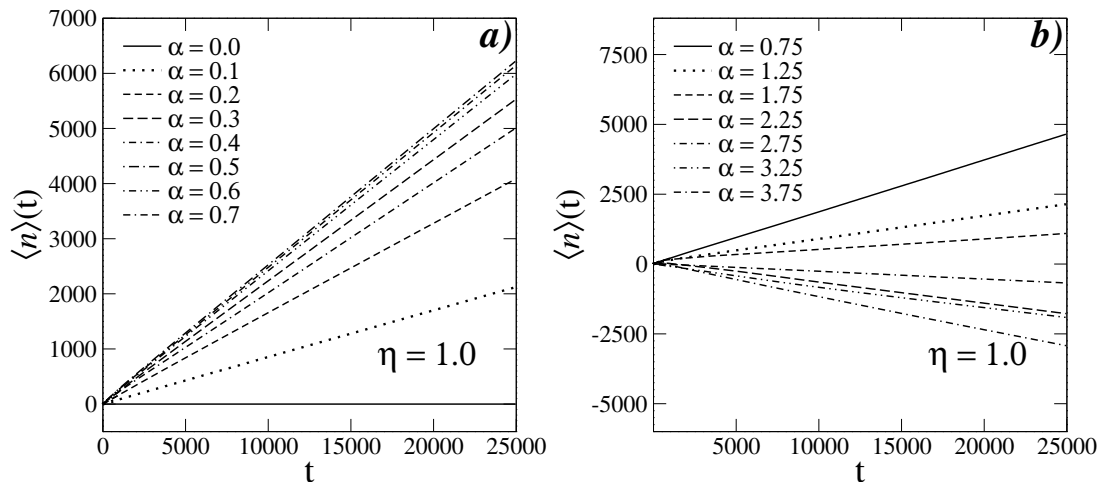
FIGURA 6.2 – Medidas numéricas da entropia de Shannon $S(t)$ (a), (b), (c)), e do número de participação $\xi(t)$ ((d)) para intensidade de acoplamento $\alpha = 1.25, 1.50, 1.75, 2.00$ (painel (a)); $\alpha = 2.25, 2.50, 2.75, 3.00$ (painel (b)); e $\alpha = 3.25, 3.50, 3.75, 4.00$ (painel (c) e (d)), com não-linearidade cúbica $\eta = 1.0$. Os resultados indicam um comportamento super-difusivo em todos os valores da intensidade de acoplamento estudados.



gime super-difusivo é mantido. Porém, existem algumas especificidades que devem ser postas em discussão: Nas Figs. 6.2(a) e 6.2(b) para $\alpha = 1.25, 1.50, 1.75, 2.00$ e $\alpha = 2.25, 2.50, 2.75, 3.00$, respectivamente. Observamos que $S(t) \propto 0.90(2) \ln(t)$, indicando um comportamento de dinâmica temporal inferior ao observado para $0 < \alpha \leq 1.0$, mas ainda assim caracteriza o regime super-difusivo. Este comportamento de dinâmica temporal corrobora com os resultados apontados por (de MOURA, 2013) para fortes níveis de acoplamento elétron-rede. Ao aumentarmos a intensidade de acoplamento magnon-rede α ($3.00 < \alpha \leq 4.0$, ver Figs. 6.2(c) e 6.2(d)), a propagação das ondas de *spin* se assemelha ao regime observado na Fig. 6.1. Ou seja, recobramos as funções de escala $S(t) \propto 0.95(2) \ln(t)$ e $\xi(t) \propto t^{0.95(2)}$.

Apresentamos na Fig. 6.3, a posição média do pacote de ondas de *spin* $\langle n \rangle(t)$ para fraca intensidade de acoplamento magnon-fônon 6.3(a), isto é, $\alpha = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7$. E para fortes níveis de acoplamento α ($\alpha = 0.75, 1.25, 1.75, 2.25, 2.75, 3.25, 3.75$) como vemos em 6.3(b). De um modo geral, os casos estudados sugerem alguma mobilidade do magnon ao longo da rede. Atribuímos esta mobilidade a um possível aprisionamento do magnon por parte dos modos solitônicos. Onde de acordo com (de MOURA, 2013; SALES *et al.*, 2014) ocorre a formação do par *elétron-sóliton*. Sendo comumente atribuído ao aprisionamento do elétron por uma onda solitônica levando à mobilidade deste ao longo da cadeia. Para o caso de ondas de *spin*, vamos chamar de par *magnon-sóliton*. Desta forma, os nossos resultados em 6.3(a) mostram que a mobilidade do magnon ao longo da rede aumenta à medida que crescemos o valor de α . Porém, para valores maiores que

FIGURA 6.3 – Posição média do pacote de ondas de *spin* $\langle n \rangle(t)$ para fraca intensidade de acoplamento magnon-fônon (a), isto é, $\alpha = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7$. E para fortes níveis de acoplamento α ($\alpha = 0.75, 1.25, 1.75, 2.25, 2.75, 3.25, 3.75$) como vemos no painel (b). De um modo geral, os casos estudados sugerem alguma mobilidade do magnon ao longo da rede. Atribuímos esta mobilidade a um possível aprisionamento do magnon por parte dos modos solitônicos.



Fonte: Autor, 2016.

$\alpha \approx 0.6$, o pacote de ondas de *spin* começa ter menos mobilidade ao longo da rede (ver Fig 6.3(b)). Isso ocorre até $\alpha \approx 2.0$, a partir deste valor o pacote de ondas parece mostrar mobilidade contrária ao que tínhamos observado para $\alpha < 2.00$. E por fim, notamos em 6.3(b), que entre $\alpha = 3.00$ e 4.00 , o magnon tende a diminuir novamente a mobilidade do magnon à medida que crescemos o valor de α .

Buscando entender a aparente mobilidade do pacote de ondas de *spin* para as circunstâncias mostradas em 6.3, investigamos na Fig. 6.4, a densidade de probabilidade da função de ondas de *spin* $|\psi_j(t)|^2$ versus tempo t versus posição dos sítios j com acoplamento: a) ($\alpha = 0.1$), b) ($\alpha = 0.2$), c) ($\alpha = 0.3$), d) ($\alpha = 0.4$), e) ($\alpha = 0.5$), f) ($\alpha = 0.6$), $N = 3000$, $t_{max} = 800$ e constante de não-linearidade cúbica $\eta = 1$. Os resultados indicam a formação de um par magnon-sóliton. A escala de tempo investigada é pequena $t = 800$, portanto, não podemos ratificar o aumento de mobilidade do magnon que observamos em 6.3(a) para $\alpha \leq 0.6$, mas podemos reiterar a presença do par magnon-sóliton neste limite. A mobilidade do magnon observada nestes casos, em especial para valores $\alpha > 0.3$, assemelha-se aos resultados encontrados por (de MOURA, 2013; SALES *et al.*, 2014) em redes não-lineares com interações elétron-rede. É possível verificar se a onda solitônica segue a mesma direção e caminho que o magnon. Para tanto, realizamos em 6.5, a medida da energia local da rede h_j no sítio j para $\alpha = 0.2, 0.4, 0.6$, e $\eta = 1.0$. Os resultados indicam que à medida que aumentamos o valor de α , a onda solitônica toma uma única direção. Ao passo que aprisiona o pacote de ondas de *spin*. Existe um fato importante no par

FIGURA 6.4 – Densidade de probabilidade da função de onda de *spin* $|\psi_j(t)|^2$ versus tempo t versus posição dos sítios j com acoplamento: a) ($\alpha = 0.1$), b) ($\alpha = 0.2$), c) ($\alpha = 0.3$), d) ($\alpha = 0.4$), e) ($\alpha = 0.5$), f) ($\alpha = 0.6$), $N = 3000$, $t_{max} = 800$ e constante de não-linearidade cúbica $\eta = 1$. Os resultados indicam a formação de um par magnon-sóliton. Mesmo para o tempo $t = 800$, nós podemos ratificar o aumento de mobilidade do magnon observado em 6.3(a) para $\alpha \leq 0.6$.

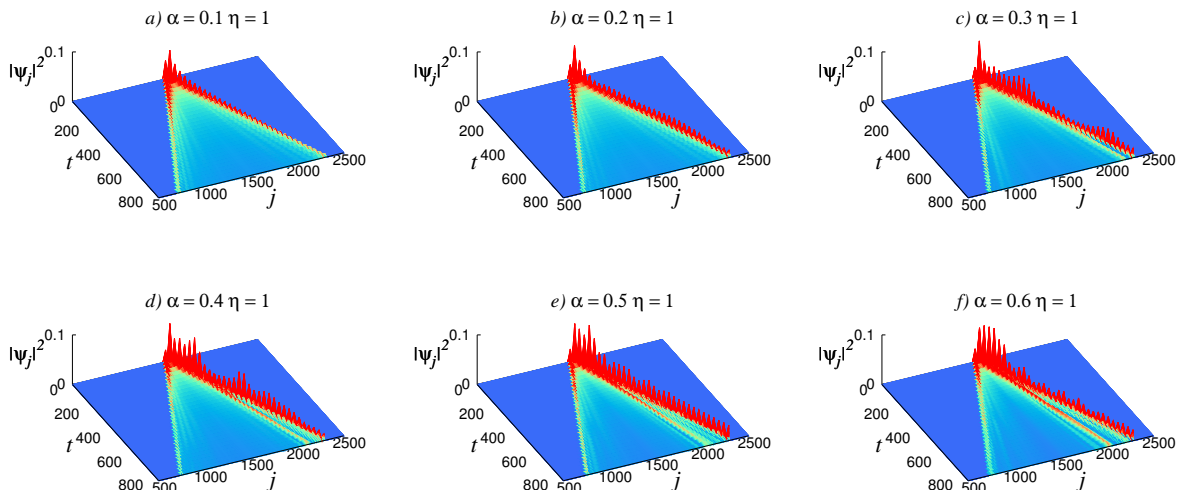
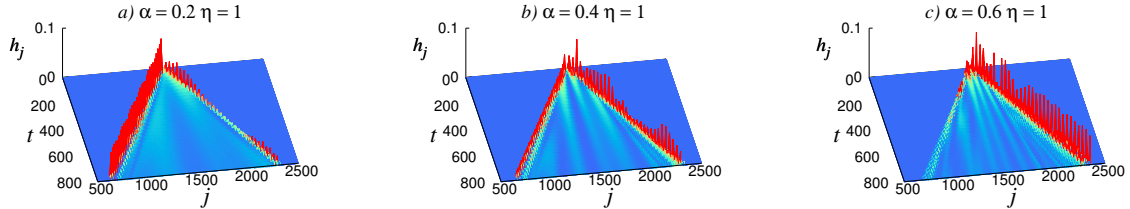


FIGURA 6.5 – Medidas da energia local da rede h_j no sítio j para $\alpha = 0.2, 0.4, 0.6$, e $\eta = 1.0$. Os resultados indicam que à medida que aumentamos o valor de α , a onda solitônica toma uma única direção, ao passo que aprisiona o pacote de ondas de *spin*.



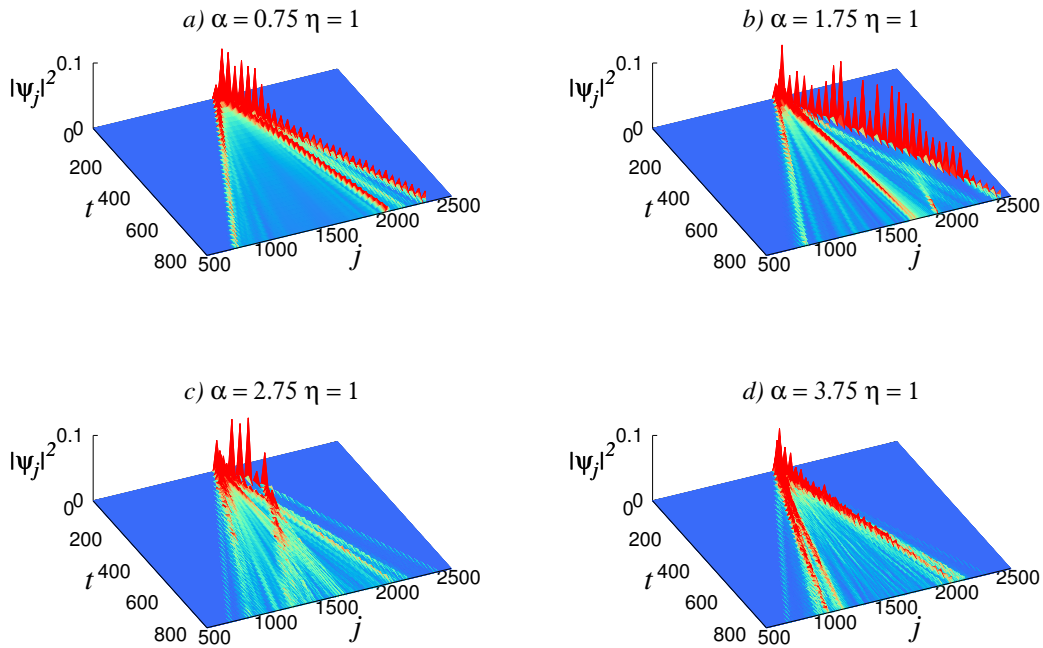
Fonte: Autor, 2016.

magnon-sóliton encontrado em 6.4, que merece uma ressalva; observamos na Fig. 6.1 que a maior parte dos sítios na rede são visitados pelo pacote de ondas de *spin*, implicando em uma incerteza de identificar a posição do magnon. Mas a partir da medida feita em 6.3(a), conseguimos estimar esta posição. Esta medida indica a posição da maioria do pacote de ondas de *spin* (ver Figs. 6.4). O restante do pacote de ondas se espalha ao longo da rede, sendo responsável pelos resultados das Figs. 6.1 e 6.2. Uma outra questão é, o que ocorre com o pacote de ondas de *spin* para $\alpha > 0.6$?

Em resposta ao problema pré-enunciado, percebemos que ocorre algo inusitado para níveis mais altos de acoplamento magnon-fônon. Esperávamos que o pacote de ondas de *spin* estivesse de acordo com a Fig. 6.3(b). Porém, não é o que observamos, de acordo com a Fig. 6.6 ($0.6 < \alpha < 4.0$) o pacote de ondas de *spin* tende a se desprender da onda solitônica (ver Fig 6.7) ao longo do tempo. Este resultado, é apenas uma evidência particular de nosso modelo. Mesmo sendo uma evidência incipiente, é importante notar que este resultado tem boa concordância com os resultados mostrados em 6.3(b), e nas Figs. 6.7 para o cálculo da energia local h_j para forte acoplamento ($0.6 < \alpha < 4.0$), isto é, para $2.0 < \alpha < 3.0$. A partir de um certo instante, a $\langle n \rangle(t)$ passa a se deslocar na direção à esquerda onde o magnon é solto na rede ($j = N/2$). Para níveis ainda mais altos de acoplamento magnon-fônon ($3.0 < \alpha < 4.0$) surge algo ainda mais interessante, a posição média do pacote de ondas de *spin* (ver Fig. 6.3(b)) evidencia menor mobilidade do magnon. Porém, aparentemente esta mobilidade tem pouca ou nenhuma relação com os modos solitônicos de nossa rede não-linear cúbica. Diante destas observações, podemos estabelecer duas afirmativas sobre a formação do par magnon-sóliton em sistemas ferromagnéticos ($S = 1/2$) com interações magnon-fônon em cadeias não-lineares cúbicas: 1) a formação do par magnon-sóliton é suprimida para tempo longo e intensidade de acoplamento $0.6 < \alpha \lesssim 3.0$; 2) o magnon é aparentemente desacoplado das ondas solitônicas para $3.0 < \alpha < 4.0$.

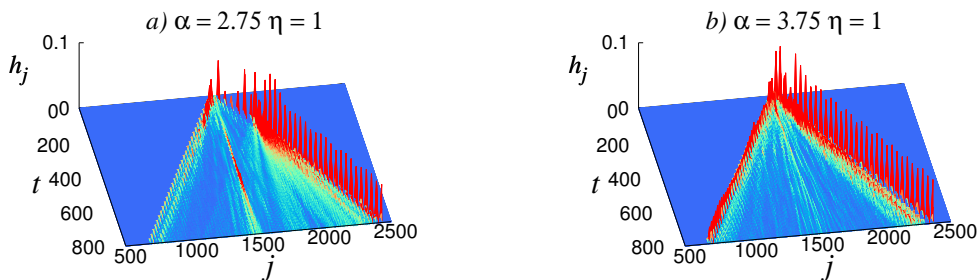
Nas circunstâncias elaboradas na modelagem de (CHENG *et al.*, 2008; CHENG *et al.*, 2007; CHENG *et al.*, 2006; CHENG *et al.*, 2009; CHENG *et al.*, 2007; KIRBY *et al.*, 2006; WOODS, 2002), discuti-se a possibilidade de que a interação magnon-fônon colocada através da

FIGURA 6.6 – Densidade de probabilidade da função de ondas de *spin* $|\psi_j(t)|^2$ versus tempo t versus posição dos sítios j com acoplamento: a) ($\alpha = 0.75$), b) ($\alpha = 1.75$), c) ($\alpha = 2.75$), d) ($\alpha = 3.75$), $N = 3000$, $t = 800$, e constante de não-linearidade cúbica $\eta = 1$. Nossos resultados mostram que o aumento de α ($\alpha > 0.6$) omite a formação do par magnon-sóliton para tempo longo. Além disso, entre $\alpha \approx 3.0$ e $\alpha = 4.0$, o pacote de ondas de *spin* parece contrair o grau de mobilidade ao longo da rede, corroborando com 6.3(b).



Fonte: Autor, 2016.

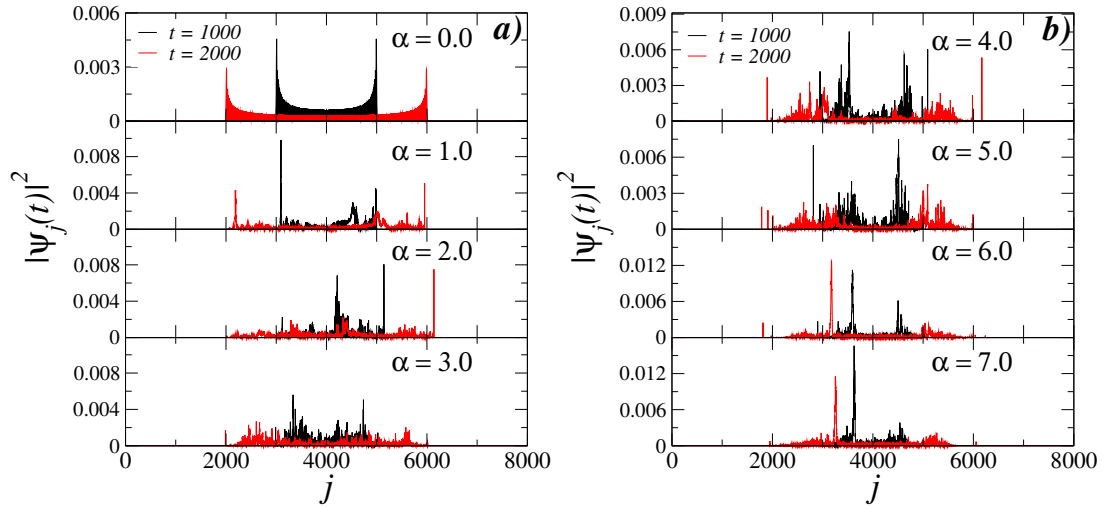
FIGURA 6.7 – Medidas da energia local da rede h_j no sítio j para $\alpha = 2.75, 3.75$ e $\eta = 1.0$. Estes resultados sugerem que a onda solitônica não é capaz de aprisionar o magnon para altos níveis de acoplamento magnon-fônon $\alpha > 2.0$.



Fonte: Autor, 2016.

constante de interação de troca $J(\vec{R}_i - \vec{R}_j)$, promova o amortecimento do magnon em uma rede cristalina para certas condições e parâmetros. Onde $\vec{R}_{i,j}$ representam as posições dos íons magnéticos. Em (CHENG *et al.*, 2009), afirma-se que o amortecimento do magnon aumenta significativamente com o crescimento da intensidade do acoplamento magnon-

FIGURA 6.8 – Densidade de probabilidade da função de ondas $|\psi_j(t)|^2$ versus j para $\alpha = 0.0, 1.0, 2.0, 3.0$ (painel *a*)), $\alpha = 4.0, 5.0, 6.0, 7.0$ (painel *b*)), $\eta = 1.0, t = 1000$ e 2000 . Percebemos que o magnon tem uma ligeira atenuação com aumento do acoplamento magnon-fônon.



Fonte: Autor, 2016.

fônon. Nossas condições são distintas destes modelos, porém, tem-se em comum o fato de acoplar a rede ao magnon através da constante de interação de troca com dependência entre os íons mais próximos. Deste modo, o aparente decrescimento no espalhamento do pacote de ondas de *spin* observado na Fig. 6.6(*d*) para $\alpha = 3.75$ em relação à Fig. 6.6(*a*) para $\alpha = 0.75$ sugere um possível amortecimento do magnon devido ao aumento da intensidade de acoplamento magnon-fônon. Esta evidência é reforçada pela Fig. 6.8 para $\alpha = 0.0, 1.0, 2.0, 3.0, 4.0, 5.0, 6.0, 7.0, t = 10000, 2000$, e $\eta = 1.0$, onde podemos ver o surgimento de picos isolados para alguns casos de acoplamento e uma ligeira atenuação do pacote de ondas de *spin* para $\alpha \rightarrow 7.0$, sendo esta uma nova evidência de nossas hipóteses. Contudo, nossos resultados estão de bom acordo a literatura da área (de MOURA, 2013; SALES *et al.*, 2014).

6.4 Conclusão

Temos estudado a dinâmica de um magnon em sistemas ferromagnéticos de Heisenberg na presença de interações magnon-fônon, sendo a rede estudada, uma estrutura unidimensional com uma correção não-linear cúbica. Tal qual foi investigada por (de MOURA, 2013; SALES *et al.*, 2014). Nossos principais resultados apontam que a propagação da onda de *spin* segue um regime super-difusivo para todos os valores de intensidade de acoplamento estudados $0.0 < \alpha < 4.0$, e intensidade de não-linearidade cúbica $\eta = 1.0$. Este comportamento de dinâmica temporal corrobora com os resultados apontados por (de MOURA, 2013) para fortes níveis de acoplamento elétron-rede. Estes consensos foram identificados através do estudo da entropia de informação de Shannon e do número de

participação. Seguindo nosso estudo, investigamos a posição média do pacote de ondas de *spin* para intensidade de acoplamento $0 < \alpha \leq 0.7$ e $0.75 \leq \alpha \leq 3.75$. Estes resultados estão de acordo com o estudo da dinâmica temporal do magnon, além também de sugerir uma possível mobilidade do magnon ao longo da rede para a maioria dos casos de α estudados, principalmente, para $\alpha < 0.7$. Com base nesta evidência, percebemos portando, a aparente formação de um par magnon-sóliton. Isso possibilita, portanto, a mobilidade da maior parte do magnon ao longo da rede, tal resultado é reforçado pelos únicos picos de $|\psi_j(t)|^2$ observados em nossos estudos. Nos estudos feitos sobre a dinâmica eletrônica na presença de acoplamento elétron-rede (de MOURA, 2013; SALES *et al.*, 2014), são apontados resultados que identificam a formação do par *elétron-sóliton*, isto é, o aprisionamento do elétron por parte da onda solitônica, permitindo que o elétron tenha mobilidade ao longo da rede.

Para níveis mais altos da intensidade de acoplamento magnon-fônon ($\alpha > 0.7$), notamos a atenuação do pacote de ondas para tempo longo, bem como, a quase ausência de coincidência entre as ondas solitônicas e o magnon para $3.0 < \alpha < 4.0$. Encaramos estes fatos como algo inusitado, de tal modo que em uma análise na literatura da área (CHENG *et al.*, 2008; CHENG *et al.*, 2007; CHENG *et al.*, 2006; CHENG *et al.*, 2009; CHENG *et al.*, 2007; KIRBY *et al.*, 2006; WOODS, 2002) nos revelou um fato interessante com respeito aos efeitos da interação magnon-fônon sobre a atenuação do magnon. A literatura prevê que o amortecimento do magnon aumenta significativamente com o crescimento da intensidade do acoplamento magnon-fônon (CHENG *et al.*, 2009). Diante desta revisão teórica, realizamos um estudo contemplando vários níveis de acoplamento magnon-fônon [1.0;7.0], em que verificamos uma ligeira atenuação no pacote de ondas de *spin* à medida que crescemos o acoplamento ($\alpha \rightarrow 7.0$), sendo esta uma nova evidência de nossas hipóteses. Contudo, nossos resultados estão de bom acordo com a literatura da área (de MOURA, 2013; SALES *et al.*, 2014), apesar de abordarmos o acoplamento magnon-fônon e não a interação elétron-rede como estes autores abordaram. Esperamos que este estudo seja construtivo para os futuros leitores, e que possa suportar novas pesquisas nesta linha científica.

7 Conclusão

Neste trabalho tivemos estudando basicamente o aspecto de transporte do ponto de vista estacionário e da dinâmica temporal de partículas e quasipartículas em sistemas unidimensionais, onde fizemos um rápido estudo em uma cadeia eletrônica ternária 1- d com distribuição *on-site* construída a partir do processo estocástico Ornstein-Uhlenbeck (OU). A distribuição de desordem diagonal ternária foi gerada por meio de um mapeamento do processo OU na presença de correlação, em uma sequência de três valores distintos, de modo que, a probabilidade de cada valor surgir foi controlada por um parâmetro fixo b . Desta forma, temos gerado um potencial diagonal ternário com correlações de longo alcance. Em nossos métodos numéricos, estudamos a diagonalização exata a fim de calcular o espectro de absorção ótica e a distribuição de espaçamentos entre níveis para este modelo ternário. O espectro de absorção indica um novo cenário com respeito aos picos dentro da banda de energia. Em nossas discussões, pudemos explicar em detalhes a origem destes novos picos, para tanto, consideramos a possibilidade de uma transição do estado ligado para o estado inferior de cada sub-banda permitida. De modo geral, conseguimos demonstrar que é possível controlar a posição de cada pico do espectro de absorção devido a conveniência de poder mudar a intensidade da desordem diagonal. Salientamos que essa estrutura de multi picos do espectro de absorção nunca foi observada antes em modelos desordenados 1- d . Por fim, gostaríamos de destacar que nossos resultados em torno da distribuição de espaçamentos entre níveis revelam uma distribuição de Poisson para pequenos valores de b . É importante garantir que esse resultado está em bom acordo com tratamentos passados em torno da ausência de estados estendidos em modelos ternários com distribuição de desordem correlacionada OU (SALES *et al.*, 2012). Portanto, nossos resultados contrariam trabalhos passados (ESMAILPOUR *et al.*, 2007; LAZO *et al.*, 2010; LAZO *et al.*, 2011) que destacam a existência de uma transição de fase metal-isolante de Anderson em modelos com distribuição de desordem correlacionada ternária. Salientamos que mesmo escolhendo o processo OU como a fonte de desordem, os nossos resultados não apresentam restrições para esta classe de desordem correlacionada de longo alcance. De um modo geral, o processo OU consiste em uma fácil maneira de gerar uma distribuição de desordem com correlações de longo alcance. Basicamente, um certo processo aleatório com densidade espectral tipo lei de potência deve ser usada como a fonte da desordem,

e deste modo construir a distribuição atômica ternária com correlações de longo alcance. Logo, com base em nossos cálculos, estamos confiantes que nossos resultados sejam válidos para outras distribuições de desordem ternárias com correlações de longo alcance.

Em um segundo momento apresentamos os resultados obtidos para sistemas com a dinâmica eletrônica acoplada às vibrações da rede. Neste sentido, realizamos três trabalhos distintos: a dinâmica de um elétron em uma rede não-linear cúbica na presença da interação elétron-rede, a dinâmica eletrônica em uma cadeia simples de DNA, e no terceiro estudo em torno deste tema (interação elétron-rede), decidimos incluir um novo ingrediente na dinâmica eletrônica acoplada à rede. Onde estudamos a influência de ondas elásticas sobre a dinâmica eletrônica.

Com respeito ao estudo sobre a dinâmica de um elétron em uma cadeia anarmônica na presença da interação elétron-rede. Nós construímos a rede não-linear utilizando o formalismo de Fermi-Pasta-Ulam com o potencial cúbico. Daí usando a aproximação *tight-binding*, tratamos o transporte eletrônico e um formalismo clássico para descrever as vibrações longitudinais, investigamos os efeitos da interação entre o elétron e a rede sobre a dinâmica do elétron e na mobilidade do pacote de ondas eletrônico. É importante informar que a interação elétron-rede foi considerada de tal forma que a integral de transferência entre os átomos vizinhos seja dependente da distância efetiva entre os átomos vizinhos. Para tanto, nós usamos a aproximação SSH, significando que o termo de *hopping* seja definido como uma função linear da distância entre os átomos vizinhos. Através de um poderoso procedimento numérico composto por um procedimento conjunto dos métodos de expansão de Taylor e o método de Euler, nós resolvemos as equações de dinâmica para o elétron e para a rede, e medimos a propagação de um pacote de ondas eletrônico inicialmente localizado. Nossas perspectivas em torno dos resultados foram satisfeitas até com um certo nível de surpresa e satisfação, de modo que nossos resultados sugerem um tipo de controle do modo solitônico sobre a dinâmica eletrônica ao longo da rede não-linear adotada. Nossos resultados revelam um tipo de estado elétron-sóliton se movendo ao longo da cadeia. Esta aparente mobilidade do par elétron-sóliton se mostra com velocidade aparentemente constante, e pode ser um ingrediente crucial no transporte de cargas em cadeias não-lineares. Esses resultados estão em ótimo acordo com recentes trabalhos nesta linha de pesquisa (ALDER *et al.*, 1997; BRIZHIK *et al.*, 2012; BRIZHIK *et al.*, 1995; CANTU ROS *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2011; de MOURA, 2013; HENNIG *et al.*, 2006; HENNIG *et al.*, 2008; MAKAROV *et al.*, 2006; VELARDE, 2010; VELARDE *et al.*, 2005; VELARDE *et al.*, 2009; VELARDE *et al.*, 2011; VELARDE *et al.*, 2008), que pontam a existência de uma nova excitação resultante a partir do aprisionamento de um elétron pela onda solitônica. Ademais, nós demonstramos a escala de valores de acoplamento α necessária para promover o surgimento deste par elétron-sóliton. Os consensos de nossas análises sugerem que mesmo em forte acoplamento elétron-rede α , nós podemos determi-

nar a ausência da dinâmica elétron-sóliton, sendo este, um resultado não-intuitivo. Em geral, nós deveríamos esperar que quando o acoplamento elétron-fônon α aumentasse, seria mais fácil promover o aprisionamento do elétron e, por conseguinte, a formação do par elétron-sóliton. Contudo, dentro do contexto de não-linearidade cúbica estudada aqui, nossos resultados sugerem que isto não é verdade.

Em nossa segunda abordagem sobre os efeitos da interação elétron-rede na dinâmica eletrônica. Nós investigamos a dinâmica de um estado eletrônico se movendo em uma cadeia simples finita de DNA contendo N bases, em que consideramos além da distribuição de desordem DNA intrínseca, o efeito das vibrações do DNA. Nosso estudo, em relação a este trabalho, consistiu em entender a dinâmica eletrônica usando a Hamiltoniana de um elétron *tight-binding*, e uma Hamiltoniana harmônica clássica para descrever as vibrações do DNA. O termo elétron-rede foi considerado de tal forma que a energia de *hopping* eletrônica pudesse depender da distância efetiva entre as bases mais próximas do DNA. Nossa análise foi feita ajustando a intensidade do acoplamento elétron-fônon α , bem como, a constante de mola harmônica β . Os principais resultados obtidos, revelam que o acoplamento elétron-fônon pode transpor a localização de Anderson, promovendo o aparecimento de uma dinâmica sub-difusiva para tempos longos. Além disso, estudamos o efeito de correções anarmônicas sobre as interações de primeiros vizinhos entre as bases, levada em conta através de uma força cúbica semelhante à descrita no modelo Fermi-Pasta-Ulan (FERMI *et al.*, 1955). O resultado numérico no limite de fraca anarmonicidade garante que a intensidade do acoplamento elétron-fônon, de fato promove um alargamento sub-difusivo do pacote de ondas.

Ao fim desta problemática em torno da interação elétron-rede, nós fizemos uma abordagem um pouco distinta dos dois últimos trabalhos. Para tanto, nós investigamos uma rede tipo Morse, bem como, os trabalhos de Manoel Velarde abordam (ALDER *et al.*, 1997; BRIZHIK *et al.*, 2012; BRIZHIK *et al.*, 1995; CANTU ROS *et al.*, 2011; CHETVERIKOV *et al.*, 2011; de MOURA, 2013; HENNIG *et al.*, 2006; HENNIG *et al.*, 2008; MAKAROV *et al.*, 2006; VELARDE, 2010; VELARDE *et al.*, 2005; VELARDE *et al.*, 2009; VELARDE *et al.*, 2011; VELARDE *et al.*, 2008). Além disso, estudamos a influência da desordem e de um pulso elástico Gaussiano constante em uma das bordas da rede. Isto é, a rede sendo bombeada por uma vibração elástica tipo Gaussiana. Em suma, temos construído um sistema que acopla o modelo eletrônico *tight-binding* de Anderson (ANDERSON, 1958) a uma rede de Morse (MORSE, 1929), onde as interações elétron-rede foram estruturadas de acordo com o modelo SSH não aproximado, isto é, com o *hopping* dependendo exponencialmente com as distâncias efetivas entre os sítios vizinhos. Em nossos principais resultados, percebemos que a ausência de acoplamento induz à localização do pacote de ondas em torno de uma região finita da rede, tal qual foi apontada por (NETO *et al.*, 2016; SALES *et al.*, 2012; SALES *et al.*, 2015). Por outro lado, quando estudamos os efeitos do acoplamento elétron-

rede, percebemos uma dinâmica sub-difusiva para o elétron, estando portanto, de acordo com pesquisas realizadas por (NETO *et al.*, 2016; SALES *et al.*, 2015). Vale salientar que estivemos utilizando a intensidade de acoplamento $\alpha = 1.0$ e 2.0 nas medidas de dinâmica temporal. Quanto a intensidade de desordem e frequência angular das vibrações acústicas, notamos que o valor da intensidade de desordem W influencia drasticamente no regime de propagação temporal do pacote de ondas. Porém, para frequência angular $\omega < 1.0$, os efeitos sobre a dinâmica temporal do elétron são quase que não notáveis. Contudo, em uma análise um pouco mais detalhada, observamos para $\omega = 4.0$, que o pacote de ondas é retardado pela presença das ondas acústicas tipo Gaussiana. Já em relação aos efeitos de nossos parâmetros (α , W e ω) sobre a mobilidade eletrônica, percebemos que o aumento na intensidade de acoplamento elétron-rede promove o surgimento do par elétron-sóliton, isto é, o elétron é aprisionado pelas ondas solitônicas. Este resultado foi obtido para $\omega = 0.02$ e usando tanto $W = 1.0$ como $W = 2.0$. Além disso, para $\omega = 4.0$ os resultados referentes ao grau de aprisionamento do elétron são otimizados, e por outro lado, o grau de mobilidade eletrônica é atenuado para frequências $\omega > 1.0$. Em outras palavras, verificamos que é possível mediar o transporte de cargas modificando a forma com que uma rede de Morse é acoplada com a dinâmica eletrônica, bem como, a intensidade de uma força vibracional em uma das extremidades da rede é também uma ferramenta muito útil para auxiliar no transporte de cargas.

Em nosso terceiro tema de pesquisa, realizamos um estudo sobre a dinâmica de um magnon em sistemas ferromagnéticos de Heisenberg na presença de interações magnon-fônon, sendo a rede estudada, uma estrutura unidimensional com uma correção não-linear cúbica. Tal qual foi investigada por (de MOURA, 2013; SALES *et al.*, 2014). Nossos resultados apontam que a propagação da onda de *spin* segue um regime super-difusivo para todos os valores de intensidade de acoplamento estudados $0.0 < \alpha < 4.0$, e intensidade de não-linearidade cúbica $\eta = 1.0$. Este comportamento de dinâmica temporal corrobora com os resultados apontados por (de MOURA, 2013) para fortes níveis de acoplamento elétron-rede. Nossas análises em torno do movimento espacial do pacote de ondas de *spin* (magnon), sugerem uma possível mobilidade do magnon ao longo da rede para a maioria dos casos de α estudados, principalmente, para $\alpha < 0.7$. Com base nesta primeira evidência, percebemos em um estudo mais detalhado, a formação de um par magnon-fônon. Possibilitando, portanto, a mobilidade da maior parte do magnon ao longo da rede. Nos estudos feitos sobre a dinâmica eletrônica na presença de acoplamento elétron-rede (de MOURA, 2013; SALES *et al.*, 2014), são apontados resultados que identificam a existência do bem conhecido efeito *self-trapping*, isto é, o auto-aprisionamento do elétron por parte da onda solitônica, permitindo que o elétron tenha mobilidade ao longo da rede. Aqui, classificamos este efeito de *self-trapping-spin*. Para níveis mais altos da intensidade de acoplamento magnon-fônon ($\alpha > 0.7$), notamos o amortecimento do pacote de ondas de *spin* para tempo longo, bem como, a quase ausência de coincidência entre as ondas

solitônicas e o magnon para $3.0 < \alpha < 4.0$. Encaramos estes fatos como algo inusitado, de tal modo que em uma análise na literatura da área (CHENG *et al.*, 2008; CHENG *et al.*, 2007; CHENG *et al.*, 2006; CHENG *et al.*, 2009; CHENG *et al.*, 2007; KIRBY *et al.*, 2006; WOODS, 2002) nos revelou um fato interessante com respeito aos efeitos da interação magnon-fônon sobre o amortecimento do magnon. A literatura prevê que o amortecimento do magnon aumenta significativamente com o crescimento da intensidade do acoplamento magnon-fônon (CHENG *et al.*, 2009). Diante desta revisão teórica, observamos a partir de uma análise sobre vários valores de acoplamento magnon-fônon, o surgimento de picos isolados para alguns casos de acoplamento e uma ligeira atenuação do pacote de ondas de spin para $\alpha \rightarrow 7.0$, sendo esta uma nova evidência de nossas hipóteses.

REFERÊNCIAS

ABRAHAMAS, E.; ANDERSON, P. W.; LICCIARDELLO, D. G.; RAMAKRISHNAN, T. V. *Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 42, n. 10, p. 673–676, mar. 1979. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.42.673>. Acesso em: 21 jan. 2016.

ALBRECHT, C.; WIMBERGER, S. *Induced delocalization by correlation and interaction in the one-dimensional Anderson model*. **Phys. Rev. B.**, v. 85, n. 4, p. 045107-1–045107-14, jan. 2012. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.85.045107>. Acesso em: 04 abr. 2016.

ALBUQUERQUE, E. L.; LYRA, M. L.; de MOURA, F. A. B. F. *Electronic transport in DNA sequences: The role of correlations and inter-strand coupling*. **Physica A**, v. 370, n. 2, p. 625–631, out. 2006. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1016/j.physa.2006.02.043>. Acesso em: 15 mai. 2016.

ALBUQUERQUE, E. L.; VASCONCELOS, M. S.; LYRA, M. L.; de MOURA, F. A. B. F. *Nucleotide correlations and electronic transport of DNA sequences*. **Phys. Rev. E**, v. 71, n. 2, p. 021910-1–021910-7, fev. 2005. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.71.021910>. Acesso em: 15 mai. 2016.

ALBUQUERQUE, E. L. *et al.* *DNA-based nanobiostructured devices: The role of quasiperiodicity and correlation effects*. **Phys. Rep.**, v. 535, n. 4, p. 139–209, fev. 2014. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1016/j.physrep.2013.10.004>. Acesso em: 15 mai. 2016.

ALBUQUERQUE, S. S.; de MOURA, F. A. F.; LYRA, M. L. *Vibrational modes in harmonic chains with diluted disorder*. **Physica A**, v. 357, n. 1, p. 165–172, nov. 2005. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1016/j.physa.2005.05.059>. Acesso em: 04 abr. 2016.

ALDER, B. J.; RUNGE, K. J.; SCALETTAR, R. T. *Variational Monte Carlo Study of an Interacting Electron-Phonon Model*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 79, n. 16, p. 3022–3025, out. 1997. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.79.673>. Acesso em: 01 mai. 2016.

ALTSHULER, B. L.; ARONOV, A. G.; KHMELNITSKII, D. E. AND LARKIN, A. I. **Quantum Theory of Solids: Coherent Effects in Disordered Conductors**. Moscow: MIR, 1982. p. 130. Cap. 3., Edited by I. M. Lifshits, 1982.

ALTSHULER, B. L.; LEE, P. A. *Disordered Electronic Systems*. **Physics Today**, v. 41, n. 12, p. 36–44, dez. 1988. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1063/1.881139>. Acesso em: 21 jan. 2016.

- AN, Z.; DI, B.; ZHAO, H.; WU, C. Q. *Inelastic scattering of oppositely charged polarons in conjugated polymers*. **Eur. Phys. J. B**, v. 63, n. 1, p. 71–77, jun. 2008. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2008-00216-8>>. Acesso em: 20 mar. 2016.
- AN, Z.; WU, C. Q.; SUN, X. *Dynamics of Photogenerated Polarons in Conjugated Polymers*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 93, n. 21, p. 216407-1–216407-4, nov. 2004. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.93.216407>>. Acesso em: 20 mar. 2016.
- ANDERSON, P. W. *Absence of diffusion in certain random lattices*. **Phys. Rev.**, v. 109, n. 5, p. 1492–1505, mar. 1958. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRev.109.1492>>. Acesso em: 08 jan. 2016.
- ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. **Solid State Physics**. California: Saunders College, 1976.
- ASSUNÇÃO, T. F.; LYRA, M. L.; de MOURA, F. A. F.; DOMÍNGUEZ-ADAME, F. *Coherent electronic dynamics and absorption spectra in an one-dimensional model with long-range correlated off-diagonal disorder*. **Phys. Lett. A**, v. 375, n. 6, p. 1048–1052, fev. 2011. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.physleta.2011.01.001>>. Acesso em: 04 abr. 2016.
- ASTAKHOVA, T. Yu; LIKHACHEV, V. N.; VINOGRADOV, G. A. *Long-range charge transfer in biopolymers*. **Russ. Chem. Rev.**, v. 81, n. 11, p. 994–1010, mar. 2012. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1070/RC2012v081n11ABEH004308>>. Acesso em: 02 mai. 2016.
- ASTAKHOVA, T. Yu; LIKHACHEV, V. N.; VINOGRADOV, G. A. *Polaron on a One-Dimensional Lattice: II. A Moving Polaron*. **Russ. J. Phys. Chem. B**, v. 7, n. 5, p. 521–533, nov. 2013. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1134/S199079311305028X>>. Acesso em: 02 mai. 2016.
- AUSTIN, I. G.; MOTT, N. F. *Polarons in crystalline and non-crystalline materials*. **Adv. Phys.**, v. 18:71, p. 41–102, jul. 1969. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1080/00018736900101267>>. Acesso em: 18 mar. 2016.
- BARANOVSKII, S. D. *et al. Computer Simulation of Energy Relaxation and Recombination of Nonequilibrium Electrons in a Disordered System with Localized Electronic States*. **Int. J. Mod. Phys. C**, v. 02, n. 01, p. 220–222, mar. 1991. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1142/S0129183191000202>>. Acesso em: 03 abr. 2016.
- BASKO, D. M.; CONWELL, E. M. *Theory of carrier injection into a polymer chain: Polaronic effects*. **Phys. Rev. B**, v. 66, n. 9, p. 094304-1–094304-5, set. 2002. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.66.094304>>. Acesso em: 15 mai. 2016.
- BÄSSLER, H.; KÖHLER, A. *Charge Transport in Organic Semiconductors*. **Top. Curr. Chem.**, v. 312, p. 1–65, out. 2011. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/1282011218>>. Acesso em: 24 mar. 2016.
- BELLANI, V. *et al. Experimental Evidence of Delocalized States in Random Dimer Superlattices*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 82, n. 10, p. 2159–2162, mar. 1999. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.82.2159>>. Acesso em: 03 abr. 2016.

- BELLANI, V. *et al.* *Experimental evidence of delocalization in correlated disorder superlattices.* **Physica E**, v. 7, n. 3–4, p. 823–826, mai. 2000. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/S1386-9477\(00\)00068-0](http://dx.doi.org/10.1016/S1386-9477(00)00068-0)>. Acesso em: 25 jan. 2016.
- BELITZ, D.; KIRKPATRICK, T. R. *The Anderson-Mott transition.* **Rev. Mod. Phys.**, v. 66, n. 2, p. 261–374, abr. 1994. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.66.261>>. Acesso em: 21 jan. 2016.
- BIRYUKOV, S. V.; GULYAEV, YU. V.; KRYLOV, V. V.; PLESSKY, V. P. **Surface Acoustic Waves in Inhomogeneous Media. Springer series on wave phenomena**, v. 20, 1st. ed. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, 1995. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-57767-3>>. Acesso em: 04 mai. 2016.
- BISWAS, P.; CAIN, P.; RÖMER, R. A.; SCHREIBER, M. *Off-Diagonal Disorder in the Anderson Model of Localization.* **Phys. Stat. Sol.**, v. 218, n. 1, p. 205–209, jan. 2000. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1002/\(SICI\)1521-3951\(200003\)218:1<205::AID-PSSB205>3.0.CO;2-B](http://dx.doi.org/10.1002/(SICI)1521-3951(200003)218:1<205::AID-PSSB205>3.0.CO;2-B)>. Acesso em: 10 jun. 2016.
- BIVINS, R. L.; METROPOLIS, N.; PASTA, J. R. *Nonlinear coupled oscillators: Modal equation approach.* **J. Comp. Phys.**, v. 12, n. 1, p. 65–187, mai. 1973. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991\(73\)90169-1](http://dx.doi.org/10.1016/0021-9991(73)90169-1)>. Acesso em: 06 jun. 2016.
- BOGDANOVICH, S.; SARACHIK, M. P.; BHATT, R. N. *Scaling of the Conductivity with Temperature and Uniaxial stress in Si:B at Metal-Insulator Transition.* **Phys. Rev. Lett.**, v. 82, n. 1, p. 137–140, jan. 1999. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.82.137>>. Acesso em: 28 jan. 2016.
- BOVIER, A. *Perturbation Theory for the random dimer model.* **J. Phys. A: Math. Gen.**, v. 25, n. 5, p. 1021–1029, jun. 1992. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0305-4470/25/5/011>>. Acesso em: 26 jan. 2016.
- BREDAS, J. L.; STREET, G. B. *Polarons, Bipolarons, and Solitons in Conducting Polymers.* **Acc. Chem. Res.**, v. 18, n. 10, p. 309–315, out. 1985. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1021/ar00118a005>>. Acesso em: 16 mar. 2016.
- BRIZHIK, L. *et al.* *Electron pairing and Coulomb repulsion in one-dimensional anharmonic lattices.* **Phys. Rev. B**, v. 85, n. 24, p. 245105-1–245105-9, jun. 2012. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.85.245105>>. Acesso em: 01 mai. 2016.
- BRIZHIK, L.; EREMKO, A. A. *Electron autolocalized states in molecular chains.* **Physica D**, v. 81, n. 3, p. 295–304, mar. 1995. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/0167-2789\(94\)00206-6](http://dx.doi.org/10.1016/0167-2789(94)00206-6)>. Acesso em: 01 mai. 2016.
- BUNDE, A.; HAVLIN, S.; KANTELHARDT, J. W.; RUSS, S. *Localization in a highly correlated potencial landscape.* **Physica A.**, v. 86, p. 151–161, jun. 2000. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/S0167-7322\(99\)00136-1](http://dx.doi.org/10.1016/S0167-7322(99)00136-1)>. Acesso em: 03 fev. 2016.
- CAIN, P.; RÖMER, R. A.; SCHREIBER, M. *Phase diagram of the three-dimensional Anderson model of localization with random hopping.* **Ann. Phys.**, v. 8, n. 5, p. 507–510, ago. 1999. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/cond-mat/9908255>>. Acesso em: 10 jun. 2016.

- CANTU ROS, O. G.; CRUZEIRO, L.; VELARDE, M. G.; EBELING, W. *On the possibility of electric transport mediated by long living intrinsic localized soliton modes.* **Eur. Phys. J. B**, v. 80, p. 545–554, abr. 2011. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2011-10880-0>>. Acesso em: 26 fev. 2016.
- CARPENA, P.; BERNAOLA-GALVÁN, P.; IVANOV, P. C.; STANLEY, H. E. *Metal-insulator transition in chains with correlated disorder.* **Nature**, v. 418, p. 955–959, ago. 2002. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1038/nature00948>>. Acesso em: 28 jan. 2016.
- CHAE, B.-G.; KIM, H.-T.; YOUN, D.-H.; KANG, K.-Y. *Abrupt metal-insulator transition observed in VO_2 thin films induced by a switching voltage pulse.* **Physica B**, v. 369, n. 1–4, p. 76–80, dez. 2006. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.physb.2005.07.032>>. Acesso em: 10 jun. 2016.
- JOHN, S. *Scaling and eigenfunction correlations near a mobility edge.* **Physica A**, v. 167, n. 1, p. 253–258, ago. 1990. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/0378-4371\(90\)90056-X](http://dx.doi.org/10.1016/0378-4371(90)90056-X)>. Acesso em: 15 mai. 2016.
- CHEN, D.; MOLINA, M. I.; TSIRONIS, G. P. *Non-adiabatic non-linear impurities in linear hosts.* **J. Phys.: Condens. Matter**, v. 5, n. 46, p. 8689–8702, jun. 1993. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/5/46/008>>. Acesso em: 01 mai. 2016. PAN, Z.; XIONG, S.; GONG, C. *Effects of off-diagonal nonlinearity on the time evolution of an initially localized mode.* **Phys. Rev. E**, v. 56, n. 4, p. 4744–4750, out. 1997. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.56.4744>>. Acesso em: 01 mai. 2016. YAMADA, H.; IGUCHI, K. *Some Effective Tight-Binding Models for Electrons in DNA Conduction: A Review.* **Adv. Condens. Matter Phys.**, v. 2010, p. 380710-1–380710-28, mai. 2010. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1155/2010/380710>>. Acesso em: 01 mai. 2016.
- CHENG, T.-M.; LI, L.; *Magnon-phonon coupling in two-dimensional Heisenberg ferromagnetic system.* **J. Mag. Mag. Mat.**, v. 320, n. 1–2, p. 1–7, jan. 2008. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.jmmm.2007.04.010>>. Acesso em: 04 jun. 2016.
- CHENG, T.-M.; LI, L.; LUO, H.-C. *Effect of optical phonon-magnon interaction on the magnon damping at finite temperature.* **Solid Stat. Comm.**, v. 149, n. 41–42, p. 1749–1754, nov. 2009. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.ssc.2009.07.030>>. Acesso em: 04 jun. 2016.
- CHENG, T.-M.; LI, L.; XIANYU, Z. *Magnon damping in two-dimensional Heisenberg ferromagnetic system.* **Phys. Lett. A**, v. 353, n. 5, p. 431–438, mai. 2006. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.physleta.2006.01.006>>. Acesso em: 04 jun. 2016.
- CHENG, T.-M.; LI, L.; XIANYU, Z. *Effect of magnon-phonon interaction on transverse acoustic phonon excitation at finite temperature.* **Physica B: Condens. Matter**, v. 390, n. 1–2, p. 301–308, mar. 2007. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.physb.2006.08.027>>. Acesso em: 04 jun. 2016.
- CHENG, T.-M.; LI, L.; XIANYU, Z. *Effect of magnon-phonon interaction on phonon damping of two-dimensional Heisenberg ferromagnetic system at finite temperature.* **Solid Stat. Comm.**, v. 141, n. 2, p. 89–94, jan. 2007. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.ssc.2006.09.040>>. Acesso em: 04 jun. 2016.

- CHERAGHCHI, H.; FAZELI, S. M.; ESFARJANI, K. *Localization-delocalization transition in a one one-dimensional system with long-range correlated off-diagonal disorder*. **Phys. Rev. B**, v. 72, n. 17, p. 174207-1–174207-8, nov. 2005. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.72.174207>>. Acesso em: 03 abr. 2016.
- CHETVERIKOV, A. P.; EBELING, W.; RÖPKE, G.; VELARDE, M. G. *High electrical conductivity in nonlinear model lattice crystals mediated by thermal excitation of solitons*. **Eur. Phys. J. B**, v. 87:153, p. 1–13, jul. 2014. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2014-50213-3>>. Acesso em: 26 fev. 2016.
- CHETVERIKOV, A. P.; EBELING, W.; VELARDE, M. G. *Nonlinear excitations and electric transport in dissipative Morse-Toda lattices*. **Eur. Phys. J. B**, v. 51, n. 1, p. 87–99, mai. 2006. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2006-00192-y>>. Acesso em: 11 mar. 2016.
- CHETVERIKOV, A. P.; EBELING, W.; VELARDE, M. G. *DISSIPATIVE SOLITONS AND COMPLEX CURRENTS IN ACTIVE LATTICES*. **Int. J. Bifu. Chaos in Appl. Sci. Eng.**, v. 16, n. 6, p. 1613–1632, jun. 2006. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1142/S0218127406015568>>. Acesso em: 08 jun. 2016.
- CHETVERIKOV, A. P.; EBELING, W.; VELARDE, M. G. *Local electron distributions and diffusion in anharmonic lattices mediated by thermally excited solitons*. **Eur. Phys. J. B**, v. 70, n. 2, p. 217–227, jun. 2009. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2009-00224-2>>. Acesso em: 12 mai. 2016.
- CHETVERIKOV, A. P.; EBELING, W.; VELARDE, M. G. *Properties of nano-scale soliton-like excitations in two-dimensional lattice layers*. **Physica D**, v. 240, n. 24, p. 1954–1959, dez. 2011. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.physd.2011.09.005>>. Acesso em: 11 mar. 2016. CHETVERIKOV, A. P.; EBELING, W.; VELARDE, M. G. *Soliton-like excitations and solitons in two-dimensional nonlinear lattices*. **Eur. Phys. J. B**, v. 80, n. 2, p. 137–145, jan. 2011. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2010-10604-0>>. Acesso em: 11 mar. 2016.
- CHETVERIKOV, A. P.; EBELING, W.; VELARDE, M. G. *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, ago. 2012. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2012-30276-x>>. Acesso em: 12 mai. 2016.
- CHETVERIKOV, A. P.; EBELING, W.; VELARDE, M. G. *Nonlinear soliton-like excitations in two-dimensional lattices and charge transport*. **Eur. Phys. J. Special Topics**, v. 222, n. 10, p. 2531–2546, out. 2013. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1140/epjst/e2013-02035-6>>. Acesso em: 11 mar. 2016.
- CHRISTIANSEN, P. L.; EILBECK, J. C.; ENOL'SKII, V. Z.; GAIDIDEI, Ju. B. *On ultrasonic Davydov solitons and the $H\tilde{A}\otimes$ non-Heiles system*. **Phys. Lett. A**, v. 166, n. 2, p. 129–134, jun. 1992. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/0375-9601\(92\)90547-Y](http://dx.doi.org/10.1016/0375-9601(92)90547-Y)>. Acesso em: 08 jun. 2016.
- CONWELL, E. M. *Charge transport in DNA in solution: The role of polarons*. **Proc. Natl. Acad. Sci. USA**, v. 102, n. 25, p. 8795–8799, jun. 2005. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1073/pnas.0501406102>>. Acesso em: 15 mai. 2016.

- CONWELL, E. M.; RAKHMANOVA, S. V. *Polarons in DNA*. **Proc. Natl. Acad. Sci. USA**, v. 97, n. 9, p. 4556–4560, abr. 2000. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1073/pnas.050074497>>. Acesso em: 26 abr. 2016.
- CORDES, M.; GIESE, B. *Electron transfer in peptides and proteins*. **Chem. Soc. Rev.**, v. 38, p. 892–901, fev. 2009. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1039/B805743P>>. Acesso em: 03 mai. 2016.
- COSTA, A. E. B.; de MOURA, F. A. B. F. . **Int. J. Mod. Phys. C**, v. 22, n. 06, p. 573–580, jun. 2011. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1142/S0129183111016452>>. Acesso em: 16 abr. 2016.
- CRESSONI, J. C.; LYRA, M. L. *Scaling behavior of the localization length in random dimer harmonic chains with thermal correlations*. **Phys. Rev. B.**, v. 53, n. 9, p. 5067–5069, mar. 1996. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.53.5067>>. Acesso em: 03 fev. 2016.
- CRISANTI, A. *Resonances in random binary optical media*. **J. Phys. A: Math. Gen.**, v. 23, n. 22, p. 5235–5240, dez. 1990. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0305-4470/23/22/014>>. Acesso em: 04 abr. 2016.
- CROY, A.; SCHREIBER, M. *Correlation-strength-driven Anderson metal-insulator transition*. **Phys. Rev. B.**, v. 85, n. 20, p. 205147-1–205147-3, mai. 2012. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.85.205147>>. Acesso em: 04 abr. 2016.
- DAKHOVSKII, Y. I.; PRONIN, K. A. *Non-linear optical properties of conjugated polymers in the SSH model: third harmonic generation*. **Synthetic Metals**, v. 54, n. 1–3, p. 295–300, mar. 1993. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/0379-6779\(93\)91073-B](http://dx.doi.org/10.1016/0379-6779(93)91073-B)>. Acesso em: 21 mar. 2016.
- DAS SARMA, S.; SONG HE; XIE, X. C. *Mobility Edge in a Model One-Dimensional Potential*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 61, n. 13, p. 2144–2147, out. 1988. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.61.2144>>. Acesso em: 03 fev. 2016.
- DATTA, P. K.; KUNDU, K. *The absence of localization in one-dimensional disordered harmonic chains*. **J. Phys. Cond. Matt.**, v. 6, n. 24, p. 4465–4478, jan. 1994. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/6/24/009>>. Acesso em: 04 abr. 2016.
- DAVYDOV, A. S. *Solitons and Energy Transfer Along Protein Molecules*. **J. Theor. Bio.**, v. 66, n. 2, p. 379–387, mai. 1977. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/0022-5193\(77\)90178-3](http://dx.doi.org/10.1016/0022-5193(77)90178-3)>. Acesso em: 01 mai. 2016.
- DAVYDOV, A. S. *Solitons in Molecular Systems*. **Physica Scripta**, v. 20, n. 3-4, p. 387–394, dez. 1979. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0031-8949/20/3-4/013>>. Acesso em: 25 fev. 2016.
- DAVYDOV, A. S. **Biology and Quantum Mechanics**. 1st. ed. New York: Pergamon, 1981.
- 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, jul. 1981. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/0167-2789\(81\)90116-0](http://dx.doi.org/10.1016/0167-2789(81)90116-0)>. Acesso em: 26 fev. 2016.

DAVYDOV, A. S.; ZOLOTARIUK, A. V. *Solitons in molecular systems with nonlinear nearest-neighbour interactions*. **Phys. Lett. A**, v. 94, n. 1, p. 49–51, fev. 1983. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/0375-9601\(83\)90285-2](http://dx.doi.org/10.1016/0375-9601(83)90285-2)>. Acesso em: 26 fev. 2016.

de BRITO, P. E.; RODRIGUES, E. S.; NAZARENO, H. N. *Dynamics of two interacting electrons in a one-dimensional crystal with impurities*. **Physica B**, v. 388, n. 1-2, p. 393–403, fev. 2007. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.physb.2006.06.148>>. Acesso em: 04 fev. 2016.

de QUEIROZ, S. L. A. *Reentrant behavior and universality in the Anderson transition*. **Phys. Rev. B**, v. 63, n. 21, p. 214202-1–214202-5, abr. 2001. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.63.214202>>. Acesso em: 28 jan. 2016.

de MOURA, F. A. B. F. **Transição de Anderson em sistemas de baixa dimensionalidade com desordem correlacionada**. Tese (Doutorado) — UFPE, Recife, 2003.

de MOURA, F. A. F. *Extended spin waves in aperiodic ferromagnetic chains*. **Eur. Phys. J. B**, v. 58, n. 4, p. 389–393, ago. 2007. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2007-00245-9>>. Acesso em: 04 abr. 2016.

de MOURA, F. A. F. *Absence of localization on the 2d model with long-range correlated off-diagonal disorder*. **Eur. Phys. J. B**, v. 78, n. 3, p. 335–339, dez. 2010. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2010-10579-8>>. Acesso em: 03 abr. 2016.

de MOURA, F. A. F. *DYNAMICS OF ONE-ELECTRON IN A ONE-DIMENSIONAL SYSTEMS WITH AN APERIODIC HOPPING DISTRIBUTION*. **Int. J. Mod. Phys. C**, v. 22, n. 1, p. 63–69, jan. 2011. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1142/S0129183111016063>>. Acesso em: 03 abr. 2016.

de MOURA, F. A. F. *Numerical evidence of electron-soliton dynamics in Fermi-Pasta-Ulam disordered chains*. **Physica D**, v. 253, n. 17, p. 66–72, mar. 2013. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.physd.2013.02.013>>. Acesso em: 11 mar. 2016.

de MOURA, F. A. F.; COUTINHO-FILHO, M. D.; LYRA, M. L. *Delocalization and ballistic dynamics in the two-dimensional Anderson model with long-range correlated disorder*. **Eur. Phys. Lett.**, v. 66, n. 4, p. 585–591, mai. 2004. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1209/epl/i2003-10238-4>>. Acesso em: 03 abr. 2016.

de MOURA, F. A. F.; COUTINHO-FILHO, M. D.; RAPOSO, E. P.; LYRA, M. L. *Delocalization and spin-wave dynamics in ferromagnetic chains with long-range correlated random exchange*. **Phys. Rev. B**, v. 66, n. 1, p. 014418-1–014418-5, jul. 2002. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.66.014418>>. Acesso em: 04 abr. 2016.

de MOURA, F. A. F.; COUTINHO-FILHO, M. D.; RAPOSO, E. P.; LYRA, M. L. *Delocalization in harmonic chains with long-range correlated random masses*. **Phys. Rev. B**, v. 68, n. 1, p. 012202-1–012202-4, jul. 2003. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.68.012202>>. Acesso em: 04 abr. 2016.

de MOURA, F. A. F.; DOMÍNGUEZ-ADAME, F. *Extended modes and energy dynamics in two-dimensional lattices with correlated disorder*. **Eur. Phys. J. B**, v. 66, n. 2, p. 165–169, nov. 2008. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2008-00393-4>>. Acesso em: 04 abr. 2016.

de MOURA, F. A. F.; FULCO, U. L.; LYRA, M. L.; DOMÍNGUEZ-ADAME, F.; ALBUQUERQUE, E. L. *Electron wave packet dynamics in twisted nonlinear ladders with correlated disorder*. **Physica A**, v. 390, n. 4, p. 535–540, fev. 2011. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.physa.2010.10.023>>. Acesso em: 15 mai. 2016.

de MOURA, F. A. F.; IRAN GLÉRIA; dos SANTOS, I. F.; LYRA, M. L. *Wave-Packet Dynamics in Chains with Delayed Electronic Nonlinear Response*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 103, n. 9, p. 096401-1–096401-4, ago. 2009. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.103.096401>>. Acesso em: 01 mai. 2016.

de MOURA, F. A. F.; LYRA, M. L. *Delocalization in the 1d anderson model with long-range correlated disorder*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 81, n. 17, p. 3735–3738, out. 1998. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.81.3735>>. Acesso em: 27 jan. 2016.

de MOURA, F. A. F.; LYRA, M. L. *Correlation-induced metal-insulator transition in the one-dimensional anderson model*. **Physica A**, v. 266, n. 1–4, p. 465–470, abr. 1999. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/S0378-4371\(98\)00632-3](http://dx.doi.org/10.1016/S0378-4371(98)00632-3)>. Acesso em: 27 jan. 2016.

de MOURA, F. A. F.; VIDAL, E. J. G. G.; IRAN GLÉRIA; LYRA, M. L. *Electron self-trapping and self-focusing in periodic chains with a finite nonlinear response time*. **Phys. Lett. A**, v. 374, n. 40, p. 4152–4155, set. 2010. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.physleta.2010.08.016>>. Acesso em: 01 mai. 2016.

de MOURA, F. A. F.; CAETANO, R. A.; SANTOS, B. *Dynamics of one electron in a nonlinear disordered chain*. **J. Phys.: Condens. Matter**, v. 24, n. 24, p. 245401-1–245401-5, mai. 2012. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/24/24/245401>>. Acesso em: 01 mai. 2016.

de MOURA, F. A. F.; LEÃO, F. F. S.; LYRA, M. L. *Resonant states and wavepacket super-diffusion in intra-chain correlated ladders with diluted disorder*. **J. Phys.: Condens. Matter**, v. 23, n. 13, p. 135303-1–135303-7, mar. 2011. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/23/13/135303>>. Acesso em: 16 mai. 2016.

de OLIVEIRA NETO, P. H.; da CUNHA, W. F.; SILVA, G. M. *Charge carrier untrapping by temperature effects in conjugated polymers*. **Europhys. Lett.**, v. 88, n. 6, p. 67006-p1–67006-p2, dez. 2009. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1209/0295-5075/88/67006>>. Acesso em: 01 mai. 2016.

DI, B.; AN, Z.; LI, Y. C.; WU, C. Q. *Effects of e-e interactions on the dynamics of polarons in conjugated polymers*. **Eur. Phys. Lett.**, v. 79, n. 1, p. 17002-1–17002-5, jun. 2007. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1209/0295-5075/79/17002>>. Acesso em: 20 mar. 2016.

DI, B. *et al.* *Formation and Evolution Dynamics of Bipolarons in Conjugated Polymers*. **J. Phys. Chem. B**, v. 115, p. 964–971, jan. 2011. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1021/jp110875b>>. Acesso em: 20 mar. 2016.

DIAS, W. S.; LYRA, M. L.; de MOURA, F. A. F. *The role of Hubbard-like interaction in the dynamics of two interacting electrons*. **Phys. Lett. A**, v. 374, n. 44, p. 4554–4558, out. 2010. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.physleta.2010.09.005>>. Acesso em: 04 fev. 2016.

DIAS, W. S.; LYRA, M. L.; de MOURA, F. A. F. *Self-trapping of interacting electrons in crystalline nonlinear chains*. **Eur. Phys. J. B**, v. 85:7, p. 1–6, jan. 2012. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2011-20358-8>>. Acesso em: 04 fev. 2016.

DIAS, W. S.; LYRA, M. L. *Non monotonic influence of Hubbard interaction on the Anderson localization of two-electron wavepackets*. **Physica A**, v. 411, p. 35–41, out. 2014. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.physa.2014.05.059>>. Acesso em: 04 fev. 2016.

DIAS, W. S.; NASCIMENTO, E. M.; LYRA, M. L.; de MOURA, F. A. F. *Dynamics of two interacting electrons in Anderson-Hubbard chains with long-range correlated disorder: Effect of a static electric field*. **Phys. Rev. B**, v. 81, n. 4, p. 045116-1–045116-7, jan. 2010. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.81.045116>>. Acesso em: 04 fev. 2016.

DÍAZ, E.; RODRÍGUEZ, A.; DOMÍNGUEZ-ADAME, F.; MALYSHEV, V. A. *Anomalous optical absorption in a random system with scale-free disorder*. **Eur. Phys. Lett.**, v. 72, n. 6, p. 1018–1024, dez. 2005. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1209/epl/i2005-10321-x>>. Acesso em: 04 abr. 2016.

DING, X.; *et al.* *On-chip manipulation of single microparticles, cells, and organisms using surface acoustic waves*. **Proc. Natl. Acad. Sci. USA**, v. 109, n. 28, p. 11105–11109, jul. 2012. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1073/pnas.1209288109>>. Acesso em: 04 mai. 2016.

DOMÍNGUEZ-ADAME, F.; MACIÁ, E.; SÁNCHEZ, A. *Delocalized vibrations in classical random chains*. **Phys. Rev. B**, v. 48, n. 9, p. 6054–6057, set. 1993. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.48.6054>>. Acesso em: 04 abr. 2016.

DOMÍNGUEZ-ADAME, F.; MALYSHEV, V. A.; de MOURA, F. A. F.; LYRA, M. L. *Bloch-Like Oscillations in a One-Dimensional Lattice with Long-Range Correlated Disorder*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 91, n. 19, p. 197402-1–197402-4, nov. 2003. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.91.197402>>. Acesso em: 03 abr. 2016.

DOMÍNGUEZ-ADAME, F.; MALYSHEV, V. A.; RODRÍGUEZ, A. *Absorption line shape of Frenkel excitons in one-dimensional random chains with pairwise correlated Gaussian disorder*. **Chem. Phys.**, v. 244, n. 2–3, p. 351–359, jun. 1999. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/S0301-0104\(99\)00170-6](http://dx.doi.org/10.1016/S0301-0104(99)00170-6)>. Acesso em: 04 abr. 2016.

DONG, J. *et al.* *Nonlinear optical properties of the substituted fullerenes $C_{59}X$ ($X = B, N$)*. **Phys. Rev. B**, v. 52, n. 12, p. 9066–9070, set. 1995. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.52.9066>>. Acesso em: 21 mar. 2016.

dos SANTOS, C. A. A.; ASSUNÇÃO, T. F.; LYRA, M. L.; de MOURA, F. A. F. *ENERGY DYNAMICS IN A ONE-DIMENSIONAL APERIODIC ANHARMONIC LATTICE*. **Int. J. Mod. Phys. C**, v. 23, n. 08, p. 1240009-1–1240009-11, ago. 2012. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1142/S0129183112400098>>. Acesso em: 04 mai. 2016.

dos SANTOS, I. F.; de MOURA, F. A. F.; LYRA, M. L.; COUTINHO-FILHO, M. D. *Critical behavior of the two-dimensional Anderson model with long-range correlated disorder*. **J. Phys. Cond. Matt.**, v. 19, n. 47, p. 476213-1–476213-9, nov. 2007. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/19/47/476213>>. Acesso em: 03 abr. 2016.

DUKESZ, F.; ZILBERGERTS, M.; SANTOS, L. F. *Interplay between interaction and (un)correlated disorder in one-dimensional many-particle systems: delocalization and global entanglement*. **New J. Phys.**, v. 11, p. 043026-1–043026-18, abr. 2009. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/1367-2630/11/4/043026>>. Acesso em: 02 abr. 2016.

DUNLAP, D. H.; WU, H.-L.; PHILLIPS, P. W. *Absence of localization in a random-dimer model*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 65, n. 1, p. 88–91, jul. 1990. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.65.88>>. Acesso em: 25 jan. 2016.

EBELING, W.; CHETVERIKOV, A. P.; RÖPKE, G.; VELARDE, M. G. *High Conductivity Mediated by Thermal Excitation of Solectrons*. **Contrib. Plasma Phys.**, v. 53, n. 10, p. 736–743, dez. 2013. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/ctpp.201310047>>. Acesso em: 02 mai. 2016.

ECONOMOU, E. N.; YANOVITSKII, O.; FRAGGIS, Th. *Polarons in a one-dimensional quasiperiodic model*. **Phys. Rev. B**, v. 47, n. 2, p. 740–752, jan. 1993. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.47.740>>. Acesso em: 25 fev. 2016.

EDWARDS, J. T.; THOULESS, D. J. *Numerical studies of localization in disordered systems*. **J. Phys. C**, v. 5, n. 8, p. 807–820, jan. 1972. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0022-3719/5/8/007>>. Acesso em: 12 jun. 2016.

EILMES, A.; RÖMER, R. A. *Exponents of the localization length in the 2D Anderson model with off-diagonal disorder*. **Phys. Stat. Sol. B**, v. 241, n. 9, p. 2079–2088, jan. 2004. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/pssb.200404793>>. Acesso em: 10 jun. 2016.

EILMES, A.; RÖMER, R. A.; SCHREIBER, M. *The two-dimensional Anderson model of localization with random hopping*. **Eur. Phys. J. B**, v. 1, n. 1, p. 29–38, jan. 1998. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/s100510050149>>. Acesso em: 10 jun. 2016.

EILMES, A.; RÖMER, R. A.; SCHREIBER, M. *Critical Behavior in the Two-Dimensional Anderson Model of Localization with Random Hopping*. **Phys. Stat. Sol.**, v. 205, n. 1, p. 229–332, jan. 1998. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1002/\(SICI\)1521-3951\(199801\)205:1<229::AID-PSSB229>3.0.CO;2-S](http://dx.doi.org/10.1002/(SICI)1521-3951(199801)205:1<229::AID-PSSB229>3.0.CO;2-S)>. Acesso em: 10 jun. 2016.

EILMES, A.; RÖMER, R. A.; SCHREIBER, M. *Exponents of the localization lengths in the bipartite Anderson model with off-diagonal disorder*. **Physica B**, v. 296, n. 1-3, p. 46–51, fev. 2001. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/S0921-4526\(00\)00777-8](http://dx.doi.org/10.1016/S0921-4526(00)00777-8)>. Acesso em: 10 jun. 2016.

EISFELD, A.; VLAMING, S. M.; MALYSHEV, V. A.; KNOESTER, J. *Excitons in Molecular Aggregates with Lévy-Type Disorder: Anomalous Localization and Exchange Broadening of Optical Spectra*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 105, n. 13, p. 137402-1–137402-4, set. 2010. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.105.137402>>. Acesso em: 04 abr. 2016.

EISFELD, A. *et al. Eisfeld et al. Reply*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 109, n. 25, p. 259702-1–259702-1, dez. 2012. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.109.259702>>. Acesso em: 04 abr. 2016.

- ENDRES, R. G.; COX, D. L.; SINGH, R. R. P. *Colloquium: The quest for high-conductance DNA*. **Rev. Mod. Phys.**, v. 76, n. 1, p. 195–214, jan.–mar. 2004. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.76.195>>. Acesso em: 15 mai. 2016.
- ESMAILPOUR, A.; CHERAGHCHI, H.; CARPENA, P.; TABAR, M. R. R. *Metal-insulator transition in a ternary model with long range correlated disorder*. **J. Stat. Mech. Theo. Exp.**, v. 2007, p. P09014-1–P09014-11, set. 2007. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/1742-5468/2007/09/P09014>>. Acesso em: 03 abr. 2016.
- EVANGELOU, S. N. *Anderson Transition, Scaling, and Level Statistics in the Presence of Spin Orbit Coupling*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 75, n. 13, p. 2550–25530, set. 1995. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.75.2550>>. Acesso em: 21 jan. 2016.
- EVANGELOU, S. N.; ECONOMOU, E. N. *Reflectionless modes in chains with large-size*. **J. of Phys. A: Math. and Gen.**, v. 26, n. 12, p. 2803–2813, mar. 1993. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0305-4470/26/12/020>>. Acesso em: 03 fev. 2016.
- EVANGELOU, S. N.; KATSANOS, D. E. *Super-diffusion in random chains with correlated*. **Phys. Lett. A**, v. 164, n. 5–6, p. 456–464, abr. 1992. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/0375-9601\(92\)90114-2](http://dx.doi.org/10.1016/0375-9601(92)90114-2)>. Acesso em: 26 jan. 2016.
- EVANGELOU, S. N.; KATSANOS, D. E. *Energy level statistics in disordered metals with an anderson transition*. **J. Stat. Phys.**, v. 85, n. 5–6, p. 525–550, dez. 1996. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/BF02199355>>. Acesso em: 04 abr. 2016.
- FEDER, J. **Fractals**, Series: Physics of Solids and Liquids. 1st. ed., New York: Springer, 1988.
- FEHSKE, H.; LOOS, J.; WELLEIN, G. *Lattice polaron formation: Effects of nonscreened electron-phonon interaction*. **Phys. Rev. B**, v. 61, n. 12, p. 8016–8025, mar. 2000. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.61.8016>>. Acesso em: 25 fev. 2016.
- FERMI, E.; PASTA, J. R.; ULAM, S. M. *Studies of nonlinear problems*. **Los Alamos Nat. Lab. Report LA-1940**, v. 266, p. 978–988, may. 1955. Disponível em: <<http://users.mat.unimi.it/users/galgani/arch/FPU.pdf>>. Acesso em: 26 mar. 2016.
- FERRY, D.; GOODNICK, S. M.; BIRD, J. **Transport in Nanostructures**. California: Cambridge University Press, p. 183. Cap. 3., 2009.
- FLORES, J. C. *Transport in models with correlated diagonal and off-diagonal*. **J. Phys.: Condens. Matter.**, v. 1, n. 44, p. 8471–8479, jul. 1989. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/1/44/017>>. Acesso em: 21 jan. 2016.
- FLORES, J. C.; HILKE, M. *Absence of localization in disordered systems with local correlation*. **J. Phys. A: Math. Gen.**, v. 26, n. 24, p. L1255–L1260, out. 1993. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0305-4470/26/24/002>>. Acesso em: 28 jan. 2016.
- GARCÍA-GARCÍA, A. *Semiclassical Theory of the Anderson Transition*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 100, n. 7, p. 076404-1–076404-4, fev. 2008. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.076404>>. Acesso em: 02 abr. 2016.

- GARNIER, J.; ABDULAEV, F. Kh. *Soliton dynamics in a random Toda chain*. **Phys. Rev. E**, v. 67, n. 2, p. 026609-1–026609-10, fev. 2003. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.67.026609>>. Acesso em: 04 mai. 2016.
- GASPARIAN, V.; CAHAY, M.; JÓDAR, E. *Localization length in a quasi-one-dimensional disordered system in the presence of an electric field*. **J. Phys. Cond. Matt.**, v. 23, n. 4, p. 045301-1–045301-8, jan. 2011. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/21/40/405302>>. Acesso em: 03 abr. 2016.
- GASPARIAN, V.; SUZUKI, A. *Localization length in two-dimensional disordered systems: effects of evanescent modes*. **J. Phys. Cond. Matt.**, v. 21, n. 40, p. 405302-1–405302-10, set. 2009. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/21/40/405302>>. Acesso em: 02 abr. 2016.
- GENEREUX, J. C.; BOAL, A. K.; BARTON, J. K. *DNA-Mediated Charge Transport in Redox Sensing and Signaling*. **J. Am. Chem. Soc.**, v. 132, n. 3, p. 891–905, jan. 2010. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1021/ja907669c>>. Acesso em: 03 mai. 2016.
- GILLESPIE, D. T. *Exact numerical simulation of the Ornstein-Uhlenbeck process and its integral*. **Phys. Rev. E**, v. 54, n. 2, p. 2084–2091, ago. 1996. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.54.2084>>. Acesso em: 04 abr. 2016.
- GORODETSKY, A. A.; BUZZEO, M. C.; BARTON, J. K. *DNA-Mediated Electrochemistry*. **Bioconjugate Chem.**, v. 19, n. 12, p. 2285–2296, nov. 2008. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.54.2084>>. Acesso em: 03 mai. 2016.
- GRINIASTY, M.; FISHMAN, S. *Localization por pseudorandom potentials in one dimension*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 60, n. 1, p. 1334–1337, jan. 1988. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.60.1334>>. Acesso em: 03 fev. 2016.
- GROSSO, G.; PARRAVICINI, G. P. **Solid State Physics**. 2nd. ed., Oxford: Elsevier, 2014.
- GUTIÉRRES, R. *et al.* *Inelastic quantum transport in a ladder model: Implications for DNA conduction and comparison to experiments on suspended DNA oligomers*. **Phys. Rev. B**, v. 74, n. 23, p. 235105-1–235105-10, dez. 2006. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.74.235105>>. Acesso em: 15 mai. 2016.
- HAIRER, E.; NØRSETT, S. P.; WANNER, G. **Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems**. **Springer Series in Computational Mathematics**, v. 8, 3rd. ed. New York: Springer, 2008. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/978-3-540-78862-1>>. Acesso em: 04 mai. 2016.
- PRESS, W. H.; FLANNERY, B. P.; TEUKOLKY, S. A.; WETTERLING, W. T. **Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing**. 3rd. ed., New York: Cambridge University Press, 2007.
- HARADA, I.; TASUMI, M.; SHIRAKAWA, H.; IKEDA, A. *RAMAN SPECTRA OF POLYACETYLENE AND HIGHLY CONDUCTING IODINE-DOPED POLYACETYLENE*. **Chem. Lett.**, v. 7, n. 12, p. 1411–1414, 1978. Disponível em: <<http://dx.doi.org/doi.org/10.1246/cl.1978.1411>>. Acesso em: 11 mar. 2016.

- HARIGAYA, K.; TERAJ, A. *Metal-insulator transition in doped conjugated polymers: Effects of long-ranged Coulomb potentials*. **Phys. Rev. B**, v. 44, n. 15, p. 7835–7843, out. 1991. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.44.7835>>. Acesso em: 24 mar. 2016.
- HAYDEN, G. W.; MELE, E. J. *Correlation effects and excited states in conjugated polymers*. **Phys. Rev. B**, v. 34, n. 8, p. 5484–5497, out. 1986. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.34.5484>>. Acesso em: 20 mar. 2016.
- HEEGER, A. J. *Semiconducting and Metallic Polymers: The Fourth Generation of Polymeric Materials*. **J. Phys. Chem. B**, v. 105, n. 36, p. 8475–8491, set. 2001. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1021/jp011611w>>. Acesso em: 24 mar. 2016.
- HEINRICH, J. *Localization, antilocalization, and delocalization in one-dimensional disordered lattices*. **Phys. Rev. B**, v. 51, n. 9, p. 5699–5710, mar. 1995. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.51.5699>>. Acesso em: 27 jan. 2016.
- HENNIG, D.; CHETVERIKOV, A. P.; VELARDE, M. G.; EBELING, W. *Electron capture and transport mediated by lattice solitons*. **Phys. Rev. E**, v. 76, n. 4, p. 046602-1–046602-9, out. 2007. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.76.046602>>. Acesso em: 11 mar. 2016.
- HENNIG, D.; NEIßNER, C.; VELARDE, M. G.; EBELING, W.; *Effect of anharmonicity on charge transport in hydrogen-bonded systems*. **Phys. Rev. B**, v. 73, n. 2, p. 024306-1–024306-10, jan. 2006. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.73.024306>>. Acesso em: 11 mar. 2016.
- HENNIG, D.; VELARDE, M. G.; EBELING, W.; CHETVERIKOV, A. P. *Compounds of paired electrons and lattice solitons moving with supersonic velocity*. **Phys. Rev. E**, v. 78, n. 6, p. 066606-1–066606-9, dez. 2008. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.78.066606>>. Acesso em: 11 mar. 2016.
- HIKAMI, S.; LARKIN, A. I.; NAGAOKA, Y. *Spin-Orbit Interaction and Magnetoresistance in the Two Dimensional Random System*. **Prog. Theor. Phys.**, v. 63, n. 2, p. 707–710, fev. 1980. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1143/PTP.63.707>>. Acesso em: 21 jan. 2016.
- HILKE, M. *Local correlations in one-and two-dimensional disordered systems*. **J. Phys. A: Math. Gen.**, v. 27, n. 14, p. 4773–4783, abr. 1994. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0305-4470/27/14/008>>. Acesso em: 25 jan. 2016.
- HILKE, M. *Seeing Anderson localization*. **Phys. Rev. A**, v. 80, n. 6, p. 063820-1–063820-5, dez. 2009. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.80.063820>>. Acesso em: 04 abr. 2016.
- HIRAI, D.; ALI, M. N.; CAVA, R. J. **J. Phys. Soc. Japan**, v. 82, n. , p. 124701-1–124701-, 2013. Disponível em: <<http://dx.doi.org/>>. Acesso em: 01 mai. 2016.
- HOFSTETTER, E.; SCHREIBER, M. *Statistical of the eigenvalue spectrum of the three-dimensional Anderson Hamiltonian*. **Phys. Rev. B**, v. 48, n. 23, p. 16979–16985, dez. 1993. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.48.16979>>. Acesso em: 28 jan. 2016.

HONG-JUAN, Z.; SHI-JIE, X. *Localization and delocalization of a one-dimensional system coupled with the environment*. **Chin. Phys. B**, v. 19, n. 3, p. 037107-1–037107-5, 2010. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/1674-1056/19/3/037107>>. Acesso em: 02 abr. 2016.

HOSKINS, M. J.; MORKOC, H.; HUNSINGER, B. J. *Charge transport by surface acoustic waves in GaAs*. **Appl. Phys. Lett.**, v. 41, n. 4, p. 332–334, ago. 1982. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.93526>>. Acesso em: 04 mai. 2016.

HUCKESTEIN, B.; SCHWETZER, L. *Relation between the correlation dimensions of multifractal wave functions and spectral measures in integer quantum Hall systems*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 72, n. 5, p. 713–716, jan. 1994. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.72.713>>. Acesso em: 16 mai. 2016.

ISHII, K. *Localization of Eigenstates and Transport Phenomena in the One-Dimensional Disordered System*. **Prog. Theor. Phys.**, v. 53, p. 77–138, 1973. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1143/PTPS.53.77>>. Acesso em: 29 jan. 2016.

IVANCHENKO, M. V. *q Breathers in Finite Lattices: Nonlinearity and Weak Disorder*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 102, n. 17, p. 175507-1–175507-4, mai. 2009. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.175507>>. Acesso em: 01 mai. 2016. FLACH, S.; KRIMER, D. O.; SKOKOS, C. H. *Universal Spreading of Wave Packets in Disordered Nonlinear Systems*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 102, n. 2, p. 024101-1–024101-4, jan. 2009. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.024101>>. Acesso em: 01 mai. 2016. SKOKOS, C. H.; KRIMER, D. O.; KOMINEAS, S.; FLACH, S.; *Delocalization of wave packets in disordered nonlinear chains*. **Phys. Rev. E**, v. 79, n. 5, p. 056211-1–056211-12, mai. 2009. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.79.056211>>. Acesso em: 01 mai. 2016. SANGIOVANNI, G.; CAPONE, M.; CASTELLANI, C.; GRILLI, M.; *Electron-Phonon Interaction Close to a Mott Transition*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 94, n. 2, p. 026401-1–026401-4, jan. 2005. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.94.026401>>. Acesso em: 01 mai. 2016.

IZRAILEV, F. M.; KROKHIN, A. A. *Localization and the Mobility Edge in One-Dimensional Potentials with Correlated Disorder*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 82, n. 20, p. 4062–4065, mai. 1999. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.82.4062>>. Acesso em: 27 jan. 2016.

IZRAILEV, F. M.; KROKHIN, A. A.; MAKAROV, N. M. *Anomalous localization in low-dimensional systems with correlated disorder*. **Phys. Rep.**, v. 512, n. 3, p. 125–254, mar. 2012. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.physrep.2011.11.002>>. Acesso em: 03 abr. 2016.

IZRAILEV, F. M.; KROKHIN, A. A.; ULLOA, S. E. *Mobility edge in aperiodic Kronig-Penney potentials with correlated disorder: Perturbative approach*. **Phys. Rev. B**, v. 63, n. 4, p. 41102-1–41102-4, jan. 2001. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.63.041102>>. Acesso em: 27 jan. 2016.

JEONG, J. *et al. Suppression of Metal-Insulator Transition in VO₂ by Electric Field-Induced Oxygen Vacancy Formation*. **Science**, v. 339, n. 6126, p. 1402–1405, mar. 2013. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1126/science.1230512>>. Acesso em: 10 jun. 2016.

JOHANSSON, A.; STAFSTRÖM, S. *Polaron Dynamics in a System of Coupled Conjugated Polymer Chains*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 86, n. 16, p. 3602–3605, abr. 2001. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.86.3602>>. Acesso em: 20 mar. 2016.

JOHN, S. *The Localization of Waves in Disordered Media*. **World Scientific**, p. 1–96, abr. 1990. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1142/9789814340687_001>. Acesso em: 03 abr. 2016. John, S. *The Localization of Waves in Disordered Media*. Publicado em: **Scattering And Localization Of Classical Waves In Random Media**. Series: Series on Directions in Condensed Matter Physics, WORLD SCIENTIFIC, Editado por SHENG, P., v. 8, pp. 1–96, 1990

KASUMOV, A. Yu. *et al. Thickness and low-temperature conductivity of DNA molecules*. **Appl. Phys. Lett.**, v. 84, n. 6, p. 1007–1009, fev. 2004. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.1644909>>. Acesso em: 15 mai. 2016.

KATSANOS, D. E.; EVANGELOU, S. N.; XIONG, S. J. *Quantum electron dynamics in periodic and aperiodic sequences*. **Phys. Rev. B**, v. 51, n. 2, p. 895–904, jan. 1995. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.51.895>>. Acesso em: 04 mai. 2016.

KAWAI, K.; KODERA, H.; OSAKADA, Y.; MAJIMA, T. *Sequence-independent and rapid long-range charge transfer through DNA*. **Nat. Chem.**, v. 1, p. 156–159, abr. 2009. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1038/nchem.171>>. Acesso em: 03 mai. 2016.

KAWARABAYASHI, T.; OHTSUKI, T. *Diffusion of electrons in random magnetic fields*. **Phys. Rev. B**, v. 51, n. 16, p. 10897-1–10897-8, abr. 1995. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.51.10897>>. Acesso em: 15 mai. 2016.

KIM, J. S. *et al. Strong electron-phonon coupling in the rare-earth carbide superconductor $La_2 C_3$* . **Phys. Rev. B**, v. 76, n. 1, p. 014516-1–014516-12, jul. 2007. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.76.014516>>. Acesso em: 01 mai. 2016.

KIRBY, B. J. *et al. Spin dynamics and magnon-phonon interactions in $Nd_{0.6}Sr_{0.4}MnO_3$* . **J. Mag. Mag. Mat.**, v. 302, n. 1, p. 237–243, jul. 2006. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.jmmm.2005.09.012>>. Acesso em: 04 jun. 2016.

KITTEL, C. **Introduction to Solid State Physics**. 8th. ed., California: John Willey Sons, Inc., 2005.

KLOTSAS, D.; RÖMER, R. A.; TURNER, M. S. *Electronic Transport in DNA*. **Biophys. J.**, v. 89, n. 4, p. 2187–2198, out. 2005. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1529/biophysj.105.064014>>. Acesso em: 15 mai. 2016.

KOPIAKIS, G.; KOMINEAS, S.; FLACH, S.; AUBRY, S. *Absence of Wave Packet Diffusion in Disordered Nonlinear Systems*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 100, n. 8, p. 084103-1–084103-4, fev. 2008. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.084103>>. Acesso em: 01 mai. 2016. PIKOVSKY, A. S.; SHEPELYANSKY, D. L. *Destruction of Anderson Localization by a Weak Nonlinearity*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 100, n. 9, p. 013906-1–013906-4, mar. 2008. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.094101>>. Acesso em: 01 mai. 2016. HAJNAL, D.; SCHILLING, R. *Delocalization-Localization Transition due to Anharmonicity*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 101, n. 12, p. 124101-1–124101-4, set. 2008. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.101.124101>>. Acesso em: 01

mai. 2016. LAHINI, Y. *et al.* *Anderson Localization and Nonlinearity in One-Dimensional Disordered Photonic Lattices*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 100, n. 1, p. 013906-1–013906-4, jan. 2008. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.100.013906>>. Acesso em: 01 mai. 2016.

KOPIidakis, G.; SOUKOULIS, C. M.; ECONOMOU, E. N. *Electron-phonon interactions and recurrence phenomena in one-dimensional systems*. **Phys. Rev. B**, v. 49, n. 10, p. 7036–7039, mar. 1994. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.49.7036>>. Acesso em: 25 fev. 2016.

KOPIidakis, G.; SOUKOULIS, C. M.; ECONOMOU, E. N. *Electron-phonon interaction, localization, and polaron formation in one-dimensional systems*. **Phys. Rev. B**, v. 51, n. 21, p. 15038–15052, jun. 1995. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.51.15038>>. Acesso em: 25 fev. 2016.

KOPIidakis, G.; SOUKOULIS, C. M.; ECONOMOU, E. N. *Localization and electron-phonon interactions in disordered systems*. **Europhys. Lett.**, v. 33, n. 6, p. 459–464, jan. 1996. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1209/epl/i1996-00362-7>>. Acesso em: 01 mai. 2016.

KRAMER, B.; MACKINNON, A. *Localization: theory and experiment*. **Rep. Prog. Phys.**, v. 56, n. 12, p. 1469–1564, 1993. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0034-4885/56/12/001>>. Acesso em: 20 jan. 2016.

KRAVCHENCO, S. V.; *et al.* *Electric Field Scaling at a $B = 0$ Metal-Insulator in Two Dimensions*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 77, n. 24, p. 4938–4941, dez. 1996. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.4938>>. Acesso em: 28 jan. 2016.

KRICH, J. J.; ASPURU-GUZI, A. *Scaling and Localization Lengths of a Topologically Disordered System*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 106, n. 15, p. 156405-1–156405-4, abr. 2011. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.106.156405>>. Acesso em: 03 abr. 2016.

KRIVOLAPOV, Y. *et al.* *Super-diffusion in optical realizations of Anderson localization*. **New J. Phys.**, v. 14, p. 043047-1–043047-15, abr. 2012. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/1367-2630/14/4/043047>>. Acesso em: 02 abr. 2016.

KUHL, U.; IZRAILEV, F. M.; KROKHIN, A. A.; STÖCKMANN, H. J. *Experimental observation of the mobility edge in a waveguide with correlated disorder*. **Applied Phys. Lett.**, v. 77, n. 5, p. 633–635, jul. 2000. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.127068>>. Acesso em: 27 jan. 2016.

KUMAR, A.; MURARI, N. M.; KATIYAR, R. S. *Observation of one magnon and magnon-phonon-electric dipole coupling in multiferroic bismuth ferrite thin films*. **Appl. Phys. Lett.**, v. 92, n. 15, p. 152907-1–152907-3, abr. 2008. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.2911732>>. Acesso em: 04 mai. 2016.

KUPER, C. G.; WHITFIELD, G. D. **Polarons and Excitons**. 1st. ed., New York: Plenum Press, 1963.

- KURODA, SHIN-ICHI *et al.* *ELECTRON NUCLEAR DOUBLE RESONANCE SPECTROSCOPY OF SOLITONS AND POLARONS IN CONJUGATED POLYMERS*. **Int. J. Mod. Phys. B**, v. 09, n. 03, p. 221–260, jan. 1995. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1142/S0217979295000124>>. Acesso em: 21 mar. 2016.
- LÄNGE, K.; RAPP, B. E.; RAPP, M. *Surface acoustic wave biosensors: a review*. **Anal. Bioanal. Chem.**, v. 391, n. 5, p. 1509–1519, jul. 2008. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/s00216-008-1911-5>>. Acesso em: 04 mai. 2016.
- LAZO, E.; DIEZ, E. *Conducting to non-conducting transition in dual transmission lines using a ternary model with long-range correlated disorder*. **Phys. Lett. A**, v. 374, n. 34, p. 3538–3545, jul. 2010. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.physleta.2010.06.031>>. Acesso em: 04 abr. 2016.
- LAZO, E.; DIEZ, E. *Conducting properties of classical transmission lines with Ornstein-Uhlenbeck type disorder*. **Phys. Lett. A**, v. 375, n. 21, p. 2122–2128, mai. 2011. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.physleta.2011.02.049>>. Acesso em: 04 abr. 2016.
- LAVARDA, F. C. *et al.* *Near resonant scattering from nonsymmetric dimers: Applications to substituted polyanilines*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 73, n. 9, p. 1267–1270, ago. 1994. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.73.1267>>. Acesso em: 25 jan. 2016.
- LEAN, E. G.; TSENG, C. C. *Nonlinear Effects in Surface Acoustic Waves*. **J. Appl. Phys.**, v. 41, n. 10, p. 3912–3917, set. 1970. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.1658386>>. Acesso em: 04 mai. 2016.
- LEE, P. A.; RAMAKRISHNAN, T. V. *Disordered electronic systems*. **Rev. Mod. Phys.**, v. 57, n. 2, p. 287–337, abr. 1985. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.57.287>>. Acesso em: 21 jan. 2016.
- LEFRANT, S. *et al.* *Raman scattering in $(CH)_x$ and $(CH)_x$ treated with bromine and iodine*. **Solid State Commun.**, v. 29, n. 3, p. 191–196, jan. 1979. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/0038-1098\(79\)91036-6](http://dx.doi.org/10.1016/0038-1098(79)91036-6)>. Acesso em: 11 mar. 2016.
- LEMARIÉ, G. *et al.* *Critical State of the Anderson Transition: Between a Metal and an Insulator*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 105, n. 9, p. 090601-1–090601-4, ago. 2010. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.105.090601>>. Acesso em: 02 abr. 2016.
- LI, M.; LIN, X. *Adapted Su-Schrieffer-Heeger Hamiltonian for polypyrrole*. **Phys. Rev. B**, v. 82, n. 15, p. 155141-1–155141-8, out. 2010. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.82.155141>>. Acesso em: 26 abr. 2016.
- LIKHACHEV, V. N.; ASTAKHOVA, T. Yu; VINOGRADOV, G. A. *“ELECTRON PING-PONG” ON A ONE-DIMENSIONAL LATTICE: MULTIPLE REFLECTIONS OF THE WAVE PACKET AND CAPTURE OF THE WAVE FUNCTION BY AN ACCEPTOR*. **Theor. Math. Phys.**, v. 176, n. 2, p. 1087–1099, ago. 2013. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/s11232-013-0090-5>>. Acesso em: 02 mai. 2016.

- LIMA, R. P. A.; da CRUZ, H. R.; CRESSONI, J. C.; LYRA, M. L. *Finite-size scaling of power-law bond-disordered Anderson models*. **Phys. Rev. B.**, v. 69, n. 16, p. 165117-1–165117-7, abr. 2004. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.69.165117>>. Acesso em: 04 abr. 2016.
- LIMA, M. P.; SILVA, G. M. *Dynamical evolution of polaron to bipolaron in conjugated polymers*. **Phys. Rev. B.**, v. 74, n. 22, p. 224304-1–224304-6, dez. 2006. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.74.224304>>. Acesso em: 18 mar. 2016.
- LIU, WEN-SHENG; CHEN, TAO; XIONG, SHI-JIE *Kosterlitz-Thouless-type metal-insulator transition in two-dimensional layered media with long-range correlated disorder*. **J. Phys.: Condens. Matter**, v. 11, p. 6883–6889, abr. 1999. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/11/36/306>>. Acesso em: 27 jan. 2016.
- LONG-YAN, G.; PEI-QING, T.; ZI-CONG, Z. *Electronic properties of one-dimensional systems with long-range correlated binary potentials*. **Chin. Phys. B.**, v. 20, n. 8, p. 087102-1–087102-8, mar. 2011. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/1674-1056/20/8/087102>>. Acesso em: 03 abr. 2016.
- LONGUET-HIGGINS, H. C.; SALEM, L. *The Alternation of Bond Lengths in Long Conjugated Chain Molecules*. **Proc. R. Soc. Lond. A**, v. 251, n. 1265, p. 172–185, mai. 1959. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1098/rspa.1959.0100>>. Acesso em: 11 mar. 2016.
- MACIÁ, E. *Electrical conductance in duplex DNA: Helical effects and low-frequency vibrational coupling*. **Phys. Rev. B**, v. 76, n. 24, p. 245123-1–245123-1, dez. 2007. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.76.245123>>. Acesso em: 15 mai. 2016.
- MACKINNON, A.; KRAMER, B. *One-Parameter Scaling of Localization Length and Conductance in Disordered Systems*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 47, n. 21, p. 1546–1549, nov. 1981. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.47.1546>>. Acesso em: 28 jan. 2016.
- MAKAROV, V. A.; VELARDE, M. G.; CHETVERIKOV, A. P.; EBELING, W. *Anharmonicity and its significance to non-Ohmic electric conduction*. **Phys. Rev. E**, v. 73, n. 7, p. 066626-1–066626-12, jun. 2006. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.73.066626>>. Acesso em: 01 mai. 2016.
- MALLAJOSYULA, S. S.; PATI, S. K. *Toward DNA Conductivity: A Theoretical Perspective*. **J. Phys. Chem. Lett.**, v. 1, n. 12, p. 1881–1894, jun. 2010. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1021/jz1003654>>. Acesso em: 03 mai. 2016.
- MALYSHEV, V. A.; RODRÍGUEZ, A.; DOMÍNGUEZ-ADAME, F. *Linear optical properties of one-dimensional Frenkel exciton systems with intersite energy correlations*. **Phys. Rev. B**, v. 60, n. 20, p. 14140–14146, nov. 1999. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.60.14140>>. Acesso em: 04 abr. 2016.
- MARCHAND, D. J. J. *et al. Sharp Transition for Single Polarons in the One-Dimensional Su-Schrieffer-Heeger Model*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 105, n. 6, p. 266605-1–266605-4, dez. 2010. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.105.266605>>. Acesso em: 01 mai. 2016.

- MARKOS, P. *Numerical Analysis of the Anderson Localization*. **Acta. Phys. Slov.**, v. 56, n. 5, p. 561–685, out. 2006. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.2478/v10155-010-0081-0>>. Acesso em: 10 jun. 2016.
- MAYER, A. P. *Surface acoustic waves in nonlinear elastic media*. **Phys. Rep.**, v. 256, n. 4–5, p. 237–366, mai. 1995. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/0370-1573\(94\)00088-K](http://dx.doi.org/10.1016/0370-1573(94)00088-K)>. Acesso em: 04 mai. 2016.
- MAZUMDAR, S.; DIXIT, S. N. *Electronic excited states in conjugated polymers*. **Synthetic Metals**, v. 28, n. 3, p. D463–D468, fev. 1989. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/0379-6779\(89\)90730-3](http://dx.doi.org/10.1016/0379-6779(89)90730-3)>. Acesso em: 20 mar. 2016.
- MEHTA, M. L. **Random Matrices**. 3rd. ed., Amsterdam: Elsevier, 2004.
- MCNEIL, R. P. G. *et al.* *On-demand single-electron transfer between distant quantum dots*. **Nature**, v. 477, p. 439–442, set. 2011. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1038/nature10444>>. Acesso em: 04 mai. 2016.
- MILDE, F.; RÖMER, R. A.; SCHREIBER, M.; USKI, V. *Multifractal analysis of the metal-insulator transition in anisotropic systems*. **Phys. Rev. B**, v. 55, n. 15, p. 9463–9469, abr. 1997. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.55.9463>>. Acesso em: 11 jun. 2016.
- MILDE, F.; RÖMER, R. A.; SCHREIBER, M.; USKI, V. *Energy-level statistics at the metal-insulator transition in anisotropic systems*. **Phys. Rev. B**, v. 61, n. 9, p. 6028–6035, mar. 2000. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.61.6028>>. Acesso em: 11 jun. 2016.
- MILDE, F.; RÖMER, R. A.; SCHREIBER, M.; USKI, V. *Critical properties of the metal-insulator transition in anisotropic systems*. **Eur. Phys. J. B**, v. 15, n. 4, p. 685–690, jun. 2000. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/s100510051173>>. Acesso em: 11 jun. 2016.
- MISHCHENKO, A. S.; NAGAOSA, N. *Electron-Phonon Coupling and a Polaron in the $t\hat{J}$ Model: From the Weak to the Strong Coupling Regime*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 93, n. 3, p. 036402-1–036402-4, jul. 2004. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.93.036402>>. Acesso em: 25 fev. 2016.
- MODUGNO, M. *Exponential localization in one-dimensional quasi-periodic optical lattices*. **New J. Phys.**, v. 11, p. 033023-1–033023-13, mar. 2009. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/1367-2630/11/3/033023>>. Acesso em: 02 abr. 2016.
- MORSE, P. M. *Diatomic Molecules According to the Wave Mechanics. II. Vibrational Levels*. **Phys. Rev.**, v. 34, n. 3, p. 57–64, jul. 1929. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRev.34.57>>. Acesso em: 27 mar. 2016.
- MOSTOVOY, M. V.; FIGGE, M. T.; KNOESTER, J. *Disorder-induced solitons in conjugated polymers*. **Eur. Phys. Lett.**, v. 38, n. 9, p. 687–692, jun. 1997. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1209/epl/i1997-00105-4>>. Acesso em: 24 mar. 2016.
- MOTT, N. F.; DAVIS, E. A. **Electronic Processes in Non-Crystalline Materials**. Oxford: Clarendon Press, 1971.

- MOTT, N. F. *Metal-insulator Transitions*. **Proc. R. Soc. Lond. A**, v. 382, p. 1–24, fev. 1982. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1098/rspa.1982.0086>>. Acesso em: 21 jan. 2016.
- MOTT, N. F.; TWOSE, W. D. *The theory of impurity conduction*. **Adv. Phys.**, v. 10, n. 38, p. 107–163, jun. 1961. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1080/00018736100101271>>. Acesso em: 29 jan. 2016.
- NALAMWAR, A. L.; EPSTEIN, M. *Surface acoustic waves in strained media*. **J. Appl. Phys.**, v. 47, n. 1, p. 43–48, ago. 1976. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.322293>>. Acesso em: 04 mai. 2016.
- NASCIMENTO, E. M.; de Moura, F. A. B. F.; LYRA, M. L. *Scaling laws for the transmission of random binary dielectric multilayered structures*. **Phys. Rev. B**, v. 76, n. 11, p. 115120-1–115120-6, set. 2007. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.76.115120>>. Acesso em: 04 abr. 2016.
- NAZARENO, H. N.; de BRITO, P. E. *Long-range interactions and nonextensivity in one-dimensional systems*. **Phys. Rev. B**, v. 60, n. 7, p. 4629–4634, ago. 1999. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.60.4629>>. Acesso em: 08 jun. 2016.
- NUNES, D. M.; NETO, A. R.; de MOURA, F. A. B. F. *Coherent magnon dynamics in ferromagnetic models with nonuniform magnetic field and correlated disorder*. **J. Mag. Mag. Mat.**, v. 410, p. 165–170, jul. 2016. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.jmmm.2016.03.026>>. Acesso em: 06 jun. 2016.
- 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, mar. 2016. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.ssc.2015.12.004>>. Acesso em: 04 mai. 2016.
- KIRBY, B. J. *et al.* *Spin dynamics and magnon-phonon interactions in $Nd_{0.6}Sr_{0.4}MnO_3$* . **J. Mag. Mag. Mat.**, v. 302, n. 1, p. 237–243, jul. 2006. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.jmmm.2005.09.012>>. Acesso em: 04 jun. 2016.
- PACZUSKI, M.; MASLOV, S.; BARK, P. *Avalanche dynamics in evolution growth, and depinning models*. **Phys. Rev. E**, v. 53, n. 1, p. 414–443, jan. 1996. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.53.414>>. Acesso em: 03 fev. 2016.
- PÁEZ, C. J.; REY-GONZÁLEZ, R.; SCHULZ, P. A. *Macroscopic localization lengths of vibrational normal modes in a heuristic DNA model*. **Phys. Rev. B**, v. 81, n. 2, p. 024203-1–024203-5, jan. 2010. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.81.024203>>. Acesso em: 15 mai. 2016.
- PARK, J. H. *et al.* *Measurement of a solid-state triple point at the metal-insulator transition in VO_2* . **Nature**, v. 500, p. 431–434, ago. 2013. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1038/nature12425>>. Acesso em: 10 jun. 2016.
- PEIXOTO, A. S.; DIAS, W. S.; LYRA, M. L.; de MOURA, F. A. F. *Wavepacket dynamics of coupled particles in aperiodic chains: Weakening of Anderson localization and local field effects*. **Physica A**, v. 395, p. 22–30, fev. 2014. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.physa.2013.10.039>>. Acesso em: 04 fev. 2016.

- PETERSEN, G. M.; SANDLER, N. *Anticorrelations from power-law spectral disorder and conditions for an Anderson transition*. **Phys. Rev. B.**, v. 87, n. 19, p. 195443–195443-5, mai. 2013. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.87.195443>>. Acesso em: 04 abr. 2016.
- PHILLIPS, P.; WU, H.-L. *Localization and Its Absence: A New Metallic State for Conducting Polymers*. **Science**, v. 252, n. 5014, p. 1805–1812, jun. 1991. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1126/science.252.5014.1805>>. Acesso em: 26 jan. 2016.
- PORATH, D.; BEZRYADIN, A.; de VRIES, S.; DEKKER, C. *Direct measurement of electrical transport through DNA molecules*. **Nature**, v. 403, p. 635–638, fev. 2000. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1038/35001029>>. Acesso em: 15 mai. 2016.
- PRONIN, K. A.; KAKHNOVSKII, Y. I.; BANDRAUK, A. D. *Nonlinear optical susceptibility of conjugated polymers in the SSH model: Four wave mixing*. **Synthetic Metals**, v. 57, n. 1, p. 3907–3910, abr. 1993. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/0379-6779\(93\)90533-3](http://dx.doi.org/10.1016/0379-6779(93)90533-3)>. Acesso em: 21 mar. 2016.
- REN, W.; WANG, J.; MA, Z.; GUO, H. *Dynamical conductance of model DNA sequences*. **J. Chem. Phys.**, v. 125, n. 16, p. 164704-1–164704-5, out. 2006. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.2359447>>. Acesso em: 15 mai. 2016.
- RODRIGUEZ, A.; VASQUEZ, L. J.; RÖMER, R. A. *Multifractal Analysis with the Probability Density Function at the Three-Dimensional Anderson Transition*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 102, n. 10, p. 106406-1–106406-4, mar. 2009. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.106406>>. Acesso em: 02 abr. 2016.
- RODRIGUEZ, A.; VASQUEZ, L. J.; SLEVIN, K.; RÖMER, R. A. *Critical Parameters from a Generalized Multifractal Analysis at the Anderson Transition*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 105, n. 4, p. 046403-1–046403-4, jul. 2010. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.105.046403>>. Acesso em: 02 abr. 2016.
- RODRIGUEZ, A.; VASQUEZ, L. J.; SLEVIN, K.; RÖMER, R. A. *Multifractal finite-size scaling and universality at the Anderson transition*. **Phys. Rev. B**, v. 84, n. 13, p. 134209-1–134209-16, out. 2011. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.84.134209>>. Acesso em: 02 abr. 2016.
- SALES, M. O.; ALBUQUERQUE, S. S.; de MOURA, F. A. B. F. *Energy transport in a one-dimensional harmonic ternary chain with Ornstein-Uhlenbeck disorder*. **J. Phys. Cond. Matt.**, v. 24, n. 49, p. 495401-1–495401-7, nov. 2012. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/24/49/495401>>. Acesso em: 04 abr. 2016.
- SALES, M. O.; de MOURA, F. A. B. F. *Numerical study of the one-electron dynamics in one-dimensional systems with short-range correlated disorder*. **Physica E**, v. 45, p. 97–102, ago. 2012. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.physe.2012.07.014>>. Acesso em: 04 abr. 2016.
- SALES, M. O.; de MOURA, F. A. B. F. *Electron-soliton dynamics in chains with cubic nonlinearity*. **J. Phys. Cond. Matt.**, v. 26, n. 41, p. 415401-1–415401-8, set. 2014. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/26/41/415401>>. Acesso em: 20 mai. 2016.

- SALES, M. O.; LYRA, M. L.; de MOURA, F. A. B. F.; FULCO, U. L.; ALBUQUERQUE, E. L. *Sub-diffusive electronic transport in a DNA single-strand chain with electron-phonon coupling*. **J. Phys. Cond. Matt.**, v. 27, n. 03, p. 035104-1–035104-8, jan. 2015. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/27/3/035104>>. Acesso em: 08 jun. 2016.
- SÁNCHEZ, A.; MACIÁ, E.; DOMÍNGUEZ-ADAME, F. *Suppression of localization in Kronig-Penney models with correlated disorder*. **Phys. Rev. B**, v. 49, n. 1, p. 147–157, jan. 1994. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.49.147>>. Acesso em: 03 fev. 2016.
- SANTOS, J. L. .L; SALES, M. O.; de MOURA, F. A. F. *Diffusive, super-diffusive and ballistic transport in the long-range correlated 1D Anderson model*. **Physica A**, v. 413, p. 31–41, nov. 2014. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.physa.2014.06.049>>. Acesso em: 13 jun. 2016.
- SANTOS, B.; VIANA, L. P.; LYRA, M. L.; de MOURA, F. A. F. *Diffusive, super-diffusive and ballistic transport in the long-range correlated 1D Anderson model*. **Solid Stat. Comm.**, v. 138, n. 12, p. 585–589, jun. 2006. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.ssc.2006.04.007>>. Acesso em: 04 jun. 2016.
- SCHERWITZL, R. *et al.* *Electric-Field Control of the Metal-Insulator Transition in Ultrathin NdNiO₃ Films*. **Adv. Mat.**, v. 22, n. 48, p. 5517–5520, out. 2010. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/adma.201003241>>. Acesso em: 10 jun. 2016.
- SCHWEITZER, L.; ZHAREKESHEV, I. Kh. *Scaling of level statistics and critical exponent of disordered two-dimensional symplectic systems*. **J. Phys.: Condens. Matter**, v. 9, n. 33, p. L441–L445, mai. 1997. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/9/33/001>>. Acesso em: 28 jan. 2016.
- SCHUBERT, G.; WEIßE, A.; FEHSKE, H. *Delocalisation transition in chains with correlated disorder*. **Physica B**, v. 359–361, p. 801–803, abr. 2005. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.physb.2005.01.232>>. Acesso em: 03 abr. 2016.
- SCOTT, A. *Davydovs soliton*. **Phys. Rep.**, v. 217, n. 1, p. 1–67, ago. 1992. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/0370-1573\(92\)90093-F](http://dx.doi.org/10.1016/0370-1573(92)90093-F)>. Acesso em: 01 mai. 2016.
- SENTHILKUMAR, K. *et al.* *Absolute Rates of Hole Transfer in DNA*. **J. Am. Chem. Soc.**, v. 127, n. 42, p. 14894–14903, set. 2005. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1021/ja054257e>>. Acesso em: 15 mai. 2016.
- SHANNON, C. E. *Communication Theory of Secrecy Systems*. **Bell Labs Tech. J.**, v. 28, n. 4, p. 656–715, out. 1949. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/j.1538-7305.1949.tb00928.x>>. Acesso em: 04 jun. 2016.
- SHILTON, J. M. *et al.* *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. L531–L539, ago. 1996. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/8/38/001>>. Acesso em: 04 mai. 2016.
- SHIMA, H.; NOMURA, T.; NAKAYAMA, T. *Localization-delocalization transition in one-dimensional electron systems with long-range correlated disorder*. **Phys. Rev. B**, v. 70, n. 7, p. 075116-1–075116-5, ago. 2004. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.70.075116>>. Acesso em: 03 abr. 2016.

- SHIMOI, Y.; ABE, S. *Competition between polarons and bipolarons in nondegenerate conjugated polymers*. **Phys. Rev. B**, v. 50, n. 20, p. 14782–14784, nov. 1994. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.50.14781>>. Acesso em: 20 mar. 2016.
- SHIMOI, Y.; ABE, S.; HARIGAYA, K. *THEORY OF OPTICAL ABSORPTION IN DOPED CONJUGATED POLYMERS*. **Mol. Cryst. Liq. Cryst.**, v. 267, n. 1, p. 329–334, set. 1995. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1080/10587259508034012>>. Acesso em: 24 mar. 2016.
- SHINWARI, M. W.; DEEN, M. J.; STARIKOV, E. B.; CUNIBERTI, G. *Electrical Conductance in Biological Molecules*. **Adv. Funct. Mater.**, v. 20, n. 12, p. 1865–1883, jun. 2010. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/adfm.200902066>>. Acesso em: 15 mai. 2016.
- SIL, S.; KARMAKAR, S. N.; MOITRA, R. K. *Extended electronic in disordered 1-d lattices: an example*. **Phys. Lett. A**, v. 183, n. 4, p. 344–347, dez. 1993. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/0375-9601\(93\)90468-F](http://dx.doi.org/10.1016/0375-9601(93)90468-F)>. Acesso em: 03 fev. 2016.
- SILVA, G. M. *Electric-field effects on the competition between polarons and bipolarons in conjugated polymers*. **Phys. Rev. B**, v. 61, n. 16, p. 10777–10781, apr. 2000. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.61.10777>>. Acesso em: 20 mar. 2016.
- SIMON, S. H. *Coupling of surface acoustic waves to a two-dimensional electron gas*. **Phys. Rev. B**, v. 54, n. 19, p. 13878–13884, nov. 1996. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.54.13878>>. Acesso em: 04 mai. 2016.
- SLEVIN, K.; MARKOS, P.; OHTSUKI, T. *Reconciling Conductance Fluctuations and Scaling Theory of Localization*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 86, n. 16, p. 3594–3597, abr. 2001. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.86.3594>>. Acesso em: 28 jan. 2016.
- SLEVIN, K.; OHTSUKI, T. *Corrections to Scaling at the Anderson Transition*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 82, n. 2, p. 382–385, jan. 1999. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.82.382>>. Acesso em: 28 jan. 2016.
- SLEVIN, K.; OHTSUKI, T.; KAWARABAYASHI, T. *Topology Dependent Quantities at the Anderson Transition*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 84, n. 17, p. 3915–3918, abr. 2000. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.84.3915>>. Acesso em: 28 jan. 2016.
- SLOBODNIK, A. J. *Surface Acoustic Waves and SAW Materials*. **Proc. IEEE**, v. 64, n. 5, p. 581–595, mai. 1976. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1109/PROC.1976.10180>>. Acesso em: 04 mai. 2016.
- SOOS, Z. G.; GALVÃO, D. S.; ETEMAD, S. *Fluorescence and excited-state structure of conjugated polymers*. **Advanced Materials**, v. 6, n. 4, p. 280–287, abr. 1994. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/adma.19940060404>>. Acesso em: 20 mar. 2016.
- STARIKOV, E. B. *Electronâphonon coupling in DNA: a systematic study*. **Phil. Mag.**, v. 85, n. 29, p. 3435–3462, out. 2005. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1080/14786430500157110>>. Acesso em: 15 mai. 2016.

- STEINIGEWEG, R.; NIEMEYER, H.; GEMMER, J. *Transport in the three-dimensional Anderson model: an analysis of the dynamics at scales below the localization length*. **New J. Phys.**, v. 12, p. 113001-1–113001-22, nov. 2010. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/1367-2630/12/11/113001>>. Acesso em: 02 abr. 2016.
- STROBL, C. J. *et al.* *Carbon nanotube alignment by surface acoustic waves*. **Appl. Phys. Lett.**, v. 85, n. 8, p. 1427–1429, ago. 2004. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.1787159>>. Acesso em: 04 mai. 2016.
- STRUTT, J. W. (*Lord Rayleigh*) *On Waves Propagated along the Plane Surface of an Elastic Solid*. Publicado em *Classics of Elastic Wave Theory*. **Soc. Expl. Geophys.**, p. 243–250, 1885. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1190/1.9781560801931.ch3i>>. Acesso em: 04 abr. 2016.
- SU, W. P.; SCHRIEFFER, J. R. *Soliton dynamics in polyacetylene*. **Proc. Natl. Acad. Sci. USA**, v. 77, n. 10, p. 5626–5629, out. 1980. Disponível em: <<http://www.pnas.org/content/77/10/5626.short>>. Acesso em: 16 mar. 2016.
- SU, W. P.; SCHRIEFFER, J. R.; HEEGER, A. J. *Solitons in Polyacetylene*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 42, n. 25, p. 1698–1701, jun. 1979. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.42.1698>>. Acesso em: 15 fev. 2016. SU, W. P.; SCHRIEFFER, J. R.; HEEGER, A. J. *Soliton excitations in polyacetylene*. **Phys. Rev. B**, v. 22, n. 4, p. 2099–2111, ago. 1980. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.22.2099>>. Acesso em: 15 fev. 2016. HEEGER, A. J.; KIVELSON, S.; SCHRIEFFER, J. R.; SU, W. P. *Solitons in conducting polymers*. **Rev. Mod. Phys.**, v. 60, n. 3, p. 781–850, jul. 1988. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.60.781>>. Acesso em: 15 fev. 2016.
- SUN, Z. *et al.* *Dynamical study of polaron-bipolaron scattering in conjugated polymers*. **Org. Elet.**, v. 11, p. 279–284, jan. 2010. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.orgel.2009.11.006>>. Acesso em: 20 mar. 2016.
- TAKAHASHI, A. *Significant enhancement of optical nonlinearity by quantum lattice fluctuations in π -conjugated polymers*. **Phys. Rev. B**, v. 51, n. 22, p. 16479–16482, jun. 1995. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.51.16479>>. Acesso em: 21 mar. 2016.
- TALYANSKII, V. I. *et al.* *Single-electron transport in a one-dimensional channel by high-frequency surface acoustic waves*. **Phys. Rev. B**, v. 56, n. 23, p. 15180–15184, dez. 1997. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.56.15180>>. Acesso em: 04 mai. 2016.
- TARAS-SEMCHUK, D.; EFETOV, K. B. *Influence of long-range disorder on electron motion in two dimensions*. **Phys. Rev. B**, v. 64, p. 115301-1–115301-16, ago. 2001. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.64.115301>>. Acesso em: 27 jan. 2016.
- TERAMOTO, T. *et al.* *The observation of strong dynamic electron-phonon couplings due to a breather state in trans-polyacetylene*. **Phys. Stat. Soli.**, v. 6, n. 1, p. 311–314, jan. 2009. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1002/pssc.200879894>>. Acesso em: 26 abr. 2016.

- THOULESS, D. J. *Electrons in disordered systems and the theory of localization*. **Phys. Rep.**, v. 13C, n. 3, p. 93–142, out. 1974. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1016/0370-1573\(74\)90029-5](http://dx.doi.org/10.1016/0370-1573(74)90029-5)>. Acesso em: 28 jan. 2016.
- THOULESS, D. J. *Localization by a with Slowly Varying Period*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 61, n. 18, p. 2141–2143, out. 1988. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.61.2141>>. Acesso em: 03 fev. 2016.
- THOULESS, D. *ANDERSON LOCALIZATION IN THE SEVENTIES AND BEYOND*. **Int. J. Mod. Phys. B**, v. 24, n. 12–13, p. 1507–1525, out. 2010. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1142/S0217979210064496>>. Acesso em: 03 abr. 2016.
- TIAN, C.; ALTLAND, A. *Theory of localization and resonance phenomena in the quantum kicked rotor*. **New J. Phys.**, v. 12, p. 043043–1–043043–34, abr. 2010. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/1367-2630/12/4/043043>>. Acesso em: 02 abr. 2016.
- TODA, M. *Vibration of a Chain with Nonlinear Interaction*. **J. Phys. Soc. Jap.**, v. 22, n. 2, p. 431–436, fev. 1967. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1143/JPSJ.22.431>>. Acesso em: 26 mar. 2016. TODA, M. *Wave Propagation in Anharmonic Lattices*. **J. Phys. Soc. Jap.**, v. 23, n. 3, p. 501–506, set. 1967. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1143/JPSJ.23.501>>. Acesso em: 26 mar. 2016.
- TODA, M. *Waves in Nonlinear Lattice*. **Supp. Prog. Theo. Phys.**, v. 45, p. 174–200, 1970. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1143/PTPS.45.174>>. Acesso em: 26 mar. 2016.
- TODA, M. *Studies of a non-linear lattice*. **Phys. Rep.**, v. 18, n. 1, p. 1–124, 1975. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0370157375900186>>. Acesso em: 26 mar. 2016.
- TODA, M. **Theory of Nonlinear Lattices**. **Springer Series in Solid-State Sciences**, v. 20, 2nd. ed. Berlin: Springer-Verlag, New York-London-Paris-Tokyo: Heidelberg, 1989. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/978-3-642-83219-2>>. Acesso em: 26 mar. 2016.
- TRIC, C. *Planar Vibrations of Carbon Skeleton of Polyenes*. **J. Chem. Phys.**, v. 51, p. 4778–4786, fev. 1969. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.1671866>>. Acesso em: 11 mar. 2016.
- TROISI, A.; ORLANDI, G. *Hole Migration in DNA: a Theoretical Analysis of the Role of Structural Fluctuations*. **J. Phys. Chem. B**, v. 106, n. 8, p. 2093–2101, fev. 2002. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1021/jp0133182>>. Acesso em: 15 mai. 2016.
- TSONIS, A. A. **Chaos: From Theory to Applications**, 1st. ed., New York: Springer, 1992. Publicado Originalmente por Plenum Press, New York em 1992.
- VARRIABLE, M. C. **Transição de localização em potenciais aleatórios com correlações de longo alcance**. Tese (Doutorado) — UFRGS, Porto Alegre, 1994.
- VASQUEZ, L. J.; RODRIGUEZ, A.; RÖMER, R. A. *Multifractal analysis of the metal-insulator transition in the three-dimensional Anderson model. I. Symmetry relation under typical averaging*. **Phys. Rev. B**, v. 78, n. 19, p. 195106–1–195106–10, nov. 2008. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.78.195106>>. Acesso em: 02 abr. 2016.

- VELARDE, M. G. *From polaron to soliton: The addition of nonlinear elasticity to quantum mechanics and its possible effect upon electric transport.* **J. Comp. Appl. Math.**, v. 233, n. 6, p. 1432–1445, jan. 2010. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1016/j.cam.2008.07.058>>. Acesso em: 11 mar. 2016.
- VELARDE, M. G.; EBELING, W.; CHETVERIKOV, A. P. *ON THE POSSIBILITY OF ELECTRIC CONDUCTION MEDIATED BY DISSIPATIVE SOLITONS.* **Int. J. Bifurcation and Chaos**, v. 15, n. 1, p. 245–251, jan. 2005. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1142/S0218127405012144>>. Acesso em: 29 fev. 2016.
- VELARDE, M. G.; EBELING, W.; CHETVERIKOV, A. P. *Local electron distributions and diffusion in anharmonic lattices mediated by thermally excited solitons.* **Eur. Phys. J. B**, v. 70, n. 2, p. 217–227, jul. 2009. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2009-00224-2>>. Acesso em: 01 mai. 2016.
- VELARDE, M. G.; EBELING, W.; CHETVERIKOV, A. P. *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, ago. 2012. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2012-30276-x>>. Acesso em: 02 mai. 2016.
- VELARDE, M. G.; EBELING, W.; CHETVERIKOV, A. P. *NUMERICAL EVIDENCE OF SOLITON-MEDIATED ELECTRON PAIRING IN HEATED ANHARMONIC CRYSTAL LATTICES.* **Int. J. Bifurcation and Chaos**, v. 21, n. 6, p. 1595–1600, jun. 2011. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1142/S021812741102929X>>. Acesso em: 11 mar. 2016.
- VELARDE, M. G.; EBELING, W.; CHETVERIKOV, A. P. *Two-Dimensional Anharmonic Crystal Lattices: Solitons, Solitons, and Electric Conduction.* **Springer Proc. Phys.**, v. 145, p. 3–13, mar. 2014. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-319-00297-2_1>. Acesso em: 11 mar. 2016.
- VELARDE, M. G.; EBELING, W.; HENNIG, D.; NEIßNER, C. *ON THE POSSIBILITY OF ELECTRIC CONDUCTION MEDIATED BY DISSIPATIVE SOLITONS.* **Int. J. Bifurcation and Chaos**, v. 16, n. 4, p. 1035–1039, abr. 2006. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1142/S0218127406015283>>. Acesso em: 29 fev. 2016.
- VELARDE, M. G.; NEIßNER, C. *SOLITON-MEDIATED ELECTRON PAIRING.* **Int. J. Bifurcation and Chaos**, v. 18, n. 3, p. 885–890, mar. 2008. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1142/S0218127408020744>>. Acesso em: 11 mar. 2016.
- VEKHTER, B. G.; RATNER, M. A. *Spatial and temporal decay of localized electrons in solids: One-dimensional model.* **J. Chem. Phys.**, v. 101, n. 11, p. 9710–, set. 1994. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.467936>>. Acesso em: 08 jun. 2016. VEKHTER, B. G.; RATNER, M. A. *Energy and charge trapping by localized vibrations: Electron-vibrational coupling in anharmonic lattices.* **Phys. Rev. B**, v. 51, n. 6, p. 3469–3475, fev. 1995. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.51.3469>>. Acesso em: 08 jun. 2016.
- VOS, F. L. J.; AALBERTS, D. P.; van SAARLOOS, W. *Su-Schrieffer-Heeger model applied to chains of finite length.* **Phys. Rev. B**, v. 53, n. 22, p. 14922-1–14922-7, jun. 1996. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.53.14922>>. Acesso em: 01 mai. 2016.

- WAFFENSCHMIDT, S.; PFLEIDERER, C.; LÖHNEYSEN, H. V. *Critical Behavior of the Conductivity of Si:P at the Metal-Insulator Transition under Uniaxial Stress*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 83, n. 15, p. 3005–3008, out. 1999. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.83.3005>>. Acesso em: 28 jan. 2016.
- WAGNER, M. *et al.* *Energy transport in disordered oscillatory systems*. **Phil. Mag. B**, v. 65, n. 2, p. 273–287, jul. 1992. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1080/13642819208217902>>. Acesso em: 04 mai. 2016.
- WEGNER, F. *Electrons in disordered systems. Scaling near the mobility edge*. **Zeits. Phys. B Condens. Matt.**, v. 25, n. 4, p. 327–337, dez. 1976. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/BF01315248>>. Acesso em: 28 jan. 2016.
- WEGNER, F. *Inverse Participation Ratio in $2 + \varepsilon$ Dimensions*. **Zeits. Phys. B Condens. Matt.**, v. 36, n. 3, p. 209–214, set. 1976. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1007/BF01325284>>. Acesso em: 04 jun. 2016.
- WEI, J. H.; WANG, L. X.; CHAN, K. S.; YAN, Y. J. *Trapping and hopping of bipolarons in DNA: Su-Schrieffer-Heeger model calculations*. **Phys. Rev. B**, v. 72, n. 6, p. 064304–1–064304–5, ago. 2005. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.72.064304>>. Acesso em: 26 abr. 2016.
- WELLEIN, G.; RÖDER, H.; FEHSKE, H. *Polarons and bipolarons in strongly interacting electron-phonon systems*. **Phys. Rev. B**, v. 53, n. 15, p. 9666–9675, abr. 1996. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.53.9666>>. Acesso em: 25 fev. 2016.
- WERPACHOWSKA, A.; OLAYA-CASTRO, A. *Comment on “Excitons in Molecular Aggregates with Lévy-Type Disorder: Anomalous Localization and Exchange Broadening of Optical Spectra”*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 109, n. 25, p. 259701–1–259701–1, dez. 2012. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.109.259701>>. Acesso em: 04 abr. 2016.
- WINFREE, E.; LIU, F.; WENZLER, L. A.; SEEMAN, N. C. *Design and self-assembly of two-dimensional DNA crystals*. **Nature**, v. 394, p. 539–544, ago. 1998. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1038/28998>>. Acesso em: 15 mai. 2016.
- WIXFORTH, A.; SCRIBA, J.; WASSERMEIER, M.; KOTTHAUS, J. P. *Surface acoustic waves on GaAs/Al_xGa_{1-x}As heterostructures*. **Phys. Rev. B**, v. 40, n. 11, p. 7884–7887, out. 1989. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.40.7874>>. Acesso em: 04 mai. 2016.
- WOHLGENANT, M.; JIANG, X. M.; VARDENY, Z. V. *Confined and delocalized polarons in π -conjugated oligomers and polymers: A study of the effective conjugation length*. **Phys. Rev. B**, v. 69, p. 241204–1–241204–4, jun. 2004. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.69.241204>>. Acesso em: 24 mar. 2016.
- WOODS, L. M. *Magnon-phonon effects in ferromagnetic manganites*. **Phys. Rev. B**, v. 65, n. 1, p. 014409–1–014409–7, jan. 2002. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.65.014409>>. Acesso em: 04 jun. 2016.

WU, H. L.; PHILLIPS, P. W. *Polyaniline is a random-dimer model: A new transport mechanism for conducting polymers*. **Phys. Rev. Lett.**, v. 66, n. 10, p. 1366–1369, mar. 1991. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.66.1366>>. Acesso em: 16 abr. 2016.

XU, B.; ZHANG, P.; LI, X.; TAO, N. *Direct Conductance Measurement of Single DNA Molecules in Aqueous Solution*. **Nano Lett.**, v. 4, n. 6, p. 1105–1108, mai. 2004. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1021/nl0494295>>. Acesso em: 15 mai. 2016.

YAMADA, H. *ELECTRONIC LOCALIZATION PROPERTIES OF A DOUBLE STRAND OF DNA: A SIMPLE MODEL WITH LONG-RANGE CORRELATED HOPPING DISORDER*. **Int. J. Mod. Phys. B**, v. 18, n. 12, p. 1697–1716, mai. 2004. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1142/S0217979204024884>>. Acesso em: 15 mai. 2016.

YOMOSA, S. *Solitary excitations in muscle proteins*. **Phys. Rev. A**, v. 32, n. 3, p. 1752–1758, set. 1985. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.32.1752>>. Acesso em: 08 jun. 2016.

ZALLEN, R. **The Physics of Amorphous Solids**. 1st. ed. New York: A Wiley-Interscience, 1983.

ZAVT, G. S.; WAGBER, M.; LÜTZE, A. *Anderson localization and solitonic energy transport in one-dimensional oscillatory systems*. **Phys. Rev. E**, v. 47, n. 6, p. 4108–4119, jun. 1993. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevE.47.4108>>. Acesso em: 04 mai. 2016.

ZHANG, G. P. *et al.* *Effect of disorder with long-range correlation on transport in graphene nanoribbon*. **J. Phys. Cond. Matt.**, v. 24, n. 23, p. 235303-1–235303-6, mai. 2012. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/24/23/235303>>. Acesso em: 03 abr. 2016.

ZHANG, G. P.; XIONG, S. J. *et al.* *Localization-delocalization transition in one-dimensional system with long-range correlated diagonal disorder*. **Eur. Phys. J. B**, v. 29, n. 3, p. 491–495, mai. 2002. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2002-00330-7>>. Acesso em: 16 abr. 2016.

ZHAO, Y.; DUAN, S.; ZHANG, W. *(De)localization and the mobility edges in a disordered double chain with long-range intrachain correlation and short-range interchain correlation*. **J. Phys. Cond. Matt.**, v. 24, n. 24, p. 245502-1–245502-8, mai. 2012. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.78.035209>>. Acesso em: 03 abr. 2016.

ZHAO, H.; YAO, Y.; AN, Z.; WU, C. Q. *Dynamics of polarons in conjugated polymers: An adaptive time-dependent density-matrix renormalization-group study*. **Phys. Rev. B**, v. 78, n. 3, p. 035209-1–035209-6, jul. 2008. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.78.035209>>. Acesso em: 20 mar. 2016.

ZHAO, H. *et al.* *Correlation effects on the dynamics of bipolarons in nondegenerate conjugated polymers*. **J. Chem. Phys.**, v. 130, n. 23, p. 234908-1–234908-5, jun. 2009. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1063/1.3155207>>. Acesso em: 20 mar. 2016.

ZHONG, A.; ZHAN-JIE, L.; YING, L.; YOU-CHENG, L. *Two-dimensional localized modes in conjugated polymers: the nonlinear electron-phonon coupling effect*. **Chin. Phys. Soc.**, v. 9, n. 1, p. 37–41, jan. 2000. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1088/1009-1963/9/1/008>>. Acesso em: 24 mar. 2016.

Publicações

ABSORPTION SPECTRA AND LEVEL SPACING STATISTICS IN A TERNARY ALLOY WITH AN ORNSTEIN–UHLENBECK DISORDER DISTRIBUTION

M. O. SALES*, T. F. ASSUNÇÃO*, S. S. ALBUQUERQUE†
and F. A. B. F. DE MOURA*‡

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

*†Curso de Física
Universidade Federal de Alagoas Campus Arapiraca – Av.
Manoel Severino Barbosa, s/n, Bom Sucesso – Arapiraca – AL
CEP 57309-005, Brazil
‡fidelis@fis.ufal.br*

Received 22 May 2013

Accepted 15 August 2013

Published 20 September 2013

In this paper, we study the dynamics of a one-electron in a one-dimensional (1d) alloy with a correlated Ornstein–Uhlenbeck (OU) disorder distribution. The model considered here corresponds to an alloy with three types of atoms where the position of each atom is obtained using a stochastic rule based on the OU process. We analyze in detail the effect of this correlated disorder in the optical absorption spectrum and the level spacing statistics near the band center. Our results reveal a new collection of optical absorption peaks. We explain in details the appearance of each peak. Our calculations about the level spacing's distribution reveals a Poisson distribution thus contradicting previous statements about the existence of extended states in ternary electronic models with correlated disorder distribution.

Keywords: One-electron; correlated disorder; wave-packet.

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

1. Introduction

The dynamics of a one-electron in disordered lattices is a key issue which has attracted the scientific interest during several decades.^{1–24} According to the Anderson scaling theory there are no extended eigenstates in low-dimensional systems for any degree of uncorrelated disorder. Since the end of 1980s, it has been shown that low-dimensional disordered systems can support extended states or a

‡Corresponding author.

localization–delocalization transition in the presence of short- or long-range correlations in the disorder distribution.^{25–48} Furthermore, the theoretical prediction that it is possible to see the localization in a random multilayered filter^{49,50} opened a wide field to investigate the effects of correlated disorder in optical systems. The theoretical formalisms of random dielectric multilayers can be mapped on the one-electron Hamiltonian in a disordered media with close connections with the random dimers and off-diagonal disorder versions of the Anderson model.⁵¹ The effect of correlated disorder within general transport problems, not only for models with one-electron, became a very interesting field of study. For example, it was studied the effects of correlated disorder on the magnon eigenstates in random ferromagnetic^{52,53} and collective vibrational motion of one-dimensional (1d) disordered harmonic chains.^{54–58} In both cases, it was demonstrated that the correlated disorder lead to a new set of nonscattered modes. In general, previous works about correlated disorder were done considering systems in which the site energies are uniformly distributed in a finite range $[-W, W]$. Some authors^{44,45,59–61} have considered models where the on-site energy can assume two or three different values i.e., the binary and ternary models, respectively. In particular, the Anderson model with long-range correlated disorder chosen as a ternary sequence was studied in Ref. 45. If the sequence of the on-site energies is generated totally random, the system is an insulator. Nevertheless, by creating a ternary diagonal disorder with long-range correlations, it was observed a localized–delocalized phase transition.⁴⁵ The effect of long-range correlations in the sequence of capacitances of classical transmission lines (TL) has been studied by Lazo and Diez.^{59,60} To generate the ternary correlated distribution of capacitances it was used the Fourier filtering method⁵⁹ and also the Ornstein–Uhlenbeck (OU) process.⁶⁰ In both cases, it was observed a transition from nonconducting to conducting state of the TL induced by strong correlations. More recently, a 1d classical ternary harmonic chain with the mass distribution constructed from an OU process was studied.⁶¹ The localization aspects of all vibrational eigenstates were obtained by using the transfer matrix formalism. The authors concluded that only the zero frequency mode can propagate through the chain, thus contradicting previous works.^{45,59,60}

Moreover, the effect of correlated disorder on the optical spectroscopy properties^{62–68} is a key problem in the context of condensed matter physics. Usually, it is well-known that the optical spectroscopy fails in detecting localization–delocalization transitions. However, in Ref. 64 it was numerically reported an anomalous behavior of the absorption spectrum in a 1d lattice with long-range correlated diagonal disorder. The double-peak absorption spectrum found is the unique spectroscopic tool to monitor the Anderson transition. Furthermore, in Ref. 65 a double-peak absorption spectrum was numerically observed in 1d lattice with long-range off-diagonal correlated disorder. In Ref. 66, a detailed study about optical properties in 1d models with heavy-tailed Levy disorder distribution was done. The authors found a broadening of optical line and a nonuniversal scaling of the distribution of exciton localization lengths. The scaling of the optical absorption bandwidth and the

nonuniversality of the localization length within models with Levy disorder distribution were re-visited in Refs. 67 and 68. We would like to stress that from the best of our knowledge, the study of optical spectroscopy properties in low-dimensional systems with ternary correlated disorder is completely absent in the literature.

We emphasize that the existence or nonexistence of a phase transition in ternary models with correlated disorder represents an interesting and controversial issue^{45,59–61} with considerable interest from the experimental and theoretical point of view. The possibility to generate real systems with a ternary correlated disorder can be a possible tool to compare theory and experiment procedures and also allows designing new materials with adjustable properties. However, a more detailed statistical analysis of the eigenmodes and a description of the optical properties in electronic ternary models is still absent. In this paper, we will provide some advances along these lines. We will study the optical absorption and the levels spacing distribution in 1d models with a ternary correlated disorder distribution. Here, we will study a 1d model with a ternary diagonal disorder distribution following the OU process. We construct the ternary diagonal disorder distribution by initially generating the OU process and mapping it into a sequence of three different values. The probability of each value is controlled by a fixed parameter b . In that way, we will generate a ternary diagonal potential with long-range correlations. We perform exact numerical diagonalization to compute the level spacing distribution and the optical absorption spectrum. Our results show that the level spacing distribution near the band center shows a well defined Poisson distribution. This result indicates that all eigenstates are localized thus contradicting previous works that pointed out the existence of extended states in models with ternary diagonal correlated disorder.⁴⁵ Within the context of optical absorption spectrum our results show a set of unexpected peaks within absorption spectrum. We explain in detail the origin of each peak.

2. Model and Formalism

We consider a tight-binding one-electron Hamiltonian with hopping J and on-site disorder distribution ϵ_n ,⁶⁹

$$H = \sum_{n=1}^N \epsilon_n |n\rangle\langle n| - J \sum_{n=1}^{N-1} (|n\rangle\langle n+1| + |n-1\rangle\langle n|), \quad (1)$$

where $|n\rangle$ is a Wannier state localized at site n with the on-site energy ϵ_n . The inter-site coupling J is restricted to nearest-neighbors and assumed to be uniform over the entire lattice ($J = 1$). The source of disorder is the stochastic fluctuations of the on-site terms, which we are going to consider to follow the OU process.^{60,61} The OU process is defined by the stochastic differential equation:

$$\frac{dx}{dt} = -\gamma x(t) + \sqrt{C}\beta(t), \quad (2)$$

where γ is the viscosity coefficient, C is the diffusion coefficient and $\beta(t)$ is the stochastic term.^{60,61} $\beta(t)$ is a Gaussian white noise generated by the Box–Muller process with the following properties: $\langle\beta(t)\rangle = 0$ and $\langle\beta(t)\beta(t\tau)\rangle = \delta(\tau)$. This stochastic process contains correlations between each step defined as $\langle x(t)x(t\tau)\rangle = \frac{C}{2\gamma}e^{-\gamma\tau}$.^{60,61} In order to generate the diagonal disorder from the OU process we will consider the numerical formalism obtained in Ref. 70 based on the discrete version of Eq. (2). In the discrete form, $x(t)$ is written as x_n where n denotes the time step number ($t = n\Delta t$). Therefore, the discrete form of Eq. (2) is given by⁷⁰

$$x_{n+1} = (e^{-\gamma\Delta t})x_n + \left[\sqrt{\frac{C}{2\gamma}(1 - e^{-2\gamma\Delta t})} \right] \beta_n. \quad (3)$$

Using the Box–Muller algorithm, we calculate β_n in the following way

$$\beta_n = \left(\sqrt{2 \ln \frac{1}{r_n}} \right) \cos 2\pi a_n, \quad (4)$$

where r_n and a_n are uniform random numbers defined in the interval $[0, 1]$. We have normalized x_n in order to impose zero average and keep the variance equal to unity. Following Refs. 60 and 61, we will consider $C = \gamma^2$ and, therefore, the degree of correlation of the OU process becomes controlled by a single parameter γ . For $\gamma \rightarrow \infty$ the OU sequence evolves into the Gaussian white noise. For $\gamma \rightarrow 0$ the degree of correlation of the disordered sequence will increase. Using the normalized sequence x_n generated by OU process, we will construct a ternary on-site energy distribution as follows

$$\epsilon_n = \begin{cases} -\zeta & \text{if } x_n < -b, \\ 0 & \text{if } -b \leq x_n \leq b, \\ \zeta & \text{if } x_n > b, \end{cases} \quad (5)$$

where $b > 0$ controls the probability of each possible value of the on-site energy. The width of the disorder distribution depends on the value of ζ , a tunable parameter.^{60,61}

2.1. Magnitudes of interest

In order to investigate the absorption spectrum and the level spacing distribution for this model we perform an exact diagonalization procedure on finite chains. The absorption spectrum is defined as,^{64,65}

$$A(E) = \frac{1}{N} \sum_{\beta} \delta(E - E_{\beta}) F_{\beta}, \quad (6)$$

where F_{β} is the oscillator strength associated with the eigenvalue β , namely $F_{\beta} = [\sum_n \psi_n(E_{\beta})]^2$. When the off-diagonal term is negative and the diagonal is a disordered uncorrelated distribution, the eigenstates with higher oscillator strength are those at the bottom of the band. Moreover, we will analyze the level spacing

statistics near the band center. In one-electron systems, localized states are uncorrelated in energy and distributed following a Poisson law $P(s) = e^{-s}$, where s is the level spacing measured in units of the mean spacing. In contrast, delocalized eigenfunctions repel each other and their level spacing distribution assumes the Wigner form $P(s) \propto se^{-Cs^2}$.^{71,72} At the Anderson transition a new universal critical statistics intermediate between Wigner and Poisson has been suggested as a consequence of the multifractality of critical wave functions.⁷³ To obtain the level spacing distribution, we used an energy window near the band center $(-0.5, 0.5)$. A spectral unfolding procedure was employed to keep the average level spacing equal to unity in each segment of the energy window.⁷³

3. Results and Discussions

To solve numerically Eq. (6) we used $N = 10\,000$ sites, $\zeta = 1$ and 100 realizations of disorder for each value of γ and b . Figures 1 and 2 show the output of these calculations. We observe that for $b \gg 0$ and all γ values considered here, the absorption spectrum displays a single peak slightly above the lower band edge $E = -2$ of the periodic lattice. Our results suggest that only the lowest states of the band contribute to the absorption spectrum. Therefore, we have obtained a similar trend observed to those that was obtained in 1d systems with weak diagonal disorder. For all γ considered in Figs. 1(a) and 1(b) and $b \rightarrow 0$ we observed that the absorption spectrum displays a wide peak slightly under the lower band edge $E = -2$. Therefore, for $b \rightarrow 0$ we recovered the absorption spectrum similar to those obtained in a 1d lattice with an uncorrelated diagonal disorder. In Figs. 2(a) and 2(b) we show our calculations for $\gamma \rightarrow 0$ (i.e. the strongly correlated limit). We can see that for small values of b , our results show that $A(E)$ displays an unexpected set of narrow peaks. We also observed

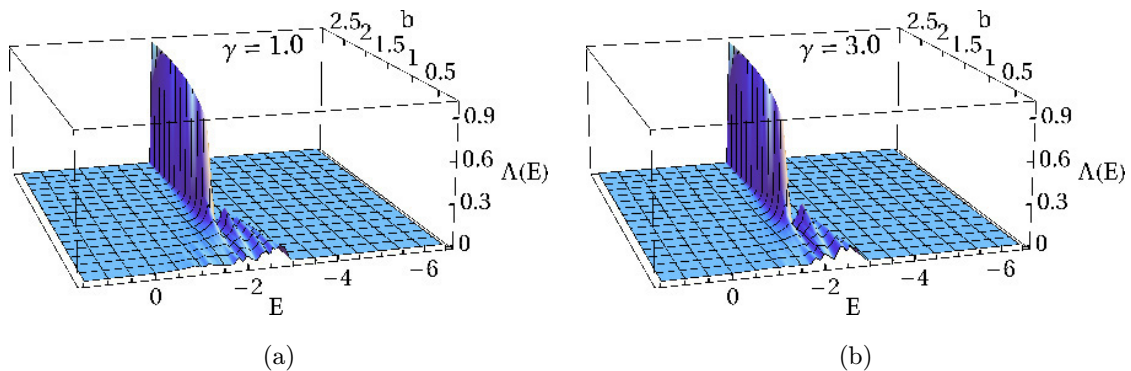


Fig. 1. (Color online) Numerical calculations of Eq. (6) by using $N = 10\,000$ sites, $\zeta = 1$, 100 realizations of disorder, $\gamma = 1$ and 3. We observe that for $b \gg 0$ in both (a), (b), the absorption spectrum displays a single peak slightly above the lower band edge $E = -2$. At this limit, the value $\epsilon_n = 0$ is most frequent than other values and therefore, we recovered a 1d model with weak diagonal disorder. This framework corroborates this single narrow peak found. For $b \rightarrow 0$ the OU process becomes an uncorrelated series therefore, we will obtain also a uncorrelated binary diagonal potential. Therefore, it explains the single wide peak in the absorption spectrum at this limit.

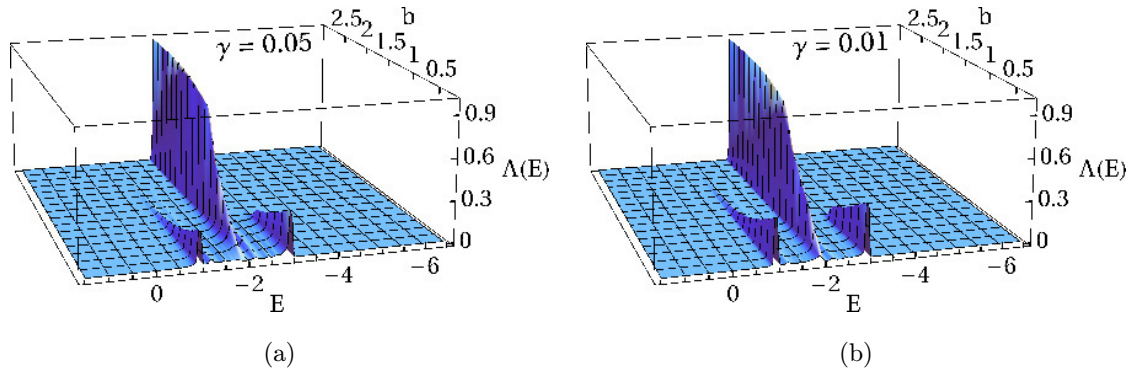


Fig. 2. (Color online) Numerical investigation of the absorption spectrum at limit of strong correlations ($\gamma \rightarrow 0$). Calculations of Eq. (6) were done by using $N = 10\,000$ sites, $\zeta = 1$ and 100 realizations of disorder. We can see that for small b we obtained a nonintuitive absorption spectrum profile. We can see that our results for $b \approx 0.5$ indicate the existence of a well defined triplet. For $b \rightarrow 0$ our calculations reveals a well defined doublet.

that at this limit of strong correlations ($\gamma \rightarrow 0$) depending on the b value, we can get to a well defined triplet (about $b \approx 0.5$). We emphasize that in disordered models traditionally is obtained a single peak around the lower state.^{64,65}

To understand this new set of peaks of the absorption spectrum we will need to study in details the local properties of the diagonal disorder and apply a heuristic procedure.⁶⁴ Let us start by remembering that the parameter b governs the probability distribution of each value $-\zeta, 0, \zeta$ of the diagonal distribution. For all values of γ and $b > 1$, the value $\epsilon_n = 0$ is most frequent than the other values and therefore, we recovered an 1d model with weak diagonal disorder. The single narrow peak found in Figs. 1(a) and 1(b) for large b is in good agreements with the $A(E)$ for a 1d model with weak diagonal disorder.⁶⁴ For $b \rightarrow 0$ we obtained a binary disorder distribution i.e. two values $(-\zeta, \zeta)$ randomly distributed. For $\gamma \gg 0$ and $b \rightarrow 0$ the OU process becomes uncorrelated and the binary sequence of values $(-\zeta, \zeta)$ obtained using the mapping defined in Eq. (5) becomes also an uncorrelated sequence. Therefore, it explains the single wide peak in the absorption spectrum found in Figs. 1(a) and 1(b) for $\gamma \gg 0$ and $b \rightarrow 0$. For $\gamma \rightarrow 0$ and $b \rightarrow 0$ (see Figs. 2(a) and 2(b)) we can also follow a similar analysis to understand the double peak structure found. For $\gamma \rightarrow 0$ the OU process becomes correlated. Previous works^{60,70} have demonstrated that the OU process is characterized by a power law spectrum $S(k) \propto k^{-2}$ for $\gamma \rightarrow 0$. We know^{30,74,75} that a stochastic sequence with power law spectrum $S(k) \propto k^{-2}$ has its increments in the edge between the persistent and anti-persistent behavior. Formally, a random sequence becomes persistent if its spectrum behaves as $S(k) \propto k^{-\nu}$ with $\nu > 2$. The value $\nu = 2$ is the crossing point between the persistent and anti-persistent behaviors. Therefore, at this limit the random sequence displays a initial smoothing and starts to follow a harmonic-like behavior. In this way, when $\gamma \rightarrow 0$ and $b \rightarrow 0$ the diagonal terms ϵ_n exhibit an almost regular structure of finite segments with values $-\zeta$ and ζ . Therefore, by using the heuristic arguments considered in Ref. 64 we can decouple this 1d model in a collection of two inter-penetrating

chains, one of them with on-site energy $-\zeta$ and another one with diagonal term ζ . Once we have used $\zeta = 1$ there are two sub-band, the first one is within the interval $[-3, 1]$ and a second one within the interval $[-1, 3]$. Following Ref. 64, the absorption spectrum of such a system is expected to have two peaks caused by the transitions from the ground state to the bottom state of each sub-band. We stress that these values i.e. -3 and -1 are in good agreement with the numerical calculations presented in Figs. 2(a) and 2(b) for $b \rightarrow 0$. Moreover, the triplet observed in the absorption spectrum for $b \approx 0.5$ (see Figs. 2(a) and 2(b)) can also be understood by using a similar methodology. For $b \approx 0.5$, the probability of each value in the diagonal distribution is approximately the same therefore, we can decouple the system in three inter-penetrating chains, each of them with on-site energies $-\zeta, 0$ and ζ .

For the value $\zeta = 1$ used in our calculations we will have three sub-bands, respectively $[-3, 1]$, $[-2, 2]$ and $[-1, 3]$. Following again Ref. 64, the absorption spectrum is expected to have three peaks related to the bottom state of each sub-band i.e. $-3, -2, -1$. This prediction is again in good agreement with our numerical results (see Figs. 2(a) and 2(b)). Before concluding this part, it is interesting to study the dependence of the optical properties with the ζ parameter. We can repeat the heuristic arguments for $b \rightarrow 0$ and any ζ to obtain that the positions of the peaks should be respectively $-2J - \zeta$ and $-2J + \zeta$. In order to a numerical verification of our arguments we will solve Eq. (6) for $N = 10\,000$ sites, 100 realizations of disorder and $\zeta = 2$ and 3. In Fig. 3, we plot the results of these calculations. We can observe that our heuristic methodology are in good agreement with our numerical results. As the ζ value is increased, the distance between each peak increases following our heuristic prediction.

In Figs. 4 and 5 we plot our results for the level spacing statistics near of the band center. Calculations were done for $\zeta = 1$ and Figs. 4(a) and 4(b) with $\gamma = 1, 3$ and Figs. 5(a) and 5(b) with $\gamma = 0.05, 0.01$. We stress that we have used in our

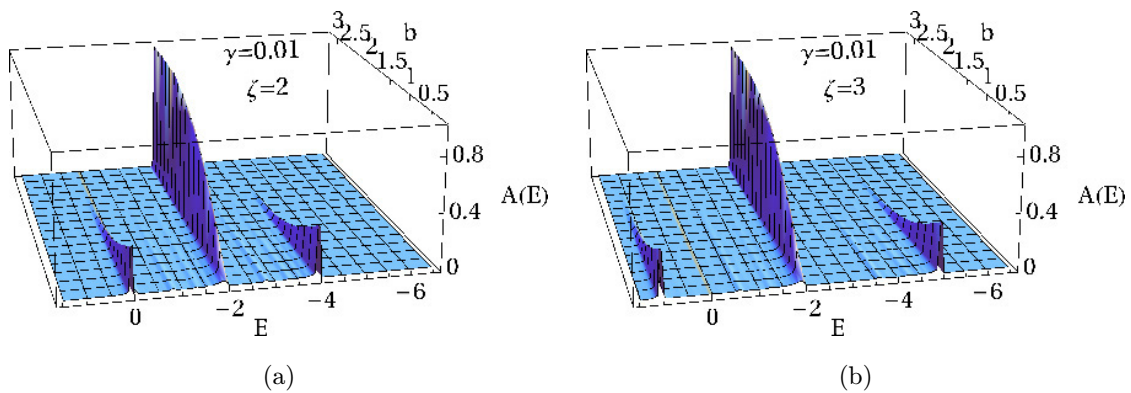


Fig. 3. (Color online) Numerical calculations of the absorption spectrum for $N = 10\,000$ sites, 100 realizations of disorder, $\zeta = 2$ and 3. Our numerical calculations confirm that the optical absorption peak structure is strongly dependent of the possible transitions from the ground state to the bottom state of each sub-band. For $b \rightarrow 0$ the positions of the two peaks is in good agreement with the bottom of each sub-band i.e. $[-2J - \zeta]$ and $[-2J + \zeta]$.

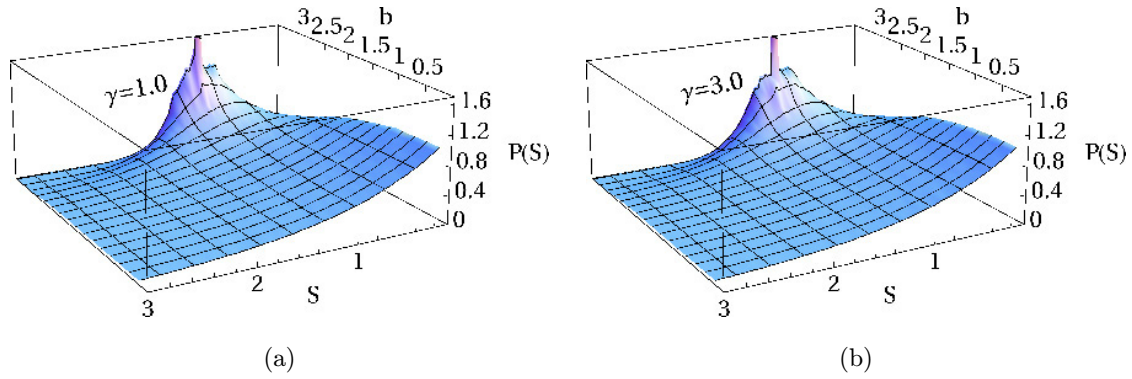


Fig. 4. (Color online) Numerical calculations of the level spacing statistics near of the band center for $\zeta = 1$ and $\gamma = 1, 3$. Our numerical calculation for $b \gg 0$ reveals a single peak around the average level spacing unity ($s = 1$). This level spacing statistics is similar to that found in chains without disorder. For the limit $b \rightarrow 0$ all calculations of the $P(s)$ indicate a standard Poisson distribution $P(s) = e^{-s}$ thus corroborating the localized nature of eigenstates.

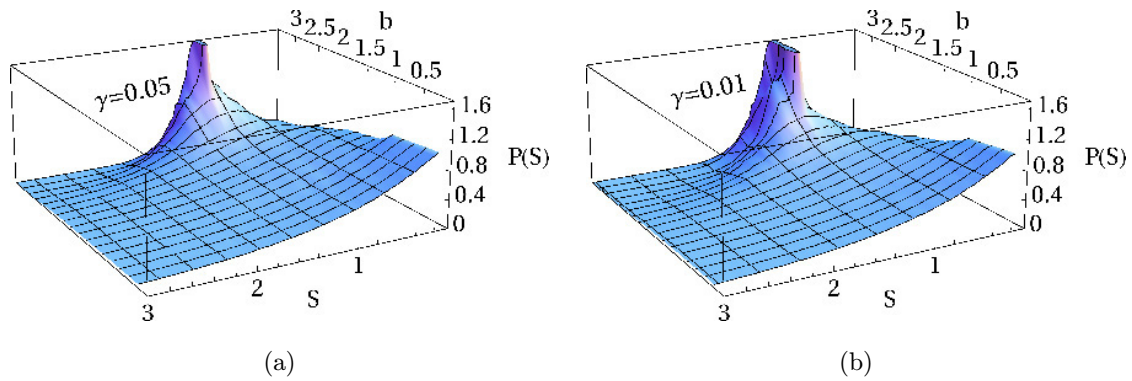


Fig. 5. (Color online) Level spacing statistics near of the band center for $\zeta = 1$ and $\gamma = 0.05, 0.01$. For large b we obtained a peak around $s = 1$, a clear signature of a pure chain. For $b \rightarrow 0$, even at the limit of strong correlations, our results reveals a Poisson Law behavior thus corroborating the localized nature of all eigenstates.

calculations an energy region around the band center $(-0.5, 0.5)$ and also a spectral unfolding procedure to keep the average level spacing equal to unity.^{71–73,76} We observe that for all values of γ considered here, our numerical calculations for $b \gg 0$ reveals a level spacing statistics similar to those found in chains without disorder,⁷³ i.e. a single peak around the average level spacing unity ($s = 1$). We stress that in Ref. 61, it was pointed out the existence of a disorder–order transition in ternary OU sequences for $b > 4$. Therefore, our calculations of the level spacing statistics corroborates the existence of this disorder–order transition for large b .⁶¹ For the limit $b \rightarrow 0$ all calculations of $P(s)$ indicate a standard Poisson distribution $P(s) = e^{-s}$ even for strong correlations $\gamma \rightarrow 0$ (see Figs. 4 and 5). Therefore, the Poisson distribution obtained in our calculations for $b \rightarrow 0$ unveil the absence of extended electronic eigenstates in ternary alloys with OU correlated disorder distribution. We emphasize that our results contradict previous works that pointed out the existence

of an Anderson phase transition in 1d electronic models with ternary correlated disorder.⁵²

4. Summary and Conclusions

In summary, we have studied a 1d ternary electronic chain with the on-site distribution constructed from an OU process. The ternary diagonal disorder distribution was generated from a mapping of the correlated OU process into a sequence of three different values. The probability of each value is controlled by a fixed parameter b . In that way, we have generated a ternary diagonal potential with long-range correlations. By using exact diagonalization, we computed the optical absorption spectrum and the level spacing distribution for this ternary model. Within the absorption spectrum context, our results indicating a new collection of peaks within the band of energy. We have shown that the kind of correlations considered here can induce the appearance of several well defined peaks, including peaks far from the bottom of the band. We have explained in detail the origin of each peaks by considering the possible transitions from the ground state to the bottom state of each allowed sub-band. Moreover, we demonstrated that it is possible to control the position of each absorption spectrum peak by changing the on-site disorder intensity. We stress that this multipeak structure of the absorption spectrum was never observed before in 1d disordered models. To finishing, our results about the level spacing distribution reveals a Poisson distribution for small values of b . We stress that this result are in good agreement with previous statements about the absence of extended states in ternary models with OU correlated disorder distribution.⁶¹ Therefore, our calculations contradict previous works^{45,59,60} that pointed out the existence of an Anderson metal-insulator phase transition in models with ternary correlated disorder distribution. We stress that the choice of the OU process as the source of disorder does not restricts our main results to this class of long-range correlated disorder. In general lines, the OU process consists of an easy way to generate a disorder distribution with long-range correlations. Basically, any random process with power law spectral density could be used as the source of disorder to construct the ternary atomic distribution with long-range correlations. Therefore, based on our present calculations, we are confident that our results are valid for another ternary disorder distributions with long-range correlations. We stress that it is possible^{37,38} by using molecular beam epitaxy, the construction of a correlated disordered array of three types of barriers following the correlations rules considered here. In fact, we think that an experimental setup like this should be very useful to reproduce our results about the optical absorption in the presence of a correlated ternary disorder distribution. However, within optical absorption framework, we stress that we have theoretically calculated the absorption by Frenkel excitons while that at semiconductor super-lattices we can found only Wannier–Mott excitons due to the large dielectric constant generally considered. We expect that the present work will stimulate further theoretical and experimental investigations along this line.

Acknowledgments

This work was partially supported by CNPq, CAPES and FINEP (Federal Brazilian Agencies), INCT-Nano(Bio)Simes, as well as FAPEAL (Alagoas State Agency). The research work of M. O. Sales and T. F. Assunção is supported by a graduate program of CAPES. FABF de Moura thanks Francisco Domínguez-Adame for stimulating suggestions. We would like to thank Earl Bellinger, Iram Gléria, Glauber T. Silva and Greg Petersen for proofreading the manuscript.

References

1. E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello and T. V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 673 (1979).
2. B. Kramer and A. MacKinnon, *Rep. Prog. Phys.* **56**, 1469 (1993).
3. A. M. García-García, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 076404 (2008).
4. A. Rodriguez, L.J. Vasquez and R. A. Römer, *Phys. Rev. B* **78**, 195106 (2008).
5. M. Modugno, *New J. Phys.* **11**, 033023 (2009).
6. C. Tian and A. Altland, *New J. Phys.* **12**, 043043 (2010).
7. F. Dukesz, M. Zilbergerts and L. F. Santos, *New J. Phys.* **11**, 043026 (2009).
8. R. Steinigeweg, H. Niemeyer and J. Gemmer, *New J. Phys.* **12**, 113001 (2010).
9. Y. Krivolapov, L. Levi, S. Fishman, M. Segev and M. Wilkinson, *New J. Phys.* **14**, 043047 (2012).
10. Z. Hong-Jun and X. Shi-Jie, *Chin. Phys. B*, **19**, 037107 (2010).
11. V. Gasparian and A. Suzuki, *J. Phys., Condens. Matter* **21**, 405302 (2009).
12. A. Rodriguez, L. J. Vasquez and R. A. Römer, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 10640 (2009).
13. A. Rodriguez, L. J. Vasquez, K. Slevin and R. A. Römer, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 046403 (2010).
14. G. Lemarié, H. Lignier, D. Delande, P. Szriftgiser and J. C. Garreau, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 090601 (2010).
15. A. Rodriguez, L. J. Vasquez, K. Slevin and R. A. Römer, *Phys. Rev. B* **84**, 134209 (2011).
16. J. J. Krich and A. Aspuru-Guzik, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 156405 (2011).
17. V. Gasparian, M. Cahay and E. Jódar, *J. Phys., Condens. Matter* **23**, 045301 (2011).
18. Y. Zhao, S. Duan and W. Zhang, *J. Phys., Condens. Matter* **24**, 245502 (2012).
19. G. P. Zhang, M. Gao, Y. Y. Zhang, N. Liu, Z. J. Qin and M. H. Shangguan, *J. Phys., Condens. Matter* **24**, 235303 (2012).
20. S. D. Baranovskii, E. I. Levin, I. M. Ruzin, H. Fritzsche and B. I. Shklovskii, *Int. J. Mod. Phys. C* **2**, 220 (1991).
21. D. Thouless, Anderson localization in the seventies and beyond, *50 Years of Anderson Localization* (World Scientific, 2010), pp. 7–25.
22. S. John, The localization of waves in disordered media, in *Scattering and Localization of Classical Waves in Random Media* (World Scientific, 1990), pp. 1–96.
23. F. A. B. F. de Moura, *Int. J. Mod. Phys. C*, **22**, 63 (2011).
24. A. E. B. Costa and F. A. B. F. de Moura, *Int. J. Mod. Phys. C*, **22**, 573 (2011).
25. J. C. Flores, *J. Phys., Condens. Matter* **1**, 8471 (1989).
26. D. H. Dunlap, H. L. Wu and P. W. Phillips, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 88 (1990).
27. H.-L. Wu and P. Phillips, *ibid.* **66**, 1366 (1991).
28. F. A. B. F. de Moura and M. L. Lyra, *Phys. Rev. Lett.* **81**, 3735 (1998).
29. F. A. B. F. de Moura, M. D. Coutinho-Filho, E. P. Raposo and M. L. Lyra, *Europhys. Lett.* **66**, 585 (2004).

30. I. F. dos Santos, F. A. B. F. de Moura, M. L. Lyra and M. D. Coutinho-Filho, *J. Phys., Condens. Matter* **19**, 476213 (2007).
31. F. Domínguez-Adame, V. A. Malyshev, F. A. B. F. de Moura and M. L. Lyra, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 197402 (2003).
32. F. A. B. F. de Moura, *Eur. Phys. J. B* **78**, 335 (2010).
33. F. M. Izrailev and A. A. Krokhin, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 4062 (1999).
34. F. M. Izrailev, A. A. Krokhin and S. E. Ulloa, *Phys. Rev. B* **63**, 41102 (2001).
35. W. S. Liu, T. Chen and S. J. Xiong, *J. Phys. Condens. Matter* **11**, 6883 (1999).
36. G. P. Zhang and S.-J. Xiong, *Eur. Phys. J. B* **29**, 491 (2002).
37. V. Bellani, E. Diez, R. Hey, L. Toni, L. Tarricone, G. B. Parravicini, F. Domínguez-Adame and R. Gómez-Alcalá, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 2159 (1999).
38. V. Bellani, E. Diez, A. Parisini, L. Tarricone, R. Hey, G. B. Parravicini and F. Domínguez-Adame, *Physica E* **7**, 823 (2000).
39. H. Shima, T. Nomura and T. Nakayama, *Phys. Rev. B* **70**, 075116 (2004).
40. U. Kuhl, F. M. Izrailev, A. Krokhin and H. J. Stöckmann, *Appl. Phys. Lett.* **77**, 633 (2000).
41. H. Cheraghchi, S. M. Fazeli and K. Esfarjani, *Phys. Rev. B* **72**, 174207 (2005).
42. G. Schubert, A. Weiße and H. Fehske, *Physica B* **801**, 359 (2005).
43. F. M. Izrailev, A. A. Krokhin and N. M. Makarov, *Phys. Rep.* **512**, 125 (2012).
44. G. Long-Yan, T. Pei-Qing and Z. Zi-Cong, *Chin. Phys. B* **20**, 087102 (2011).
45. A. Esmailpour, H. Cheraghchi, P. Carpena and M. Reza Rahimi Tabar, *J. Stat. Mech.* 09014 (2007).
46. A. Croy and M. Schreiber, *Phys. Rev. B* **85**, 205147 (2012).
47. C. Albrecht and S. Wimberger, *Phys. Rev. B* **85**, 045107 (2012).
48. G. M. Petersen and N. Sandler, <http://arxiv.org/abs/1302.5330>.
49. M. Hilke, *Phys. Rev. A* **80**, 063820 (2009).
50. A. Crisanti, *J. Phys. A* **23**, 5235 (1990).
51. E. M. Nascimento, F. A. B. F. de Moura and M. L. Lyra, *Phys. Rev. B* **76**, 115120 (2007).
52. F. A. B. F. de Moura, M. D. Coutinho-Filho, E. P. Raposo and M. L. Lyra, *Phys. Rev. B* **66**, 014418 (2002).
53. F. A. B. F. de Moura, *Eur. Phys. J. B* **58**, 389 (2007).
54. F. Domínguez-Adame, E. Maciá and A. Sánchez, *Phys. Rev. B* **48**, 6054 (1993).
55. P. K. Datta and K. Kundu, *J. Phys. Condens. Matter* **6**, 4465 (1994).
56. F. A. B. F. de Moura, M. D. Coutinho-Filho, E. P. Raposo and M. L. Lyra, *Phys. Rev. B* **68**, 012202 (2003).
57. S. S. Albuquerque, F. A. B. F. de Moura and M. L. Lyra, *Physica A* **357**, 165 (2005).
58. F. A. B. F. de Moura and F. Domínguez-Adame, *Eur. Phys. J. B* **66**, 165 (2008).
59. E. Lazo and E. Diez, *Phys. Lett. A* **374**, 3538 (2010).
60. E. Lazo and E. Diez, *Phys. Lett. A* **375**, 2122 (2011).
61. M. O. Sales, S. S. Albuquerque and F. A. B. F. de Moura, *J. Phys., Condens. Matter* **24**, 495401 (2012).
62. V. A. Malyshev, A. Rodríguez and F. Domínguez-Adame, *Phys. Rev. B* **60**, 14140 (1999).
63. F. Domínguez-Adame, V. A. Malyshev and A. Rodríguez, *Chem. Phys.* **244**, 351 (1999).
64. E. Díaz, A. Rodríguez, F. Domínguez-Adame and V. A. Malyshev, *Europhys. Lett.* **72**, 1018 (2005).
65. T. F. Assunção, M. L. Lyra, F. A. B. F. de Moura and F. Domínguez-Adame, *Phys. Lett. A* **375**, 1048 (2011).
66. A. Eisfeld, S. M. Vlaming, V. A. Malyshev and J. Knoester, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 137402 (2010).
67. A. Werpachowska and A. Olaya-Castro, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 259701 (2012).

M. O. Sales et al.

68. A. Eisfeld, S. M. Vlaming, V. A. Malyshev and J. Knoester, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 259702 (2012).
69. M. O. Sales and F. A. B. F. de Moura, *Physica E* **45**, 97 (2012).
70. D. T. Gillespie, *Phys. Rev. E* **54**, 2084 (1996).
71. M. L. Mehta, *Random Matrices* (Academic Press, Boston, 1991).
72. R. P. A. Lima, H. R. da Cruz, J. C. Cressoni and M. L. Lyra, *Phys. Rev. B* **69**, 165117 (2004).
73. S. N. Evangelou and D. E. Katsanos, *J. Stat. Phys.* **85**, 525 (1996).
74. J. Feder, *Fractals* (Plenum Press, New York, 1988).
75. A. Tsonis, *Chaos: From Theory to Applications* (Plenum Press, New York, 1992).
76. W. S. Dias, E. M. Nascimento, M. L. Lyra and F. A. B. F. de Moura, *Phys. Rev. B* **81**, 045116 (2010).

Electron–soliton dynamics in chains with cubic nonlinearity

M O Sales and F A B F de Moura

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

E-mail: fidelis@fis.ufal.br

Received 13 June 2014, revised 23 August 2014

Accepted for publication 29 August 2014

Published 23 September 2014

Abstract

In our work, we consider the problem of electronic transport mediated by coupling with solitonic elastic waves. We study the electronic transport in a 1D unharmonic lattice with a cubic interaction between nearest neighboring sites. The electron–lattice interaction was considered as a linear function of the distance between neighboring atoms in our study. We numerically solve the dynamics equations for the electron and lattice and compute the dynamics of an initially localized electronic wave-packet. Our results suggest that the solitonic waves that exist within this nonlinear lattice can control the electron dynamics along the chain. Moreover, we demonstrate that the existence of a mobile electron–soliton pair exhibits a counter-intuitive dependence with the value of the electron–lattice coupling.

Keywords: soliton, nonlinearity, electron

(Some figures may appear in colour only in the online journal)

1. Introduction

Lattice vibrations and their coupling with electronic dynamics (the electron–phonon interaction) play relevant roles in effective electronic transport [1–43]. In [8], the authors concluded that the superconducting state of *IrGe* is due to strong electron–phonon coupling. The authors in [9] also demonstrated that strong electron–phonon coupling is the mechanism behind the superconductivity of *La₂C₃*. Based on the *electrosoliton* concept proposed by Davydov and associated works, we know that the nonlinear character of the electron–lattice term can promote charge transport [19–43]. Davydov’s formalism consists of a Hamiltonian that describes the electronic dynamics under the influence of lattice vibrations. More recently, the existence of a *polaron–soliton* pair has been considered as a possible mechanism to promote charge transport [30–41]. This *polaron–soliton* ‘quasiparticle’ has been generally termed as a *solectron* [30–39]. It demonstrated the possibility of non-Ohmic supersonic electric conduction mediated by the *solectron* dynamics [38]. In [39], Velarde *et al* presented robust numerical evidence for the possibility of fast electron–soliton transport along the crystallographic axes of 2D unharmonic lattices. Moreover, the electronic dynamics in a Fermi–Pasta–Ulam disordered chain with electron–lattice interaction was considered in [42]. The electron–lattice

interaction was introduced by considering energy hopping as a function of the distance between neighboring atoms. By numerically solving the dynamics equations, evidence was found that the solitonic excitations induced by the nonlinear cubic interaction can control the electron dynamics along the entire lattice. The electron–soliton pair found in [42] was a direct consequence of the cubic nonlinearity of the α -Fermi–Pasta–Ulam model. We emphasize that in most works by Velarde *et al* (see [24–28, 30–38]), the electron–soliton pair was obtained by considering the nonlinear Morse potential. The possibility of electric conduction induced by nonlinear elasticity is a general issue with several connections to distinct fields of condensed matter. In [41], the electron transfer mediated by soliton-like excitations was investigated in several 2D anharmonic lattices, particularly in a square lattice similar to the cuprate lattice. The authors offered computational evidence of the possibility of almost loss-free electron–soliton transfer along the crystallographic axes. However, we emphasize that there is an open question about the existence and stability of thermal solitons (and solectrons) up to relatively high temperatures, e.g. room or physiological temperatures [38]. Recently, the problem of electron transfer in thermal lattices was investigated in [28, 33, 40]. These numerical calculations showed that the solectron-charge transport in the Toda–Morse lattice appears stable up to room temperature (about 300 K).

The main physical motivation behind the above topics is the identification of possible mechanisms of the charge transfer in DNA chains, polypeptides, bio molecules, and random lattices [43–50]. In [45], several theoretical models of charge transfer mechanisms in DNA models were discussed and the scopes of their application were analyzed. In particular, the authors focused on the charge transport induced by the polaron mechanism. The procedure considered in [45] is quite similar to that used by Velarde *et al*; the electronic dynamics was treated by a Quantum Hamiltonian and the lattice vibrations by a classical formalism. However, the electron-lattice interaction considered in [43, 45] was the standard SSH [51] approximation. Within the works of Velarde [24–28, 30–38], the electron-phonon term was introduced as an exponential of the distance between nearest neighbor atoms, which is a generalization of the linear SSH approximation. Moreover, the nonlinear term considered in [43, 45] was the cubic term, in contrast with the Toda–Morse potential considered by Velarde. The cubic potential used in [43, 45] represents an expansion of the Toda–Morse potential when the deviation from the equilibrium position is not very large [45].

In our work, we report further progress along these lines. We consider the problem of electron transport mediated by coupling with a solitonic wave. Our model consists of one electron moving in an unharmonic lattice and we focus on the existence of an electro-soliton pair similar to that obtained in [24–28, 30–43]. In our model, we consider a 1D unharmonic lattice with a cubic interaction between nearest neighboring sites. The electron-lattice interaction was introduced by considering the energy hopping following the SSH approximation, i.e. a linear function of the distance between neighboring atoms. We numerically solve the dynamics equations for the electron and lattice and compute the dynamics of an initially localized electronic wave-packet. Our results suggest that the solitonic waves that exist within this nonlinear lattice can control the electron dynamics along the entire lattice. We study in detail the formation of an electron-soliton state that can move along the chain. This mobile electron-soliton pair can be a key ingredient to the charge transport in a nonlinear chain. Moreover, we will investigate in detail the intensity of the electron-lattice interaction necessary to promote the appearance of this electron-soliton pair. Our calculations suggest that, even for strong electron-lattice coupling, we can find an electronic dynamics non-mediated by solitonic waves.

2. Model

In our model, we considered one electron moving in a chain of N masses. We considered that each mass is coupled with its nearest neighbors through a cubic force. We considered the electronic dynamics using a Quantum Hamiltonian and the lattice using a classical Hamiltonian. We also considered the coupling between the electron motion and atomic vibration. The electron-lattice interaction was considered by following the well-known SSH approximation. According to SSH theory, the electron’s kinetic energy depends on the effective distance between neighboring atoms. The complete Hamiltonian

for one electron coupled with the vibrations of a nonlinear chain can be written as $H = H_e + H_{\text{lattice}}$ where:

$$\begin{aligned} H_e &= \sum_n V_{n+1,n} (d_{n+1}^\dagger d_n + d_n^\dagger d_{n+1}) \\ H_{\text{lattice}} &= \sum_n h_n \end{aligned} \quad (1)$$

d_n^\dagger and d_n are the creation and annihilation operators for the electron at site n . $V_{n+1,n}$, representing the electron’s kinetic energy (the hopping term). $h_n(t)$ represents the classical energy of the n th-site and is defined by:

$$\begin{aligned} h_n &= \frac{P_n^2}{2m_n} + \frac{1}{4} [\beta_n (Q_{n+1} - Q_n)^2 + \beta_{n-1} (Q_n - Q_{n-1})^2] \\ &+ \frac{\eta}{6} [(Q_{n+1} - Q_n)^3 + (Q_n - Q_{n-1})^3] \end{aligned} \quad (2)$$

P_n and Q_n define the momentum and displacement of the mass at site (n), respectively. We considered all masses and elastic constants identical to $\beta_n = m_n = 1$. η represents the strength of the cubic non-linearity considered in our model. The classical Hamiltonian with cubic non-linearity considered here is the Fermi–Pasta–Ulam (FPU) α model [59]. The hopping elements $V_{n+1,n}$ depend on the relative distance between two consecutive molecules on the chain in the following the SSH expression:

$$V_{n+1,n} = -[V_0 - \alpha(Q_{n+1} - Q_n)] \quad (3)$$

V_0 is the transfer integral between the nearest-neighbor sites in the absence of electron-lattice coupling. α defines the effective electron-lattice coupling. In general, in the previous papers that have used the SSH approximation [1–7, 51], the parameter α was chosen $\alpha > V_0/a$ (a is the lattice parameter, in our work $a = 1$). Here, we follow this trend and consider $V_0 = 1$ and $\alpha > 1$. The time-dependent wave-function $|\Phi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|n\rangle$ was obtained by numerical solution of the time-dependent Schrödinger. We consider the electron initially localized at site $N/2$, i.e. $|\Phi(t=0)\rangle = \sum_n c_n(t=0)|n\rangle$ where $c_n(t=0) = \delta_{n,N/2}$. The Wannier amplitudes evolve in time according to the time-dependent Schrödinger equation as ($\hbar = 1$):

$$\begin{aligned} i \frac{dc_n(t)}{dt} &= -[1 - \alpha(Q_{n+1} - Q_n)]c_{n+1}(t) \\ &- [1 - \alpha(Q_n - Q_{n-1})]c_{n-1}(t) \end{aligned} \quad (4)$$

Moreover, the lattice equation can be written as

$$\begin{aligned} \frac{d^2 Q_n(t)}{dt^2} &= (Q_{n+1} - Q_n) - (Q_n - Q_{n-1}) \\ &+ \eta[(Q_{n+1} - Q_n)^2 - (Q_n - Q_{n-1})^2] \\ &- \alpha \{ (c_{n+1}^* c_n + c_{n+1} c_n^*) - (c_n^* c_{n-1} + c_n c_{n-1}^*) \} \end{aligned} \quad (5)$$

Our numerical formalism was based on the precise numerical solution of the previous equations (4) and (5). The dynamics equations for $c_n(t)$ and $Q_n(t)$ were solved by using a numerical method that consists of a combination of a high-order Taylor expansion [52] and a second order Euler procedure [53]. The electron dynamics equations (equation (4)) were solved

numerically using a high-order method based on the Taylor expansion of the evolution operator $U(\Delta t)$ [52]:

$$U(\Delta t) = \exp(-iH_e \Delta t) = 1 + \sum_{l=1}^{n_o} \frac{(-iH_e \Delta t)^l}{l!} \quad (6)$$

where H_e is the one-electron Hamiltonian. The wave-function at time Δt is given by $|\Phi(\Delta t)\rangle = U(\Delta t)|\Phi(t=0)\rangle$. The method can be used recursively to obtain the wave-function at time t . The classical equations (equation (5)) were solved using a second order Euler method defined as the following [53]: The procedure begins using a standard Euler method to find a prediction $Q_n(t + \Delta t)^*$ at the time $t + \Delta t$:

$$Q_n(t + \Delta t)^* \approx Q_n(t) + \Delta t \left. \frac{dQ_n}{dt} \right|_t \quad (7)$$

The next step consists of applying a correction formula in order to find an improved approximation to $Q_n(t + \Delta t)$

$$Q_n(t + \Delta t) \approx Q_n(t) + \frac{\Delta t}{2} \left[\left. \frac{dQ_n}{dt} \right|_t + \left. \frac{dQ_n^*}{dt} \right|_{t+\Delta t} \right] \quad (8)$$

The following results were obtained using $\Delta t = 10^{-3}$ and the sum of equation (6) was truncated at $n_o = 10$. This procedure was sufficient to keep the wave-function norm conservation along the entire time interval considered at ($|1 - \sum_n |c_n(t)|^2| < 10^{-8}$). We emphasize that, in order to ensure accuracy of our compost numerical procedure, we compared our calculations with the results obtained using the standard fourth-order Runge–Kutta (RK4) [53]. The results obtained with our numerical formalism are in excellent agreement with (RK4). Moreover, our formalism requires a computational time lower than in the case of (RK4).

Aiming to characterize the dynamic behavior of the wave packet, we computed a typical quantity that can describe the electronic transport in this nonlinear model, namely the participation function defined as [54, 55]

$$\xi(t) = 1 / \sum_n |c_n(t)|^4. \quad (9)$$

The participation function provides an estimate of the number of base states over which the wave packet is spread at time t . In particular, the asymptotic participation number becomes size-independent for localized wave packets. On the other hand, $\xi(t \rightarrow \infty) \propto N$ corresponds to the regime where the wave packet is uniformly distributed over the lattice [54, 55].

3. Results

In our calculations, we followed the time evolution of a wave-packet initially localized at the center of a self-expanding chain. The self-expanding chain was used to avoid boundary effect; whenever the probability of finding the particle at the ends of the chain exceeded 10^{-30} , twenty new sites were added to each end. The initial wave-packet is defined as $\{c_n(t=0) = \delta_{n,n_0}\}$ where n_0 represents the center of the self-expanding chain. A high-order method based on the Taylor expansion of the evolution operator was used to solve the set of

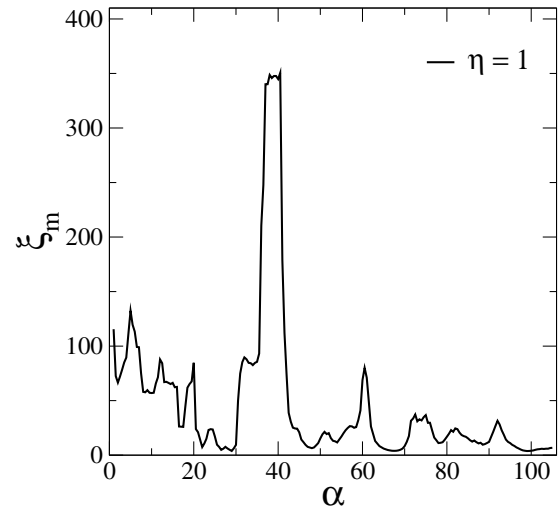


Figure 1. The long-time participation function ($\xi_m = \lim_{t \rightarrow t_{\max}} \xi(t)$) versus the electron-lattice coupling strength α . t_{\max} was considered about 2×10^4 units and the strength of the cubic and harmonic forces $\eta = \beta = 1$.

time-dependent Schrödinger coupled equations (equation (4)) and the second-order Euler method to solve the classical lattice equations (equation (5)). The lattice equations were solved by considering an initial energy input fully localized at the center n_0 of the self-expanding chain, i.e. $\{Q_n(t=0) = 0\}$ and $\{Q_n(t=0) = \delta_{n,n_0}\}$. Numerical convergence was ensured by checking the conservation of the norm of the wave-packet at each time step. In our calculations, $|1 - \sum_n |c_n(t)|^2| < 10^{-8}$ along the entire time considered. Figure 1 shows the long-time limit of the participation function $\xi_m = \lim_{t \rightarrow t_{\max}} \xi(t)$ versus the electron-lattice coupling strength α . In our calculations, t_{\max} was considered as about 2×10^4 units. Calculations were performed considering the strength of the cubic and harmonic forces $\eta = \beta = 1$. Figure 1 shows the existence of certain regions with a large participation number and other regions in which the participation number ξ_m is less than 10 sites (some valleys). Therefore, our results suggest that, depending on the α value chosen, the electronic wave-packet can become extremely localized or exhibit some spread along the lattice. This result deserves more detailed analysis. The first point of our analysis focuses on understanding what is happening with the electronic wave-packet in both regimes. We focused on the time-dependent participation number $\xi(t)$ versus time t for several values of the electron-lattice coupling α (see figures 2(a) and (b)). We tuned the values of α to investigate both the case with the larger participation number ($\alpha = 5, 19, 32, 37$) as well as the case in which the wave-packet remains localized ($\alpha = 27.5, 47.5, 67.5, 100$). We observe in figure 2(a) that the participation number for $\alpha = 5, 19, 32, 37$ increases with time t approximately as $\xi \propto t^{0.25(3)}$. In [12, 15, 17], the electronic dynamics in a nonlinear Schrödinger equation was investigated and a similar sub-diffusive propagation was also observed. We emphasize that the effective nonlinearity considered in [12, 15, 17] was raised from the interaction with the lattice phonons. Moreover, our results in figure 2(a) are in good agreement with the results shown in figure 1 for the same values of α . However, the results in figure 2(b) show that, for short-times, the

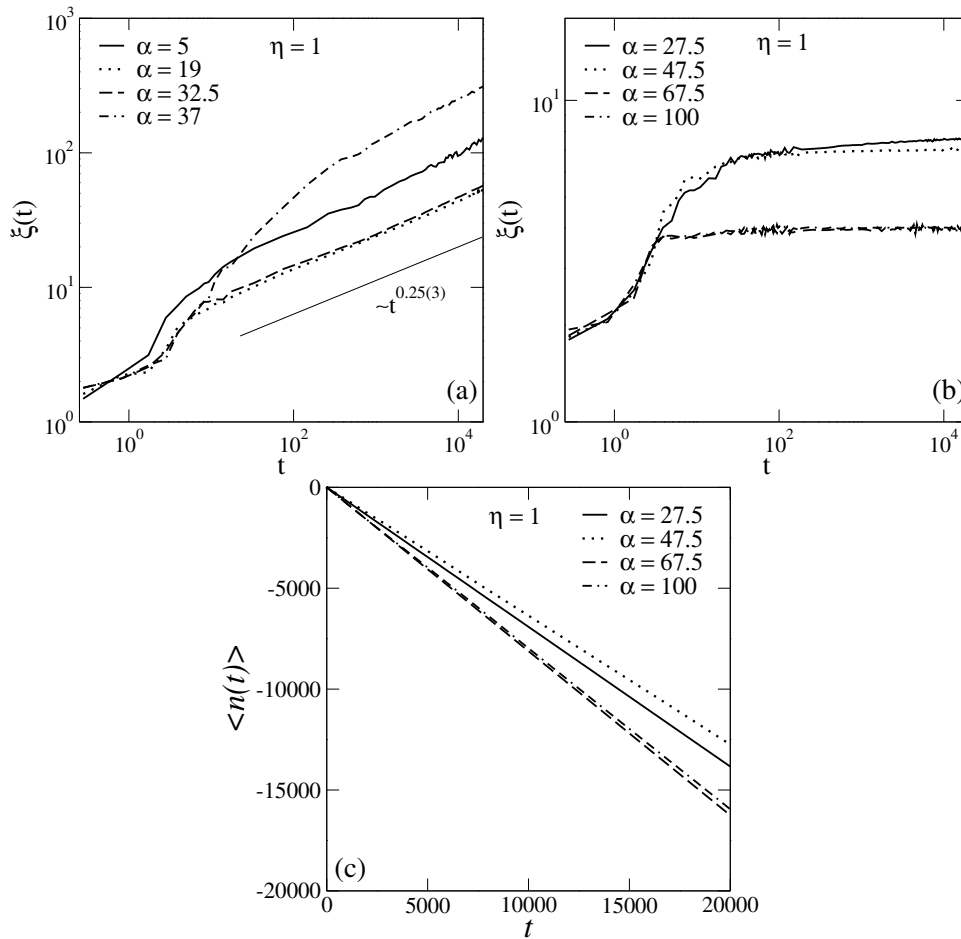


Figure 2. (a, b) Time-dependent participation number $\xi(t)$ versus time t for several values of the electron-lattice coupling α . (a) The case with larger participation number ($\alpha = 5, 32.5, 37.5, 60$); (b) the case in which that the wave-packet remains fully localized ($\alpha = 27.5, 47.5, 67.5, 100$); and (c) the mean position of the wave-packet $\langle n(t) \rangle$ for the fully localized regime with $\alpha = 27.5, 47.5, 67.5, 100$. $\langle n(t) \rangle = 0$ represents the center of the chain, i.e. the initial position.

participation number for $\alpha = 27.5, 47.5, 67.5, 100$ increases until there are few sites (less than 10) saturated for long-times. The saturation of ξ at the long-time limit is in perfect agreement with the calculations of the participation number found at the valleys of figure 1. In figure 2(c), we focused on the electronic mobility for those cases in which the nonlinear coupling α is chosen within the valleys of the figure 1. We computed the time evolution of the mean position (centroid) defined as [54, 55] $\langle n(t) \rangle = \sum_n n |c_n(t)|^2$ for $\alpha = 27.5, 47.5, 67.5, 100$. We emphasize that for these values of α the wave-packet remains localized for long-times. We can see that, in spite of the width of wave-function remaining finite (see figure 2(a)), the wave-packet centroid evolves along time. This result suggests that this localized electronic wave-packet has mobility and thus charge transport is possible within this nonlinear chain.

Therefore, our results shown in figures 2(a) and (c) demonstrate that the electron wave-function can become trapped in a small fraction of the chain. We now investigate some specificities of this fully localized behavior. We examine the time-dependent wave-function profile. In figures 3(a)–(d), we plot $|c_n|^2$ versus t and n for $\eta = \beta = 1$ and $\alpha = 27.5, 47.5, 67.5, 100$ (we chose distinct values of α in which the electron wave-function remains fully localized).

Calculations were performed in a finite lattice with $N = 600$ sites. It is clearly in good agreement with results shown in figures 1 and 2. The wave-function remains trapped in a finite fraction of the lattice. We can also see that the localized electronic wave-packet is moving along the chain. The mobility found in figure 3 is in good agreement with the centroid calculations shown in figure 2(c). It should be noted that we are dealing with an unharmonic chain with cubic nonlinearity. Therefore, the nonlinear interaction between the nearest neighbor atoms promotes the appearance of a soliton mode [56–60]. The dynamics of this soliton mode is directly related to the type of nonlinearity considered and the type of initial condition chosen. For example, within the present model with cubic nonlinear forces, the direction of the motion can be inverted by exchanging the sign of the initial velocity excitation. figure 4 shows the spatial and temporal evolution of the lattice deformation $A_n = \exp[(Q_n - Q_{n-1})]$ and the energy $h_n(t)$ of the mass at site (n). We plot A_n and $h_n(t)$ times t and n for the anharmonic chain with $\eta = 1$ and the electron-phonon coupling $\alpha = 27.5$. Our results show that the initial excitation propagates along the classical chain in a solitonic state. We observed that the lattice deformation A_n moves in an invariant form with constant velocity over the chain. Moreover,

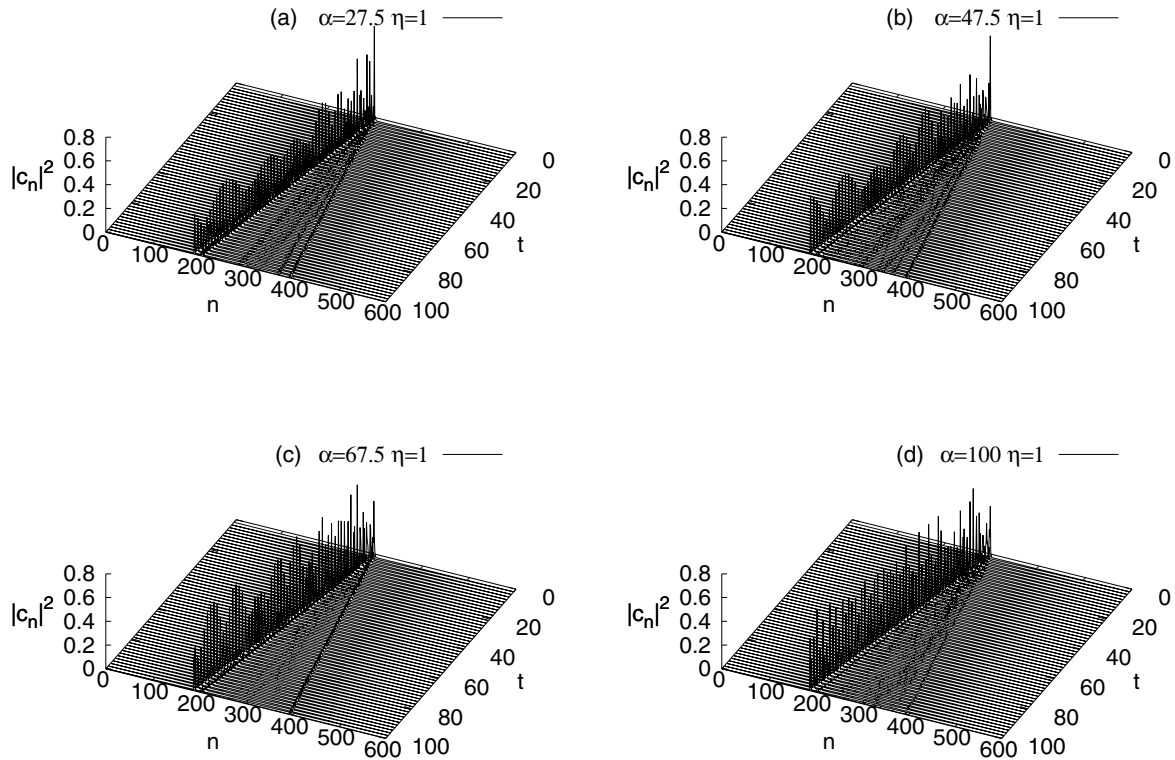


Figure 3. The wave-function component $|c_n|^2$ versus t and n for $\eta = \beta = 1$ and $\alpha = 27.5, 47.5, 67.5, 100$. The majority of the initial wave-packet is trapped by the solitonic wave and this electron–soliton pair exhibits mobility along the chain.

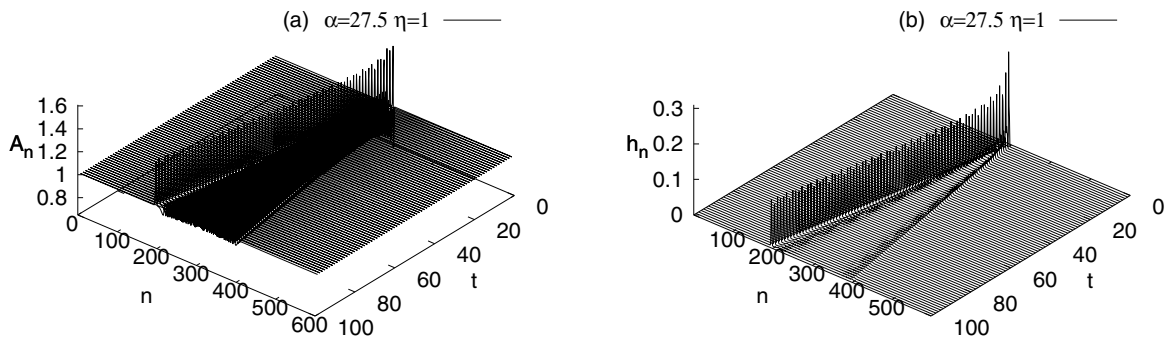


Figure 4. The lattice deformation $A_n = \exp[(Q_n - Q_{n-1})]$ and the local energy $h_n(t)$ versus t and n for an anharmonic chain with cubic nonlinearity $\eta = 1$ and electron-lattice coupling $\alpha = 27.5$. Our results show that the initial excitation propagates along the chain in a solitonic state.

we also observed that the energy intensity of this soliton-like mode appears to remain constant and moving along the lattice. The energy pulse profile shown in figures 4(a and b) is a clear signature of the presence of a solitonic mode within the nonlinear harmonic lattice. Therefore, the results shown in figure 4 are in good agreement with the wave-function dynamics obtained in figures 3(a–d) thus supporting the hypothesis of the electron–soliton pair formation. Therefore, our calculations suggest that the electron-lattice interaction considered here promotes the appearance of a mobile electron–soliton pair. The electron–soliton excitation observed here is quite similar to those obtained in [30–42]. We observed that the soliton mode can trap most part of the initial electronic wave-packet. The dynamics of this electron–soliton pair seem to be dominated by the mobility of the solitonic mode [30–39].

We also investigated the wave-function spatial profile at the cases in which the participation number increases with time. The spatial profile of the wave-function fully fills the (t, n) plane. Therefore, a three dimensional presentation using $(|c_n(t)|^2, t, n)$ does not provide a good visualization of the data in this case. Therefore, we plotted in figure 5 $|c_n(t)|^2$ versus n for several instants and electron–phonon coupling α . We tuned α to choose the cases in which the participation number increases with time t . We are interested in analyzing the electronic dynamics in those cases with apparent absence of the electron–soliton pair. We performed our calculations in a finite chain with $N = 2000$ sites. We considered $\eta = \beta = 1$, $\alpha = 37, 60$ and $t = 200, 400, 600, 800$. We again emphasize again that for these values of α , the participation number increases with time t and, therefore, the electron–soliton pair apparently does not exist. We observed

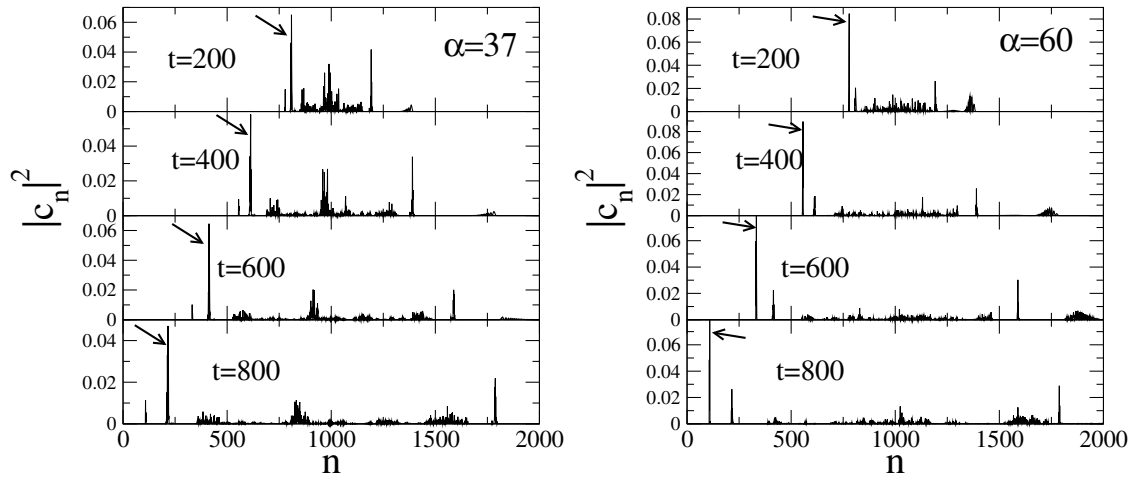


Figure 5. $|c_n(t)|^2$ versus n for several instants and electron-lattice couplings α . Calculations were performed for $\alpha = 37, 60$. For these cases the participation number is increased with time t and the electron–soliton pair apparently does not exist.

that the wave-packet spreads along the entire lattice in good agreement with the behavior of the participation number found in figure 2(a). However, we observed that even from the initial stage, the wave packet splits in a structure with two peaks that move in opposite directions. Particularly, we observed that one of these peaks (the peak at the left of the center of the chain) keeps its intensity approximately constant along time (see the arrows). Usually, within the context of time-dependent electronic dynamics, the initial wave packet should split from its single peak structure to a structure with two stable peaks that move in opposite directions [61]. Moreover, from [61], we know that these two peaks should exhibit a small finite width and that this width increases as time is increased. In our study, the one-electron dynamics displays behavior somewhat different from the standard theory [61]. The peak structure reported in figure 5 exhibits some similarities with the one-electron wave-packet profile found in [13]. Our results suggest that, in spite of the wave-packet spreading along the chain, we can find some elements associated with the formation of electron–soliton pair. The mobile peaks found (see the arrows in figure 5) suggest that a small finite fraction of the initial wave-packet is trapped by the solitonic modes. However, most of the wave-packet is decoupled of the solitonic mode and propagates along the chain. Therefore, we have found some evidence that suggests that even in the case where the electron–phonon coupling α is tuning on the peaks of figure 1, a small fraction of the wave-packet is trapped by the solitonic waves. However, the electron–phonon interaction at these cases is not sufficient to dominate the electronic dynamics.

4. Summary

In our work, we studied the dynamics of a one-electron in a unharmonic chain at the presence of the electron-lattice interaction. We considered a Fermi–Pasta–Ulam lattice with a cubic potential. The electron transport was treated by following a quantum tight-binding approximation and the longitudinal vibrations of the lattice were described using a classical formalism. The interaction between the electron and the lattice

was considered such that the transfer integral between neighboring atoms was dependent on the effective distance between neighboring atoms. We used the SSH approximation, meaning that the hopping term is defined as a linear function of the distance between neighboring atoms. By using a high precision procedure for solving the dynamics equations for the electron and lattice, we computed the spreading of an initially localized one-electron wave-packet. Our results suggest that the soliton mode that exists within this nonlinear lattice can control the electron dynamics along the entire lattice. Our data revealed a kind of electron–soliton state moving along the chain. This mobile electron–soliton pair exhibits a velocity approximately constant and can be a key ingredient in the charge transport in a nonlinear chain. These results are in good agreements with recent works [24–28, 30–38, 42] that point out the existence of a new excitation resulting from the trapping of an electron by a solitonic wave. Moreover, we demonstrated the range of α values necessary to promote the appearance of this electron–soliton pair. Our calculations suggest that, even for strong electron-lattice coupling α , we can determine the absence of electron–soliton dynamics. This is a non-intuitive result. In general, we would expect that as the electron-lattice coupling α is increased, it should be easier to promote electron trapping and, consequently, electron–soliton pair formation. However, within the cubic nonlinearity considered in our work, our results suggest that this is not true. We emphasize that our calculations were performed in a Fermi–Pasta–Ulam lattice with a cubic potential and the electron-lattice term was considered by following the SSH approximation. We also stress that a direct comparison with the results of Velarde is difficult. Velarde *et al* obtained the electron–soliton pair by considering the orse potential and the hopping term following an exponential of the distance between nearest atoms. The cubic potential in the SSH approximation considered here are properties similar to the Velarde approach at the limit of weak vibrations. Therefore, we suspect that the behavior reported in our paper should also appear within the approach they used. Moreover, we also emphasize that we did not consider the difference τ between the time scale of the electron dynamics and the time scale of

the lattice vibrations. Velarde *et al* used an artifice of to multiply the right side of the quantum Schrödinger equation by τ in order to include the difference between both time scales. We stress that this procedure represents an increase of the electronic hopping intensity and promotes only a rescaling of the electron-lattice coupling range of values. We hope that our paper can stimulate discussion along this line.

Acknowledgments

This work was partially supported by CNPq, CAPES, and FINEP (Federal Brazilian Agencies), and CNPq-Rede Nanobioestruturas, as well as FAPEAL (Alagoas State Agency). The research work of M O Sales is supported by a graduate program of CAPES.

References

- [1] Teramoto T, Wang Z, Kobryanskii V M, Taneichi T and Kobayashi T 2009 *Phys. Status Solidi* **6** 311–4
- [2] Wei J H, Wang L X, Chan K S and Yan Y J 2005 *Phys. Rev. B* **72** 064304
- [3] Conwell E M and Rakhmanova S V 2000 *Proc. Natl Acad. Sci. USA* **97** 4556–60
- [4] Li M and Lin X 2010 *Phys. Rev. B* **82** 155141
- [5] Vos F L J, Aalberts D P and van Saarloos W 1996 *Phys. Rev. B* **53** 14922
- [6] de Oliveira Neto P H, da Cunha W F and Silva G M e 2009 *Europhys. Lett.* **88** 67006
- [7] Marchand D J J, De Filippis G, Cataudella V, Berciu M, Nagaosa N, Prokof'ev N V, Mishchenko A S and Stamp P C E 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 266605
- [8] Hirai D, Ali M N and Cava R J 2013 *J. Phys. Soc. Japan* **82** 124701
- [9] Kim J S *et al* 2007 *Phys. Rev. B* **76** 014516
- [10] Kopidakis G, Soukoulis C M and Economou E N 1996 *Europhys. Lett.* **33** 459
- [11] Kopidakis G and Soukoulis C M 1995 *Phys. Rev. B* **51** 15038
- [12] Ivanchenko M V 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 175507
- Flach S, Krimer D O and Skokos C H 2009 *Phys. Rev. Lett.* **102** 024101
- Skokos C H, Krimer D O, Komineas S and Flach S 2009 *Phys. Rev. E* **79** 056211
- Sangiovanni G, Capone M, Castellani C and Grilli M 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 026401
- [13] de Moura F A B F, Gléria I, dos Santos I F and Lyra M L 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 096401
- [14] de Moura F A B F, Vidal E J G G, Gleria I and Lyra M L 2010 *Phys. Lett. A* **374** 4152
- [15] de Moura F A B F, Caetano R A and Santos B 2012 *J. Phys.: Condens. Matter* **24** 245401
- [16] Chen D, Molina M I and Tsironis G P 1993 *J. Phys.: Condens. Matter* **5** 8689
- Pan Z, Xiong S and Gong C 1997 *Phys. Rev. E* **56** 4744
- Yamada H and Iguchi K 2010 *Adv. Condens. Matter Phys.* **2010** 380710
- [17] Kopidakis G, Komineas S, Flach S and Aubry S 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 084103
- Pikovskiy A S and Shepelyansky D L 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 094101
- Hajnal D and Schilling R 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 124101
- Lahini Y, Avidan A, Pozzi F, Sorel M, Morandotti R, Christodoulides D N and Silberberg Y 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 013906
- [18] Dias W S, Lyra M L and de Moura F A B F 2012 *Eur. Phys. J. B* **85** 7
- [19] Davydov A S 1991 *Solitons in Molecular Systems* 2nd edn (Dordrecht: Reidel)
- [20] Scott A C 1992 Davydovs soliton *Phys. Rep.* **217** 1–67
- [21] Davydov A S 1979 *Phys. Scr.* **20** 387–94
- [22] Davydov A S 1977 *J. Theor. Biol.* **66** 379–87
- [23] Davydov A S 1982 *Biology and Quantum Mechanics* (New York: Pergamon)
- [24] Brizhik L, Chetverikov A P, Ebeling W, Ropke G and Velarde M G 2012 *Phys. Rev. B* **85** 245105
- [25] Chetverikov A P, Ebeling W and Velarde M G 2011 *Physica D* **240** 1954
- [26] Hennig D, Velarde M G, Ebeling W and Chetverikov A P 2008 *Phys. Rev. E* **78** 066606
- [27] Makarov V A, Velarde M G, Chetverikov A P and Ebeling W 2006 *Phys. Rev. E* **73** 066626
- [28] Hennig D, Neissner C, Velarde M G and Ebeling W 2006 *Phys. Rev. B* **73** 024306
- [29] Hennig D, Velarde M G, Ebeling W and Chetverikov A P 2007 *Phys. Rev. E* **76** 046602
- [30] Alder B J, Runge K J and Scalettar R T 1997 *Phys. Rev. Lett.* **79** 3022
- [31] Brizhik L S and Eremko A A 1995 *Physica D* **81** 295–304
- [32] Cantu O G, Cruzeiro L, Velarde M G and Ebeling W 2011 *Eur. Phys. J. B* **80** 545–54
- [33] Velarde M G and Neissner C 2008 *Int. J. Bifurcat. Chaos* **18** 885–90
- [34] Velarde M G, Ebeling W and Chetverikov A P 2011 *Int. J. Bifurcat. Chaos* **21** 1595–600
- [35] Chetverikov A P, Ebeling W and Velarde M G 2011 *Eur. Phys. J. B* **80** 137–45
- [36] Velarde M G, Ebeling W and Chetverikov A P 2009 *Eur. Phys. J. B* **70** 217–27
- [37] Velarde M G, Ebeling W and Chetverikov A P 2005 *Int. J. Bifurcat. Chaos* **15** 245
- [38] Velarde M G 2010 *J. Comput. Appl. Math.* **233** 1432
- [39] Velarde M G, Ebeling W and Chetverikov A P 2012 *Eur. Phys. J. B* **85** 291
- [40] Ebeling W, Chetverikov A P, Röpke G and Velarde M G 2013 *Contrib. Plasma Phys.* **53** 736
- [41] Chetverikov A P, Ebeling W and Velarde M G 2013 *Eur. Phys. J.—Special Top.* **222** 2531
- [42] de Moura F A B F 2013 *Physica D* **253** 66
- [43] Astakhova T Y, Likhachev V N and Vinogradov G A 2013 *Russ. J. Phys. Chem. B* **7** 521
- [44] Likhachev V N, Astakhova T Y and Vinogradov G A 2013 *Theor. Math. Phys.* **176** 1087
- [45] Astakhova T Y, Likhachev V N and Vinogradov G A 2012 *Russ. Chem. Rev.* **81** 994
- [46] Gorodetsky A, Buzzeo M C and Barton J K 2008 *Bioconjug. Chem.* **19** 2285–96
- [47] Mallajosyula S S and Pati S K 2010 *J. Phys. Chem. Lett.* **1** 1881
- [48] Genereux C G, Boal A K and Barton J K 2010 *J. Am. Chem. Soc.* **132** 891
- [49] Cordes M and Giese B 2009 *Chem. Soc. Rev.* **38** 892
- [50] Kawai K, Kodera H, Osakada Y and Majima T 2009 *Nat. Chem.* **1** 156
- [51] Su W P, Schrieffer J R and Heeger A J 1979 *Phys. Rev. Lett.* **42** 1698
- Heeger A J, Kivelson S, Schrieffer J R and Su W-P 1988 *Rev. Mod. Phys.* **60** 781
- [52] de Moura F A B F 2011 *Int. J. M. Phys. C* **22** 63
- [53] Hairer E, Nørsett S P and Wanner G *Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems (Springer Series in Computational Mathematics)* (New York: Springer)

- Press W H, Flannery B P, Teukolsky S A and Wetterling W T
2007 *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*
3rd edn (New York: Cambridge University Press)
- [54] de Moura F A B F 2007 *Eur. Phys. J. B* **58** 389
- [55] Sales M O and de Moura F A B F 2012 *Physica E*
45 97
- [56] Wagner M, Zart G, Vazquez-Marquez J, Viliani G,
Frizzera W, Pilla O and Montagna M 1992 *Phil. Mag. B*
65 273
- [57] Zavr G S, Wagner M and Lütze A 1993 *Phys. Rev. B*
47 4108
- [58] Garnier J and Abdullaev F K H 2003 *Phys. Rev. E* **67** 026609
- [59] Fermi E, Pasta J R and Ulam S M 1955 *Los Alamos Nat. Lab.*
Report LA-1940
- [60] dos Santos C A A, Assun T F, Lyra M L and de Moura F A B F
2012 *Int. J. M. Phys. C* **23** 1240009
- [61] Katsanos D E, Evangelou S N and Xiong S J 1995
Phys. Rev. B **51** 895

Sub-diffusive electronic transport in a DNA single-strand chain with electron–phonon coupling

M O Sales¹, M L Lyra¹, F A B F de Moura¹, U L Fulco²
and E L Albuquerque²

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

² Departamento de Biofísica e Farmacologia, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, 59072-970 Natal-RN, Brazil

E-mail: fidelis@fis.ufal.br

Received 2 November 2014, revised 9 December 2014

Accepted for publication 15 December 2014

Published 7 January 2015



CrossMark

Abstract

We investigate the electronic wavepacket dynamics in a finite segment of a DNA single-strand chain considering the electron–phonon coupling. Our theoretical approach makes use of an effective tight-binding Hamiltonian to describe the electron dynamics, together with a classical harmonic Hamiltonian to treat the intrinsic DNA vibrations. An effective time-dependent Schrödinger equation is then settled up and solved numerically for an initially localized wave-packet using the standard Dormand–Prince eighth-order Runge–Kutta method. Our numerical results indicate the presence of a sub-diffusive electronic wavepacket spread mediated by the electron–phonon interaction.

Keywords: localization, DNA, electron-lattice

(Some figures may appear in colour only in the online journal)

1. Introduction

Recent advances in physical and biochemical methods have strongly supported that biomolecules can be a proper medium for charge transport. Several studies aiming to characterize the current flow through double-strand DNA molecules connected with metal electrodes have suggested a wide range of regimes ranging from high electron mobilities to insulator behavior [1–7]. The observed distinct behaviors is intimately related to the characteristics of the contact with the electrodes, the environment, the mechanical stress, the molecular orientation, as well as upon the integrity of the molecule itself [8, 9]. In general, biostructures show complex topologies with high flexibility and many degrees of freedom [8]. The ability of biological organisms to manufacture such complex molecules is one of the main drivers of bio-electronics research. This important feature counterbalances with their low lifetime due to degradation, as well as their reactivity with water and other substances (for a recent review see [10]). Considering the growing technological interest in developing bio-electronic

devices based on organic molecules [8], it is fundamental to deeply understand the charge transport through organic molecules, in special DNA, RNA and proteins. Along this direction, new mathematical and numerical methodologies are necessary to study these molecules due to their complexity when compared with the more traditional solid-state materials.

In determining the electronic properties of biomolecules, the molecular structure must be calculated, and a suitable transport theory must be used to describe the time evolution of the appropriate charge distribution. For the DNA molecule, the possibility of replicating and performing its biological function implies rapid structural dislocations, measured by dramatic nonlinear deformations leading to Anderson localization, i.e. to the exponential localization of the electronic states, and thus significant reduction of conductance [5–7, 10]. A theoretical description of these effects is usually carried out at the level of polaronic theories [11, 12], despite the dislocation's sufficiently high amplitude.

Interaction of a DNA electronic subsystem (considered in the one-band approximation) with the conformationally

active vibrational modes of the chain (considered as a symbolic sequence of a four letter alphabet, namely guanine-*G*, cytosine-*C*, adenine-*A* and thymine-*T*) is, in most cases, non-linear [13]. The electron-lattice coupling is mainly considered to describe the DNA electron interaction with the stretching/squeezing transversal harmonic vibrational modes of the DNA chain [14]. These dislocations can either occur in a synchronized manner (normal mode propagation) [15] or incoherently (thermal motion) [16–18].

In low-dimensional systems, like the majority of the biological molecules, the effect of nonlinearity seems to be dominant over the role played by disorder. For instance, the spreading of an initially localized wave-packet in a 1D discrete nonlinear Schrödinger lattice with disorder was recently studied, and it was observed that Anderson localization is suppressed and sub-diffusive dynamics takes place above a certain critical nonlinearity strength [19]. The electronic wave-packet dynamics in a twisted ladder geometry mimicking a DNA-like segment has also been addressed considering an electron-phonon interaction within the adiabatic approximation [20]. The results suggested a diffusive-like spread of the electronic wave-packet induced by the nonlinearity [21].

Tight-binding models describing the electronic wavepacket dynamics in DNA segments have been successfully accounted for the Anderson localization of the one-electron eigenstates [5–7, 10, 22, 23]. Due to the random distribution of the distinct bases, the electronic eigenstates remain exponentially localized on small segments of the DNA chain. Notwithstanding, the presence of some degree of correlation in the disorder distribution has a limited influence on the nature of these eigenstates [22]. Furthermore, simple models considering a single-strand DNA (ss-DNA) molecule are able to capture the main aspects related to the disorder effect on the nature of the electronic states [22, 23]. On the other hand, as far as the vibrational modes of a DNA molecule are concerned, the effective spring constant between neighboring bases mediated by the sugar-phosphate backbone is much larger than the spring constants between paired bases, i.e. the harmonic inter-strand coupling is much weaker than the intra-strand coupling [24]. Therefore, the main influence of the electron-lattice coupling in DNA segments is expected also to be well described by single-stranded models, avoiding the use of the more robust, although more physically and biologically relevant, double stranded DNA (ds-DNA) molecule.

Following the lines described above, it is the aim of this paper to study the dynamics of a one-electron wavepacket spreading in a single-strand DNA molecule in the presence of harmonic, as well as anharmonic vibrations associated with the bases displacements. The single-strand DNA chain contains four distinct values of the on-site potentials simulating the four bases of a DNA molecule. Further, we will take into account a direct coupling between the electron dynamics and the local vibrations. The electronic hopping energy will be assumed to depend on the effective distance between nearest-neighboring bases, increasing exponentially when the distance between neighboring bases decreases. By solving numerically the equations describing the dynamics for the electron and the

lattice vibrations, we compute the spreading of an initially localized electronic wave-packet, whose solution suggests that the electron-phonon term considered here promotes a sub-diffusive spread for long times.

The plan of this work is as follows: in section 2 we present the effective tight-binding Hamiltonian together with the lattice Hamiltonian to describe the electronic motion. Section 3 depicts our main results with a detailed discussion of them. The conclusions are in section 4.

2. Model and formalism

Our basic theoretical model makes use of an effective tight-binding Hamiltonian describing one electron moving in a DNA single-strand segment with N bases, coupled to the lattice harmonic vibrations, whose expression is given by [25]:

$$H = H_{\text{lattice}} + \sum_{n=1}^N \left[V_{n+1,n} (c_{n+1}^\dagger c_n) + V_{n,n-1} (c_n^\dagger c_{n-1}) \right] + \sum_{n=1}^N \epsilon_n c_n^\dagger c_n. \quad (1)$$

Here, $V_{n\pm 1,n}$ is the electronic hopping term between two adjacent nucleotides, whose ionization energies at site n are defined by ϵ_n . Also, H_{lattice} represents the classical Hamiltonian describing the lattice harmonic vibrations:

$$H_{\text{lattice}} = \sum_{n=1}^N \frac{P_n^2}{2m_n} + \frac{1}{4} \left[\beta_n Q_+^2 + \beta_{n-1} Q_-^2 \right], \quad (2)$$

with $Q_+ = Q_{n+1} - Q_n$ and $Q_- = Q_n - Q_{n-1}$. P_n and Q_n are the classical momentum and displacement coordinates of the DNA's bases (*G*, *C*, *A*, and *T*) at site n . In this approach, we will consider all elastic forces constants, i.e. $\beta_n = \beta_{n-1} = \beta$. The ionization energies at site n , ϵ_n , will be constructed as follows: initially we consider an uncorrelated random sequence containing four distinct values of the on-site ionization energies mimicking the sequence of the DNA's bases. For the on-site energies we used the values $\epsilon_G = 7.75$, $\epsilon_C = 8.87$, $\epsilon_A = 8.24$, and $\epsilon_T = 9.14$, all units in eV [10]. The fraction of each base is taken to be the same one found in the firstly sequenced human chromosome 22 (Ch 22), entitled NT_{011520} , whose number of letters is about 3.4×10^6 nucleotides. This sequence was retrieved from the internet page of the National Center of Biotechnology Information. However, we would like to stress that the exact sequence of bases of NT_{011520} is not relevant to the general dynamical behavior we intend to explore, as long as the bases used for the calculation comprise each base (*G*, *C*, *A*, and *T*) to provide mass disorder. The mass distribution m_n will be the masses of the four distinct bases, considering all masses in units of the cytosine mass (M_C), i.e.: $m_A = M_A/M_C = 135.13/111.10$, $m_G = M_G/M_C = 151.13/111.10$, $m_T = M_T/M_C = 126.11/111.10$, and $m_C = 1$.

The interaction between the electron and the vibrational modes in our model relates the electronic hopping term $V_{n+1,n}$

with the displacement coordinates of the sites from their equilibrium positions [26–29]:

$$V_{n+1,n} = -\exp[-\alpha Q_+]. \quad (3)$$

The coefficient α defines how the electronic hopping term $V_{n+1,n}$ depends on the relative displacement of the lattice units, i.e. it determines the electron–phonon coupling strength. Accordingly to [27–29], the exponential form of the hopping term $V_{n+1,n}$ stands for both small and large relative displacement, thus going beyond the range of interactions considered in the SSH (Su–Schrieffer–Heeger) theory [30–33]. For small relative displacements, we recover the SSH approximation

$$V_{n+1,n} \approx -[1 - \alpha(Q_{n+1} - Q_n)]. \quad (4)$$

We will follow the time evolution of an initially localized one-electron wave-packet. The time-dependent wave-function $|\Phi(t)\rangle$ can be obtained by the numerical solution of the time-dependent Schrödinger equation in which the electron is initially localized at site $N/2$, i.e.:

$$|\Phi(t=0)\rangle = \sum_n c_n(t=0)|n\rangle, \quad (5)$$

where

$$c_n(t=0) = \delta_{n,N/2}. \quad (6)$$

The Wannier amplitudes evolve in time according to the time-dependent Schrödinger equation as ($\hbar = 1$)

$$i \frac{dc_n(t)}{dt} = \epsilon_n c_n(t) - \exp(-\alpha Q_+) c_{n+1}(t) - \exp(-\alpha Q_-) c_{n-1}(t). \quad (7)$$

In this system of units, time is given in units of $\hbar/eV = 4.13 \times 10^{-15}$ s. Moreover, the lattice equation can be written as

$$m_n \frac{d^2 Q_n(t)}{dt^2} = \left[\beta_n Q_+ - \beta_{n-1} Q_- \right] - \alpha \left[\exp(-\alpha Q_+) (c_{n+1}^* c_n + c_{n+1} c_n^*) - \exp(-\alpha Q_-) (c_n^* c_{n-1} + c_n c_{n-1}^*) \right] \quad (8)$$

In what follows the elastic constant will be in units of $m_C eV^2/\hbar^2 = 1.06 \times 10^4 \text{ N m}^{-1}$, the lattice displacement in Å, and α in units of Å⁻¹. Our numerical formalism is based on the precise numerical solution of the previous equations (7) and (8). Both dynamic equations will be solved by using a standard Dormand–Prince eighth-order Runge–Kutta method monitoring the local truncation error [34, 35], with time step $dt \approx 10^{-3}$. Aiming to characterize the dynamic behavior of the wave-packet, we compute typical quantities that can bring information about the electronic transport on this model, namely the participation function $\xi(t)$ and the wave-function spread $\sigma(t)$.

The participation function is defined by [36, 37]

$$\xi(t) = 1 / \sum_n |c_n(t)|^4, \quad (9)$$

giving an estimation of the number of sites over which the wave-packet is spread at time t . In particular, the

asymptotic participation function becomes size-independent for a localized wave-packet. On the other hand, $\xi(t \rightarrow \infty) \propto N$ corresponds to the regime where the wave-packet is distributed over the lattice [25, 36, 37].

The wave-packet mean-square displacement $\sigma(t)$ is defined by [38]

$$\sigma(t) = \sqrt{\sum_n (n - n_0)^2 |c_n(t)|^2}. \quad (10)$$

Note that $\sigma(t)$ varies from 0, for a wave-function confined to a site, to a term proportional to the number of sites, for a wave extended over the whole system.

We will also study the temporal auto-correlation function $C(t)$ defined by [38, 39]:

$$C(t) = \frac{1}{t} \int_0^t R(t') dt', \quad (11)$$

where $R(t') = |c_{N/2}(t')|^2$ denotes the return probability. In the asymptotic limit $t \rightarrow \infty$, the temporal auto-correlation function vanishes as $C(t) \propto 1/t^\theta$, where θ represents, for $d = 1$, the exponent governing the size scaling of the time-independent participation function for low energies, i.e. $\xi(E \approx 0) \propto N^\theta$ [38, 39]. This scaling relation is a direct consequence of the fractal character of the eigenfunctions fluctuations [40, 41]. In the long time regime, the return probability saturates at a finite value whenever the wave-packet remains trapped in a finite region around the starting point. Otherwise, it vanishes as the wave-packet continuously spreads over the lattice [42]. Whenever the system presents a phase of truly extended states, the auto-correlation function vanishes linearly with $1/t$. A slower non-linear decay is usually a signature of an intermediate dynamical regime.

3. Results and discussions

Let us now present and discuss our main achievements. In order to avoid border effects when the wavepacket reaches the borders of a finite DNA segment, we performed our numerical calculations on a self-expanding chain. As a result, we measured the temporal evolution of a wavepacket initially located at the center of the self-expanding chain, i.e. $c_n(t=0) = \delta_{n,N/2}$. When the probability of finding the electron at one of the ends of the chain exceeds 10^{-40} , fifteen new sites are added to them. In this way, one avoids eventual finite-size effects on the wavepacket dynamics. This technique has been successfully employed in previous studies of one-electron wavepacket dynamics and provides reliable results concerning the asymptotic spread of diffusing wavepackets [21, 33, 37, 44, 46]. The lattice equations were solved by considering an initial impulse excitation ($P_n = \delta_{n,N/2}$; $Q_n = 0$) according to [43]. We kept the wave-function norm within the limit $|1 - \sum_n |c_n(t)|^2| < 10^{-10}$ for all times considered, using 50 disorder configurations.

Initially, we plot in figures 1(a)–(h), the mean squared displacement $\sigma(t)$ and the participation number $\xi(t)$ for the

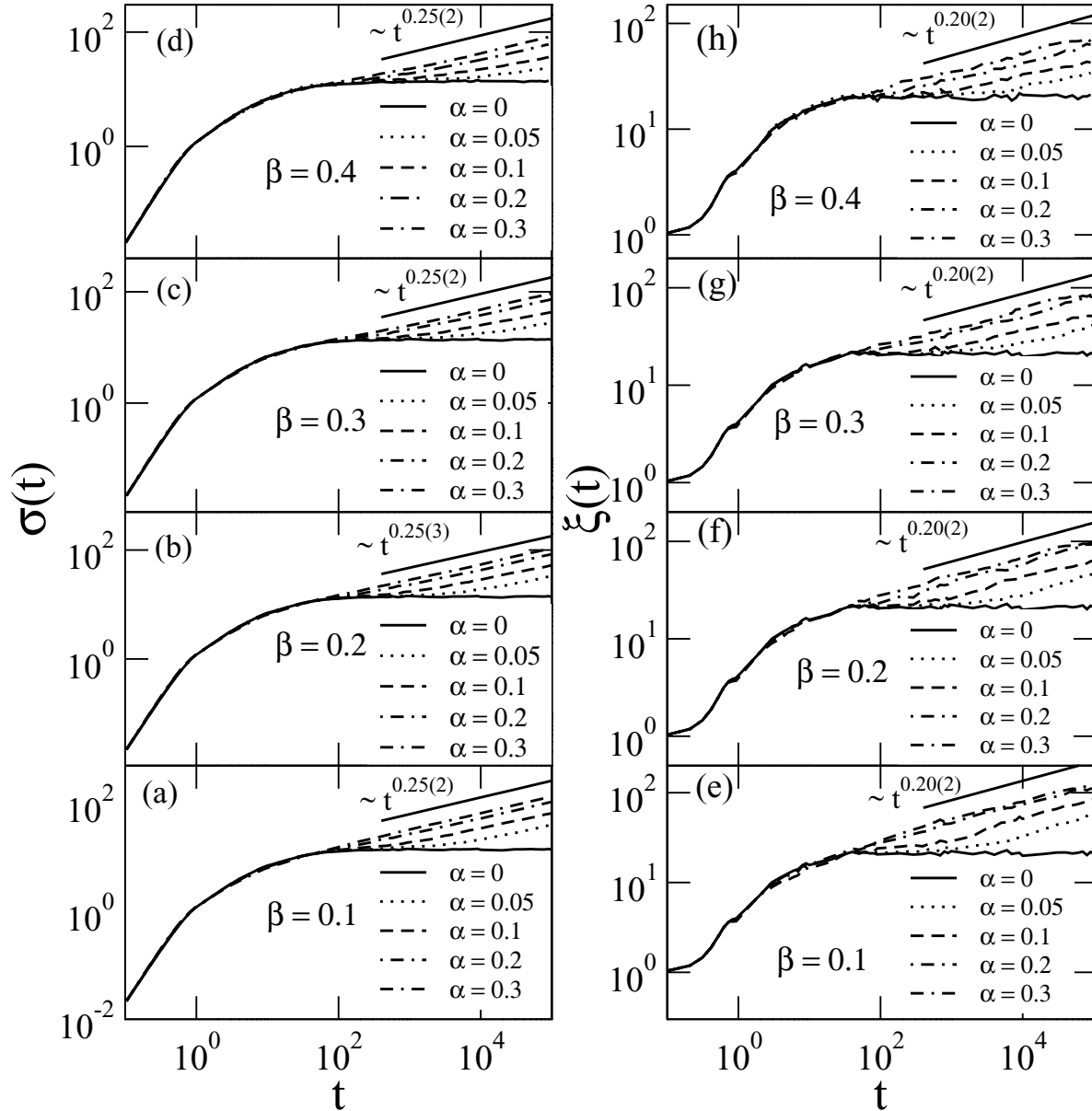


Figure 1. (a)–(d) Mean-square displacement $\sigma(t)$ and (e)–(h) participation function $\xi(t)$ (in units of the lattice spacing) versus time for several values of the off-diagonal electron–phonon coupling strength α , and spring constant β (all units are given in the text). Our numerical results indicate that off-diagonal nonlinearity ($\alpha > 0$) induces the sub-diffusive spreading of the wavepacket, leading to $\sigma(t) \propto t^{0.25(2)}$ and $\xi(t) \propto t^{0.20(3)}$ (the numbers in parenthesis stand for the fitting error bars).

following values of the electron–phonon coupling strength α : 0, 0.05, 0.1, 0.2, 0.3. We consider the spring constant β varying from 0.1 up to 0.4. In the absence of the non-linearity ($\alpha = 0$) we observe the well-known Anderson localization regime in which the wave-packet does not expand [37]. This behavior was stressed in details in [22, 23], including several kinds of diagonal DNA-like disorder. Moreover, figure 1 also shows the sub-diffusive regime that exists for $\alpha > 0$. By analyzing these data, we found that the mean-square displacement $\sigma(t)$ behaves like $t^{0.25(3)}$, while the participation function $\xi(t)$ has a temporal dependence $t^{0.20(3)}$. We emphasize that these results are in agreement with those found in [21], where it was verified a sub-diffusive behavior related to the nonlinear Schrödinger DNA equation for a twisted ladder geometry with an adiabatic

electron–phonon interaction. However, in this previous work, the electron–phonon coupling was taken into account in the time-dependent Schrödinger equation through a cubic non-linearity (in the absence of any lattice equations), in such a way that the lattice vibrations and its coupling with the electronic dynamics were treated effectively by using a discrete nonlinear Schrödinger equation. Furthermore, a sub-diffusive regime was also found in discrete nonlinear Schrödinger models with off-diagonal non-linearity [44].

Our model considers two distinct sources of static disorder, namely: a disorder within the on-site energy distribution of DNA’s bases (equation (7)), and also a disorder within the mass distribution of the bases (equation (8)). Therefore, both the tight-binding electron Hamiltonian and

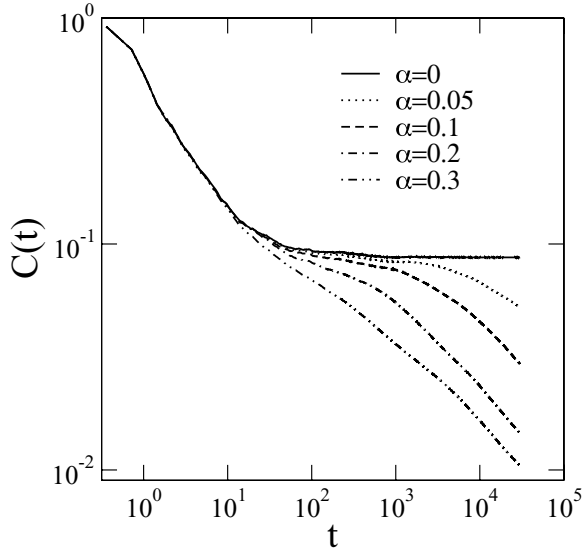


Figure 2. Temporal auto-correlation function $C(t)$ versus t for the electron–phonon coupling strength $\alpha = 0$ up to 0.3.

the classical Hamiltonian describing the lattice harmonic vibrations contain static disorder. Besides these sources of static disorder, the electron hopping amplitudes also dynamically change due to the coupling with the lattice vibrations. This feature adds a dynamical source of disorder to the electron propagation. Similarly, the electron propagation couples to the lattice displacements resulting in an effective dynamical disorder affecting the lattice vibrations. Our results suggest that even in the presence of these two static disorder distributions the electron–phonon term can promote electronic transport. We stress that this result evidences the consistence of the two formalisms, namely, the nonlinear discrete Schrödinger equation used in [21, 44] and the quantum-classical treatment considered in the present work.

In figure 2 we investigate the electronic dynamics within our DNA model by using the temporal auto-correlation function. Our calculations were done for the spring constant $\beta = 0.4$, with the electron–phonon coupling strength α varying from 0 up to 0.3. In the absence of the electron–phonon coupling ($\alpha = 0$) we observe that the auto-correlation function saturates at large time t . In this region, the static disorder of the DNA model, due to the two distinct sources described above, promotes the localization of the electronic wave-function. Therefore, the return probability at the large time t saturates at a finite value, meaning that the auto-correlations remain constant in time. For $\alpha > 0$ we observe a slow non-linear decay of the temporal auto-correlation function $C(t)$. For $\alpha > 0.1$ and for long times, we can estimate $C(t) \approx t^{-0.40(1)}$.

Formally, whenever the system presents a phase of truly extended states, the auto-correlation function vanishes linearly with $1/t$. In the present DNA model, our result showing a non-linear decay of $C(t)$ suggests that the eigenfunctions exhibit an intermediate nature between the fully localized and the extended states. In [38] it was investigated an electronic model with correlated disorder in which an intermediate dynamical regime non-ballistic was associated with the presence of

weakly localized eigenfunctions. We emphasize that in our model we are unable to calculate directly these eigenfunctions due to the time-dependence of the hopping amplitudes. As a consequence, a comparison of the auto-correlation function exponent and the size scaling of the static participation number can not be drawn.

Next, we would like to stress the classical harmonic approximation imposed on the lattice harmonic vibrations depicted in equation (2), which was also considered in several previous works [21, 30, 44]. In a vibrating system, the harmonic approximation takes into account only those with small amplitude. Therefore, some thermal effects can promote strong vibrations and an anharmonic treatment could be important. In view of that, let us analyze briefly the effect of nonlinear atomic forces on our results. We rewrite the lattice Hamiltonian (equation (2)) in order to include an anharmonic cubic force yields:

$$H_{\text{lattice}}^* = H_{\text{lattice}} + (\eta/6) \sum_n (Q_+^3 + Q_-^3), \quad (12)$$

where η represents the strength of the cubic non-linearity considered in the model. The quantum Schrödinger equation (7) remains unchanged, and the lattice equation needs to be rewritten in order to include the anharmonic term, yielding:

$$m_n \frac{d^2 Q_n(t)}{dt^2} = \left[\beta_n Q_+ - \beta_{n-1} Q_- \right] + \eta \left[Q_+^2 - Q_-^2 \right] - \alpha \left[\exp(-\alpha Q_+) (c_{n+1}^* c_n + c_{n+1} c_n^*) - \exp(-\alpha Q_-) (c_n^* c_{n-1} + c_n c_{n-1}^*) \right]. \quad (13)$$

In what follows, η will be given in units of $m_c \text{ eV}^2 / \hbar^2 \text{ \AA} = 1.06 \times 10^{-6} \text{ N m}^{-2}$. Figures 3(a) and (b) summarize our calculations in the presence of the anharmonicity. We consider the spring constant $\beta = 0.4$, and the electron–phonon coupling $\alpha = 0.3$ (this value was the highest intensity we were able to proceed with our numerical calculations within the desired accuracy). We observe that the wave-packet width $\sigma(t)$ diverges in a sub-diffusive way ($\sigma \propto t^{0.25(2)}$) similar to that observed in the absence of anharmonicity ($\eta = 0$). Moreover, the temporal auto-correlation function (see figure 3(b)) vanishes in a similar way to our calculations for $\eta = 0$, suggesting that even in the presence of a weak cubic anharmonicity for the electron–phonon coupling, a sub-diffusive dynamic takes place in the present DNA single strand model.

Before concluding, we perform now a scaling analysis similar to that used in [45]. To do that, we considered that the complete electronic wave-packet can be divided in two parts:

- (a) a small fraction around the initial position, i.e. with the return probability behaving as $c_{n < n_0}(t) \propto t^{-n_0}$, where n_0 represents few sites;
- (b) a power-law tail up to a cutoff distance x_m from the initial position (after this cutoff distance, an exponential decay takes place).

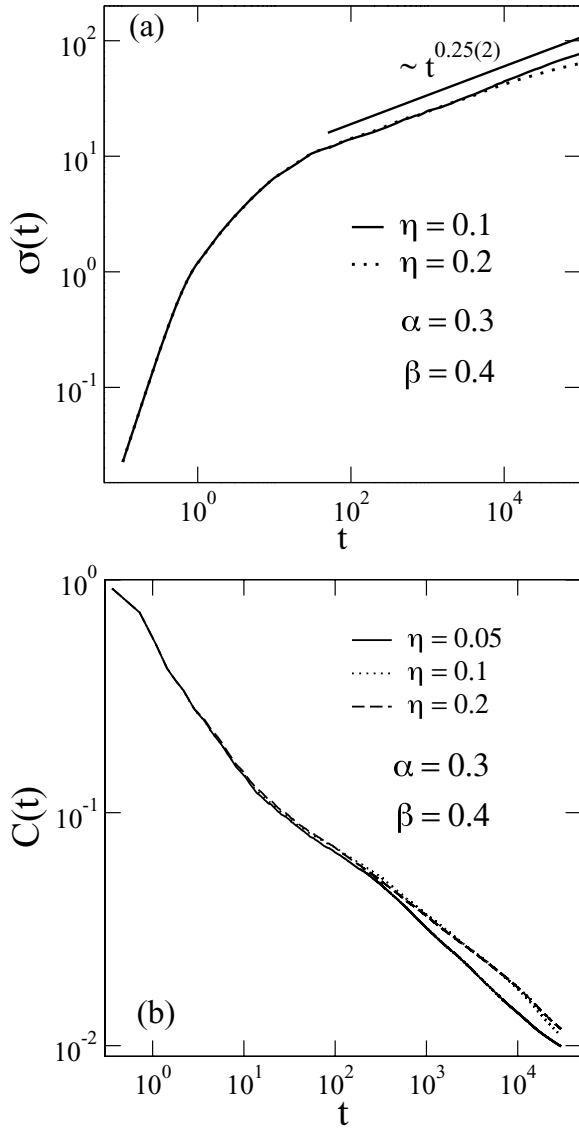


Figure 3. (a) Mean-square displacement $\sigma(t)$ and (b) temporal auto-correlation function $C(t)$ versus t for several values of the anharmonicity $\eta = 0.05$ up to 0.2 (unit is given in the main text). The off-diagonal electron–phonon coupling strength α was considered equal to 0.3 , the highest intensity value at which we were able to get accurate numerical calculations. We observe that, even in the presence of weak cubic anharmonicity, the electron–phonon coupling promotes a sub-diffusive dynamics in a DNA single strand chain.

Therefore, x_m actually delimits the wave-packet front and evolves in time as $x_m \propto t^\nu$, leading to [45]:

$$|c(t, n)|^2 \propto A_1 t^{-\nu} \quad \text{for } n < n_0 \quad (14)$$

$$|c(t, n)|^2 \propto A_2 t^{-\gamma\phi} n^{-\phi} \quad \text{for } n_0 < n < x_m \quad (15)$$

For a power-law tail $x^{-\phi}$ with $\phi > 1$, equation (15) does not contribute to the normalization of the wave-function. Hence equation (14) dominates, implying that we should have $\nu = 0$ in order to keep the complete electronic wave-packet normalized. This case with $\phi > 1$ was investigated in [45] and is completely distinct from the present case in which $\nu > 0$.

On the other hand, for $\phi < 1$ equation (15) will contribute to the normalization and hence we need to treat it as follows:

$$\int_0^{n_0} A_1 t^{-\nu} dn = A_1 t^{-\nu} n_0 = \text{constant}. \quad (16)$$

To keep the wave-function normalized, n_0 should be proportional to t^ν . As a consequence, the electronic wave-packet can be summarized as:

$$|c(t, n)|^2 = \begin{cases} A_1 t^{-\nu} & \text{for } 0 < n < n_0 \propto t^\nu, \\ A_2 t^{-\gamma\phi} n^{-\phi} & \text{for } n_0 < n < x_m. \end{cases} \quad (17)$$

By using the scaling hypothesis of the previous equation, we can estimate analytically the time dependent behavior of the electronic wave-packet spread and the participation number. The participation number $\xi(t)$ can be written, in the continuous limit as:

$$\xi^{-1}(t) = \int_0^{n_0} A_1^2 t^{-2\nu} dn + \int_{n_0}^{x_m} A_2^2 t^{-2\gamma\phi} n^{-2\phi} dn, \quad (18)$$

leading to the following approximate expression:

$$\xi^{-1}(t) \propto C_1 t^{-2\nu} n_0 + C_2 t^{-2\gamma\phi} n_0^{1-2\phi}. \quad (19)$$

Using (16) we have:

$$\xi^{-1}(t) \propto C_1 t^{-\nu} + C_2 t^{-2\gamma\phi - 2\phi\nu + \nu}. \quad (20)$$

Therefore, the first term will dominate the dynamics, and the time-dependent behavior of the participation number is characterized by $\xi(t) \propto t^\nu$.

The electronic spread $\sigma(t)$ can be obtained in a similar way. In the continuous limit $\sigma^2(t)$ is given by :

$$\sigma^2(t) = \int_0^{n_0} A_1 t^{-\nu} n^2 dn + \int_{n_0}^{x_m} A_2 t^{-\gamma\phi} n^{2-\phi} dn. \quad (21)$$

The second integration is dominated by the limit $n = x_m$ yielding

$$\sigma^2(t) \propto A_1 t^{-\nu} n_0^3 + B_2 t^{-\gamma\phi} x_m^{3-\phi}. \quad (22)$$

Using (16) again together with the expression $x_m \propto t^\nu$ we have:

$$\sigma^2(t) \propto A_1 t^{2\nu} + B_2 t^{\nu(3-2\phi)} \quad (23)$$

The second term will dominate the time-dependence of the wave-packet spread leading to $\sigma(t) \propto t^{\nu(3-2\phi)/2}$.

The next step is to check our scaling procedure by using our numerical calculations. In figure 4(a) we estimate the cutoff position x_m for times $t = 30\,000$ up to $180\,000$. Our best fit shows that $x_m \propto t^\nu$, with $\nu = 0.25(2)$. In figure 4(b) we plot the return probability ($R(t) = |c_{N/2}(t)|^2$) versus time. Our best fit shows that $R(t) \propto t^{-\nu}$ with $\nu = 0.20(2)$. Finally, in figure 4(c) we check our scaling hypothesis by collapsing the wave-function profile for distinct times in a single curve using $\phi = 0.5$, $\gamma = 0.25$, and $\nu = 0.2$, recovering the exponents of $\xi(t)$ and $\sigma(t)$ with good accuracy.

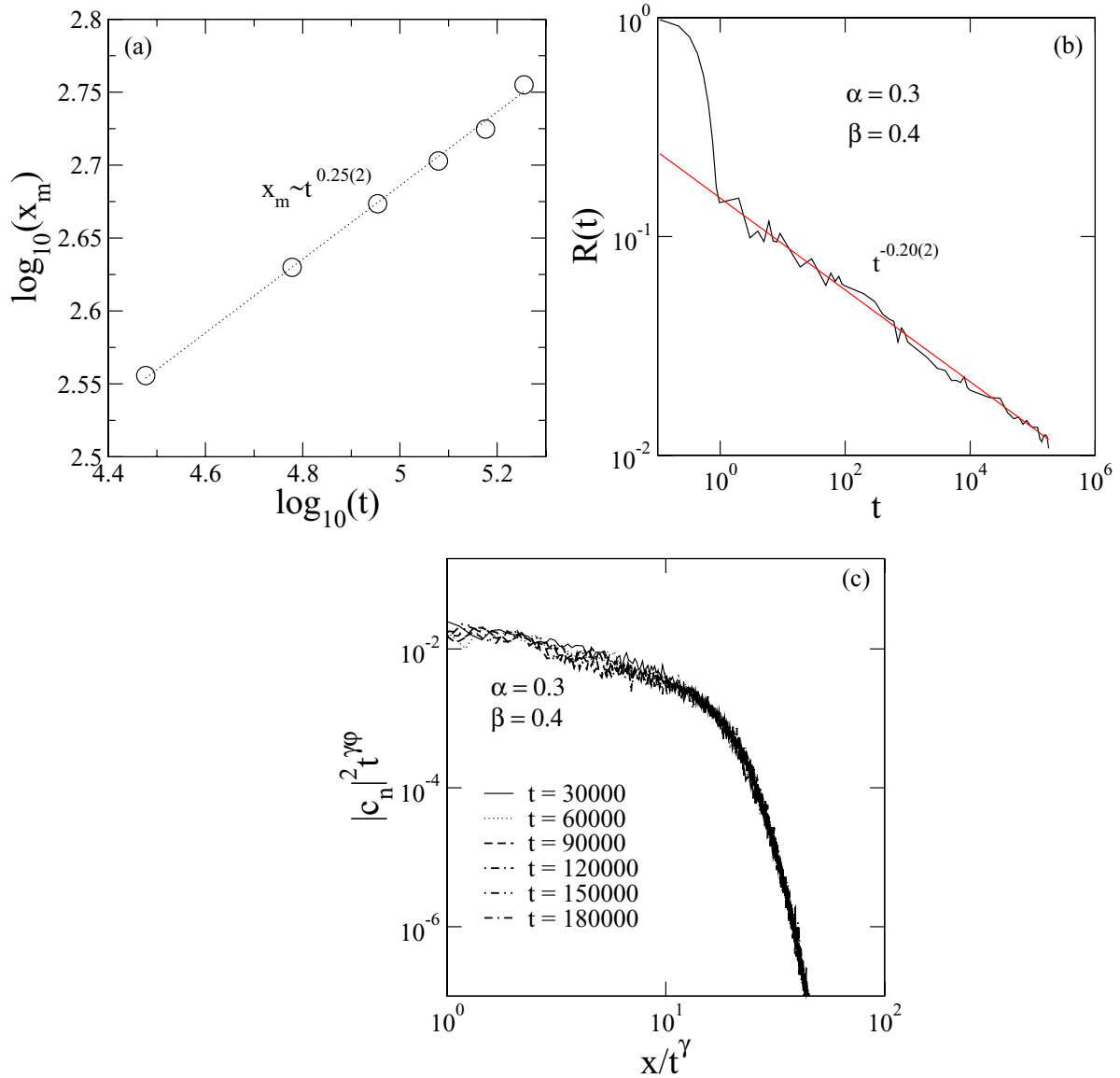


Figure 4. (a) Cutoff position x_m versus time for $t = 30\,000$ up to $180\,000$. Our best fit shows that $x_m \propto t^\gamma$ with $\gamma = 0.25(2)$. (b) The return probability ($R(t) = |c_{N/2}(t)|^2$) versus time. Our best fit shows that $R(t) \propto t^{-\nu}$ with $\nu = 0.20(2)$. (c) The data collapse of the wave-function profile for distinct times in a single curve with $\phi = 0.5$.

4. Summary and conclusions

In summary, we investigated the dynamics of a one-electron state moving in a finite DNA single-strand chain containing N bases considering, beyond the intrinsic DNA disorder distribution, the effect of the DNA’s vibrations.

We treated the electronic dynamics by using a tight-binding one-electron Hamiltonian, and a classical harmonic Hamiltonian to describe the DNA’s vibrations. The electron-lattice term was considered by assuming the electronic hopping energy dependent on the effective distance between the nearest-neighboring DNA’s bases. Our analysis was done by tuning the electron–phonon coupling strength α as well as the harmonic spring constant β .

Our calculations revealed that the electron–phonon coupling can break down the Anderson localization, promoting the appearance of a sub-diffusive dynamics for long times.

Furthermore, the effect of anharmonic corrections to the nearest-neighboring bases interaction was also taken into account by means of a cubic force similar to those considered in the Fermi–Pasta–Ulam model. The numerical result in the limit of weak anharmonicity corroborates that the electron–phonon coupling strength α indeed promotes a sub-diffusive wavepacket spread.

Acknowledgments

This work was partially financed by the Brazilian Research Agencies CAPES (PNPD), CNPq (INCT-Nano(Bio)Simes, Project no. 573925/2008-9 and Casadinho/Procad) and FAPEAL (Alagoas State Agency). The research work of MO Sales is supported by a graduate program sponsored by CAPES.

References

- [1] Winfree E, Liu F, Wenzler L A and Seeman N C 1998 *Nature* **394** 539
- [2] Porath D, Bezryadin A, De Vries S and Dekker C 2000 *Nature* **403** 635
- [3] Xu B, Zhang P, Li X and Tao N 2004 *Nano Lett.* **4** 1105
- [4] Kasumov Yu, Klinov D V, Roche P-E, Guéron S and Bouchiat H 2004 *Appl. Phys. Lett.* **84** 1007
- [5] Yamada H 2004 *Int. J. Mod. Phys. B* **18** 1697
- [6] Yamada H and Iguchi K 2010 *Adv. Condens. Matter Phys.* **2010** 380710
- [7] Klotsa D, Römer R A and Turner M S 2005 *Biophys. J.* **89** 2187
- [8] Shinwari M W, Deen M J, Starikov E B and Cuniberti G 2010 *Adv. Funct. Mater.* **20** 1865
- [9] Endres R G, Cox D L and Singh R R P 2004 *Rev. Mod. Phys.* **76** 195
- [10] Albuquerque E L, Fulco U L, Freire V N, Caetano E W S, Lyra M L and de Moura F A B F 2014 *Phys. Rep.* **535** 139
- [11] Basko D M and Conwell E M 2002 *Phys. Rev. B* **66** 094304
- [12] Conwell E M 2005 *Proc. Natl Acad. Sci.* **102** 8795
- [13] Starikov E B 2005 *Phil. Mag.* **85** 3435
- [14] Troisi A and Orlandi G 2002 *J. Phys. Chem. B* **106** 2093
- [15] Maciá E 2007 *Phys. Rev. B* **76** 245123
- [16] Senthilkumar K, Grozema F C, Fonseca Guerra C, Bickelhaupt F M, Lewis F D, Berlin Y A, Ratner M A and Siebbeles L A 2005 *J. Am. Chem. Soc.* **127** 14894
- [17] Gutiérrez R, Mohapatra S, Cohen H, Porath D and Cuniberti G 2006 *Phys. Rev. B* **74** 235105
- [18] Ren W, Wang J, Ma Z and Guo H 2006 *J. Chem. Phys.* **125** 164704
- [19] Pikovsky A S and Shepelyansky D L 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 094101
- [20] de Moura F A B F, Gléria I, dos Santos I F and Lyra M L 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 096401
- [21] de Moura F A B F, Fulco U L, Lyra M L, Domínguez-Adame F and Albuquerque E L 2011 *Physica A* **390** 535
- [22] Albuquerque E L, Vasconcelos M S, Lyra M L and de Moura F A B F 2005 *Phys. Rev. E* **71** 021910
- [23] Albuquerque E L, Lyra M L and de Moura F A B F 2006 *Physica A* **370** 625
- [24] Paéz C J, Rey-González R and Schulz P A 2010 *Phys. Rev. B* **81** 024203
- [25] de Moura F A B F 2013 *Physica D* **253** 66
- [26] Brizhik L, Chetverikov A P, Ebeling W, Ropke G and Velarde M G 2012 *Phys. Rev. B* **85** 245105
- [27] Hennig D, Velarde M G, Ebeling W and Chetverikov A P 2008 *Phys. Rev. E* **78** 066606
- [28] Makarov V A, Velarde M G, Chetverikov A P and Ebeling W 2006 *Phys. Rev. E* **73** 066626
- [29] Velarde M G 2010 *J. Comput. Appl. Math.* **233** 1432
- [30] Su W P, Schrieffer J R and Heeger A J 1979 *Phys. Rev. Lett.* **42** 1698
- [31] Su W P, Schrieffer J R and Heeger A J 1980 *Phys. Rev. B* **22** 2099
- [32] Heeger A J, Kivelson S, Schrieffer J R and Su W P 1988 *Rev. Mod. Phys.* **60** 781
- [33] Sales M O and de Moura F A B F 2014 *J. Phys.: Condens. Matter* **26** 415401
- [34] Hairer E, Nørsett S P and Wanner G 2010 *Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems (Springer Series in Computational Mathematics)* (Heidelberg: Springer)
- [35] Press W H, Flannery B P, Teukolsky S A and Wetterling W T 2007 *Numerical Recipes: the Art of Scientific Computing* 3rd edn (Cambridge: Cambridge University Press)
- [36] de Moura F A B F 2007 *Eur. Phys. J. B* **58** 389
- [37] Sales M O and de Moura F A B F 2012 *Physica E* **45** 97
- [38] de Moura F A B F, Coutinho-Filho M D, Lyra M L and Raposo E P 2004 *Europhys. Lett.* **66** 585
- [39] Kawarabayashi T and Ohtsuki T 1995 *Phys. Rev. B* **51** 10897
- [40] Chalker J T 1990 *Physica A* **167** 253
- [41] Huckestein B and Schweitzer L 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 713
- [42] Kramer B and MacKinnon A 1993 *Rep. Prog. Phys.* **56** 1469
- [43] Zavr G S, Wagner M and Lütze A 1993 *Phys. Rev. E* **47** 4108
- [44] de Moura F A B F, Caetano R A and Santos B 2012 *J. Phys.: Condens. Matter* **24** 245401
- [45] de Moura F A B F, Leão F F S and Lyra M L 2011 *J. Phys.: Condens. Matter* **23** 135303
- [46] Dunlap D H, Wu H L and Phillips P W 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 88



Absorption spectra and localization aspects of a one-dimensional model with stretched exponential correlated disorder



J.L.L. dos Santos, M.O. Sales, F.A.B.F. de Moura*

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

HIGHLIGHTS

- Localization and correlated disorder.
- Dependence of the absorption spectrum on the degree of correlations.
- Direct relation between absorption spectrum intensity and the localization length.

ARTICLE INFO

Article history:

Received 7 February 2014
Received in revised form 18 June 2014
Available online 5 July 2014

Keywords:

Localization
Correlated disorder
Absorption spectrum
Exciton

ABSTRACT

In this paper, we numerically analyze the dynamics of a one-electron in a one-dimensional model with stretched exponential correlations in the diagonal disorder distribution. We analyze in detail the effect of this correlated disorder on the localization aspects and the optical absorption. We offer an estimate for the localization properties and its dependence on the intrinsic correlations in the disorder distribution. Our calculations of the optical absorption spectra suggest that as the disorder distribution becomes more correlated the absorption intensity decreases. We explain this behavior in detail by using heuristic arguments.

© 2014 Elsevier B.V. All rights reserved.

1. Introduction

P.W. Anderson and co-workers proved by using scaling theory that extended eigenstates are absent in low-dimensional systems with uncorrelated disorder [1–5]. Since the end of the eighties, it was shown that low-dimensional disordered systems can support extended states or a localization–delocalization transition in the presence of short- or long-range correlations in the disorder distributions [6–30]. From the experimental point of view, V. Bellani et al. [16] and U. Kuhl et al. [19] have studied the effect of short- and long-range correlations on the transport properties of low-dimensional disordered systems. Moreover, it was suggested that an algorithm for generating random correlated sequences with desired mobility edges could be used in the manufacture of filters for electronic or optical signals [13]. Furthermore, the theoretical prediction that it is possible to see Anderson localization in a random multilayer filter [31] opened a wide field of investigations of effects of correlated disorder in optical systems.

In the recent years, a key problem in the context of condensed matter physics is to understand what is the effect of correlated disorder on the optical spectroscopy properties [32–42]. Usually, it is well known that optical spectroscopy fails in detecting localization–delocalization transitions. However, in Ref. [35] an anomalous behavior of the absorption

* Corresponding author. Tel.: +55 8299593909.
E-mail address: fidelis@fis.ufal.br (F.A.B.F. de Moura).

spectrum in a one-dimensional (1d) lattice with long-range correlated diagonal disorder was reported. It was found that long-range correlated diagonal disorder promotes the appearance of an absorption spectrum profile with two peaks [35]. Moreover, it was proposed to use this double-peak absorption spectrum as a spectroscopic tool to monitor the Anderson transition [35]. Furthermore, in Ref. [39] a double-peak absorption spectrum was numerically observed in a 1d lattice with long-range off-diagonal correlated disorder. In Ref. [40], a detailed study of the optical properties in 1d models with heavy-tailed Levy disorder distribution was done. The authors found a broadening of the optical line and a non universal scaling of the distribution of exciton localization lengths. The scaling of the optical absorption bandwidth and the non universality of the localization length within models with Levy disorder distribution were re-visited in Ref. [41]. In general, the study of the dependence of the absorption spectrum on the properties of the disorder distribution give us key information that can be used to study the nature of eigenstates.

In this paper, we report further progress along these above lines. We will study the problem of one-electron localization and optical absorption spectrum in 1d systems with correlated disorder. Our calculations were carried out on open chains with stretched exponential correlations in the disorder distribution. We perform exact numerical diagonalization to compute the participation number and the optical absorption spectrum. Our formalism provides an estimate for the dependence of the localization length on the type of correlated disorder considered here. In general, the localization length increases as the generalized correlation length is increased; however, we have not found a localization–delocalization transition. Our results for the optical absorption spectra reveal an interesting dependence of the absorption spectrum on the correlated disorder distribution. We observe that as the disorder distribution becomes more correlated the absorption intensity is decreased. We will explain this behavior in detail by using heuristic arguments. We obtain a simple relation between the optical absorption intensity and the localization length around the specific eigenstates with largest oscillator strength. Numerical calculations of the optical absorption and the localization length give support to our heuristic arguments.

2. Model and formalism

We consider the disordered Anderson model defined by the one-electron Hamiltonian [1,2,4,29]

$$H = \sum_{n=1}^N \epsilon_n |n\rangle \langle n| + t \sum_{\langle n,m \rangle} |n\rangle \langle m|, \quad (1)$$

where $|n\rangle$ is a Wannier state localized at site n and $\sum_{\langle n,m \rangle}$ represents a sum over nearest-neighbor pairs. Hereafter we will use energy units of $t = 1$. ϵ_n represents the on-site disorder distribution. We will consider open boundary conditions. In our work, we are interested in studying the nature of the eigenstates and the optical absorption spectrum by analyzing the above Hamiltonian in the presence of an on-site disorder distribution with stretched exponential correlations. The on-site potential ϵ_n with stretched exponential correlations will be generated by using the following formalism: initially we will calculate the sequence E_n defined by

$$E_n = \sum_{m=1}^N \eta_m * \exp(-|n - m|^\gamma / \zeta) \quad n = 1, \dots, N \quad (2)$$

where η_m are independent random numbers uniformly distributed in the interval $[-0.5, 0.5]$ and γ and ζ are tunable parameters that control the degree of correlations. The on-site potential ϵ_n is obtained by using the formula

$$\epsilon_n = [E_n - \langle E_n \rangle] / \sqrt{\langle E_n^2 \rangle - \langle E_n \rangle^2} \quad n = 1, \dots, N. \quad (3)$$

Therefore, the diagonal disorder displays zero mean value ($\langle \epsilon_n \rangle = 0$) and fixed standard deviation ($\sqrt{\langle \epsilon_n^2 \rangle - \langle \epsilon_n \rangle^2} = 1$). Let us discuss now some properties associated with the parameters γ and ζ . We will also discuss the values of γ and ζ that will be considered in our work. We can see that, for a fixed γ , the degree of correlations within the disorder distribution increases as ζ is increased. ζ is a type of generalized correlation length, and it can be used as a way to quantify the degree of correlation within the disorder distribution; however, formally, it is not the correlation length. Only for $\gamma = 1$ the ζ parameter has the status of the standard correlation length. We also emphasize that for $\gamma = 1$ the disorder distribution is exactly the same that was investigated in Ref. [29]. For a fixed value of $\zeta > 0$ and for $\gamma = 0$ there is no disorder at the sequence defined by Eq. (2). Therefore, the rescaling defined in Eq. (3) cannot be used in this case. In our study, we will focus our calculations on the disordered case ($\gamma > 0$). We observe that the internal correlations within the on-site energy distribution decrease substantially at the limit of large γ . From another side, for small γ , the decay of the correlation function becomes slower. Therefore, we will analyze the nature of the electronic eigenstates and the optical response at both limits: the case with weak correlations ($\gamma \gg 1$ and $\zeta \rightarrow 0$) and also the case with strong correlations ($0 < \gamma < 1$ and $\zeta \gg 0$). In Fig. 1(a) (left panel) we plot the on-site energy ϵ_n versus n for $N = 10^5$, $\zeta = 10$ and $\gamma = 0.25, 0.5, 0.75$ and 1.25 . One can notice how the energy landscape becomes smooth as γ decreases. In order to compare some statistical properties of the above sequences, we compute the auto-correlation function ($C(r) = [1/(N - r)] * \sum_{n=1}^{N-r} \epsilon_n \epsilon_{n+r}$) of the potential landscape (see Fig. 1(b) (right panel)). Circles indicate the numerical calculation of $C(r)$ and the solid line represents

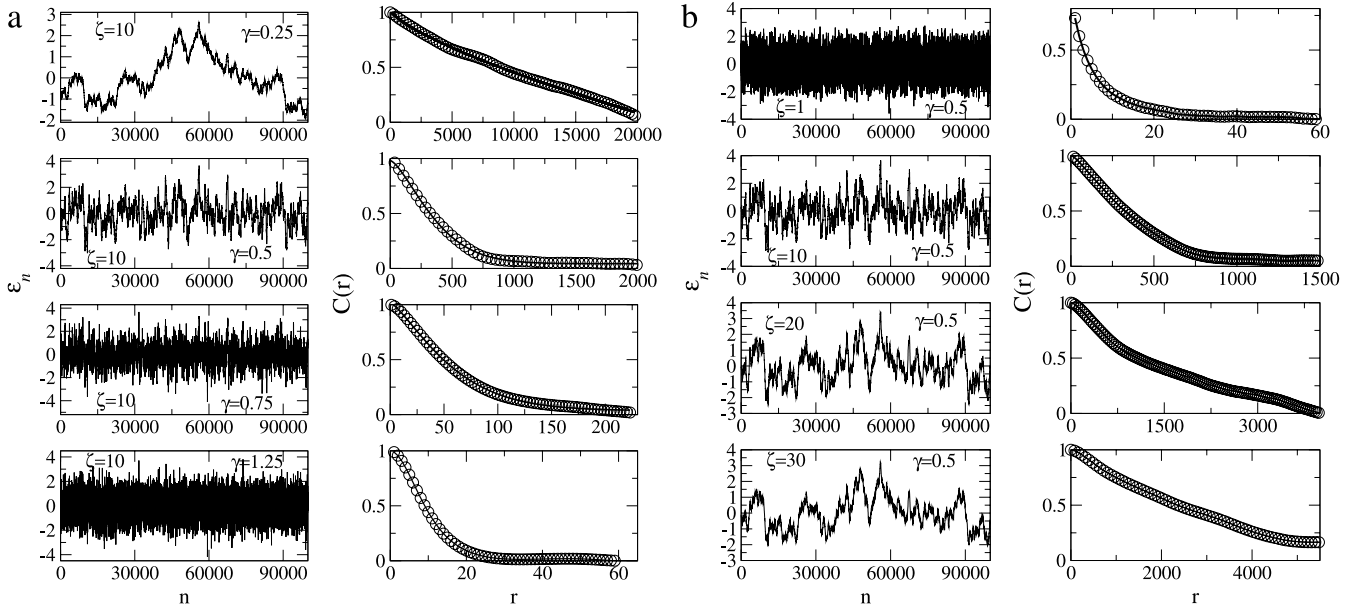


Fig. 1. (a) Left panel: typical on-site energy landscapes generated from Eqs. (2) and (3) with $N = 10^5$, $\zeta = 10$ and $\gamma = 0.25, 0.5, 0.75$ and 1.25 . Right panel: numerical calculation of the respective two-point auto-correlation function (circles) and the solid line represents a numerical fit using a stretched exponential form. (b) Left panel: same as in left panel (a) with $N = 10^5$, $\gamma = 0.5$ and $\zeta = 1, 10, 20$ and 30 . Right panel: same as in right panel (a) for $\gamma = 0.5$ and $\zeta = 1, 10, 20$ and 30 .

a numerical fit using a stretched exponential form. In Fig. 1(b) we plot the same as in (a) for fixed $\gamma = 0.5$ and $\zeta = 1, 10, 20$ and 30 . We can see in Fig. 1(a, b) that the on-site energy profile and its auto-correlation function are in good agreement with our previous comments about the parameters γ and ζ . We observed that as γ is increased, the auto-correlation function exhibits a faster decay with the distance r (see Fig. 1(a) (right panel)). Moreover, for large γ the on-site energy displays a profile more rough if compared with cases of small γ . The smoothing of the on-site energy profile as γ is decreased is also in good agreement with our previous comments about the dependence of internal correlations on γ . In Fig. 1(b) (right panel) we observe that the auto-correlation function exhibits slower decay with the distance r as ζ is increased. The eigenstates $|\Phi(E)\rangle = \sum_{n=1}^N f_n(E)|n\rangle$ can be found by exact diagonalization of the complete Hamiltonian. In our calculations we compute the average of the participation number, defined by [2,9,10]

$$\xi(E) = 1 / \sum_{n=1}^N f_n^4(E). \quad (4)$$

In general, the participation number is a good estimate of the number of sites that participate in the eigenstate. For extended states, ξ is proportional to the total number of sites ($\xi \propto N$). For localized states, the participation number is finite, therefore smaller than the system size N . A good way to distinguish the nature extended or localized of an eigenstate is to analyze the scaled participation number ξ/N . If ξ/N goes to zero as N is increased we are dealing with localized states. However, if $\xi/N \rightarrow \text{constant}$ for large N we have strong evidence of extended modes. In addition, we will also focus on the numerical calculation of the localization length λ , done by using the standard transfer matrix procedure [2]. The localization length λ is defined by [2]: $\lambda = \{\lim_{N \rightarrow \infty} (1/N) \log[|Q_N F(0)|/|F(0)|]\}^{-1}$ where $F(0) = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_0 \end{pmatrix}$ is a generic initial condition and Q_N is the product of all transfer matrices

$$Q_N = \prod_{n=1}^N \begin{pmatrix} E - \epsilon_n & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Furthermore, we will investigate the absorption spectrum defined as [35,36,39]

$$A(E) = \frac{1}{N} \sum_{\beta} \delta(E - E_{\beta}) F_{\beta}, \quad (6)$$

where F_{β} is the oscillator strength associated with the eigenvalue β , namely $F_{\beta} = [\sum_n f_n(E_{\beta})]^2$. For off-diagonal terms positive ($t > 0$) and the diagonal disorder following an uncorrelated distribution, the eigenstates with the largest oscillator strength are those of the top of the band. This formalism was well explained in Ref. [36]. We are considering the interaction of our 1d model with the transverse radiation field. The coupling of the radiation field mode of wave vector k with the eigenstate ($|\phi_{\beta}\rangle = \sum_n f_n(E_{\beta})|n\rangle$) is proportional to $\sum_n f_n(E_{\beta}) \exp(-kr_n)$. In our formalism, we will restrict our study to

system sizes N small compared to an optical wavelength (i.e. $kN \ll 1$). Therefore, the coupling with external field reduces to the transition dipole $\sum_n f_n(E_\beta)$. Therefore, the oscillator strength associated with the one-photon absorption is then proportional to $(\sum_n f_n(E_\beta))^2$.

3. Results

We applied an exact diagonalization procedure on finite chains. All calculations were averaged over, at least, 1000 disorder configurations. We will start by analyzing the localization properties around the center of the band ($E = 0$). We emphasize that the band center $E = 0$ represents the mode with the largest localization length even in the case of the 1d Anderson model with an uncorrelated diagonal disorder distribution [2]. We will emphasize again the physics motivation behind the range of parameters γ and ζ analyzed in our work. We will analyze the nature of the electronic eigenstates and the optical response of our disordered model at the limits of weak and strong correlations. The case with weak correlations is obtained for large γ and small ζ ($\gamma \gg 1$ and $\zeta \rightarrow 0$). From another side, the case with strong correlations is obtained for small γ and large ζ ($0 < \gamma < 1$ and $\zeta > 0$). In Fig. 2 we show the participation number at the center of the band ($E = 0$) versus γ for $\zeta = 0.1, 1, 10$ and 20 . For $\zeta = 0.1$ we are dealing with a disordered potential with weak correlations. In fact, it is almost the uncorrelated limit. Therefore, the participation number should not change as the γ exponent is varied. This behavior can be observed in Fig. 2(a). One can notice that $\xi(E = 0)$ does not depend on γ . For the correlated case $\zeta = 1, 10$ and 20 we observe an interesting and non-monotonic behavior. For γ within the particular interval $[\gamma_1, \gamma_2]$ the participation number becomes almost of the same order of magnitude of the system size N . We also observe that within these intervals $[\gamma_1, \gamma_2]$ the participation number displays a more intense dependence on the system size N . However, we emphasize that we cannot anticipate the dependence of the participation number on the system size ($\xi \propto N^{D_d}$) from the data we have shown until now. The finite size scaling of the participation number will be obtained later by using a careful analysis of ξ versus N within the intervals $[\gamma_1, \gamma_2]$. For $\zeta = 1$ we can see this behavior within the interval $[\gamma_1, \gamma_2] \approx [0.07(2), 0.23(2)]$ and for $\zeta = 10$ and 20 $[\gamma_1, \gamma_2] \approx [0.10(3), 0.50(3)]$. For $\zeta = 10$ and 20 we will analyze the dependence of the participation number on the system size N in Fig. 2(e). Symbols represent the data and the solid line a power-law fitting ($\langle \xi \rangle_{0.1 < \gamma < 0.5} / N \propto N^{-0.10(1)}$) for $\zeta = 10$ and 20 . Our results suggest that the scaled mean participation number within the region $0.1 < \gamma < 0.5$ ($\langle \xi \rangle_{0.1 < \gamma < 0.5} / N$) decreases as N is increased thus indicating localized states. In Fig. 3(a–d) we show the localization length around the center of the band ($\lambda(E = 0)$) versus γ for $N = 10^5, 2 \times 10^5, 4 \times 10^5$ and $\zeta = 0.1, 1, 10$ and 20 . The results for λ are qualitatively in good agreement with the previous calculations of the participation number. For $\zeta = 1, 10$ and 20 we observed again a non monotonic behavior similar to that observed in Fig. 2(b–d). For γ within intervals similar to those that were obtained in Fig. 2(b–d) the localization length λ also increases. The dependence of the localization length λ on the system size N needs a more detailed study. In Fig. 3(e) we plot the logarithm of the scaled mean localization length within the interval $[0.1, 0.5]$ ($\log \langle \lambda \rangle_{0.1 < \gamma < 0.5} / N$) versus the logarithm of the system size N . Symbols represent the data and the solid line a power-law fitting ($\langle \lambda \rangle_{0.1 < \gamma < 0.5} / N \propto N^{-0.25(2)}$). Therefore, in good agreement with the calculations shown in Fig. 2(e), our finite size scaling indicates that the localization length is finite at the thermodynamic limit thus indicating localized states. We recognize that we are unable to obtain a precise estimate of the intervals $[\gamma_1, \gamma_2]$. We emphasize that the intervals reported are rough estimates. The non monotonic behavior of the participation number ξ and localization length λ with γ (see Fig. 2(c–d) and 3(c–d) respectively) needs a more detailed description. We stress that for $\gamma \rightarrow 0$ there is an increase of the correlations within the disorder; therefore, the degree of localization should decrease. However, in our calculations, we observe a decrease of the participation number and the localization length as $\gamma \rightarrow 0$, i.e. we obtained an increase of the degree of localization. In order to understand better these results we will use an effective measure for the roughness of the diagonal disorder of our chain. Following Ref. [43,44] we will consider the integrated Fourier transform (IFT) defined by $IFT = \int_0^{k_{\max}} \epsilon_k dk$ where ϵ_k represents the Fourier transform of the on-site disorder distribution ϵ_n . For an uncorrelated random diagonal distribution we will have a large IFT due to its noise-like behavior. From the other side, more regular structures will display a narrower Fourier spectrum and therefore a smaller IFT. In Fig. 4 we plot our results for the IFT versus γ for $\zeta = 1, 10$ and 20 . We also observe a non monotonic behavior of the integrated Fourier transform. The IFT displays a plateau within the interval $[\gamma_1, \gamma_2]$. The decrease of IFT within the interval $[\gamma_1, \gamma_2]$ indicates that the correlation at this regime effectively decreases the strength of disorder thus giving rise to the increase of localization length. Our results for the IFT are in good agreement with the participation number calculations of Fig. 2(b–d). In special the interval $[\gamma_1, \gamma_2]$ obtained using IFT data fits reasonably the region with large localization length obtained in Fig. 2(b–d) (i.e. $[0.07(2), 0.23(2)]$ for $\zeta = 1$ and $[0.10(3), 0.50(3)]$ for $\zeta = 10$ and 20). We also observe that the IFT increases as $\gamma \rightarrow 0$ thus indicating an increase of the roughness within the disorder distribution. It is an apparent contradictory result with the correlation function properties at this limit of small γ . However, we stress that we are using the rescaling defined in Eq. (3). Therefore, this rescaling promotes the increase of roughness for small γ and therefore the decrease of participation number observed in Fig. 2(b–d).

We will investigate now the dependence of the localization properties on the generalized correlation length ζ . We will focus on the scaled participation number ξ/N versus ζ for $E = 0$, $\gamma = 0.3$ and $N = 15,000, 30,000$ and $60,000$ sites (see Fig. 5). We chose $\gamma = 0.3$ because, as we noted in Fig. 3(c, d), around this value we found the eigenstates with the largest participation number. We stress that for extended states, the function ξ/N from distinct chain sizes would collapse into a

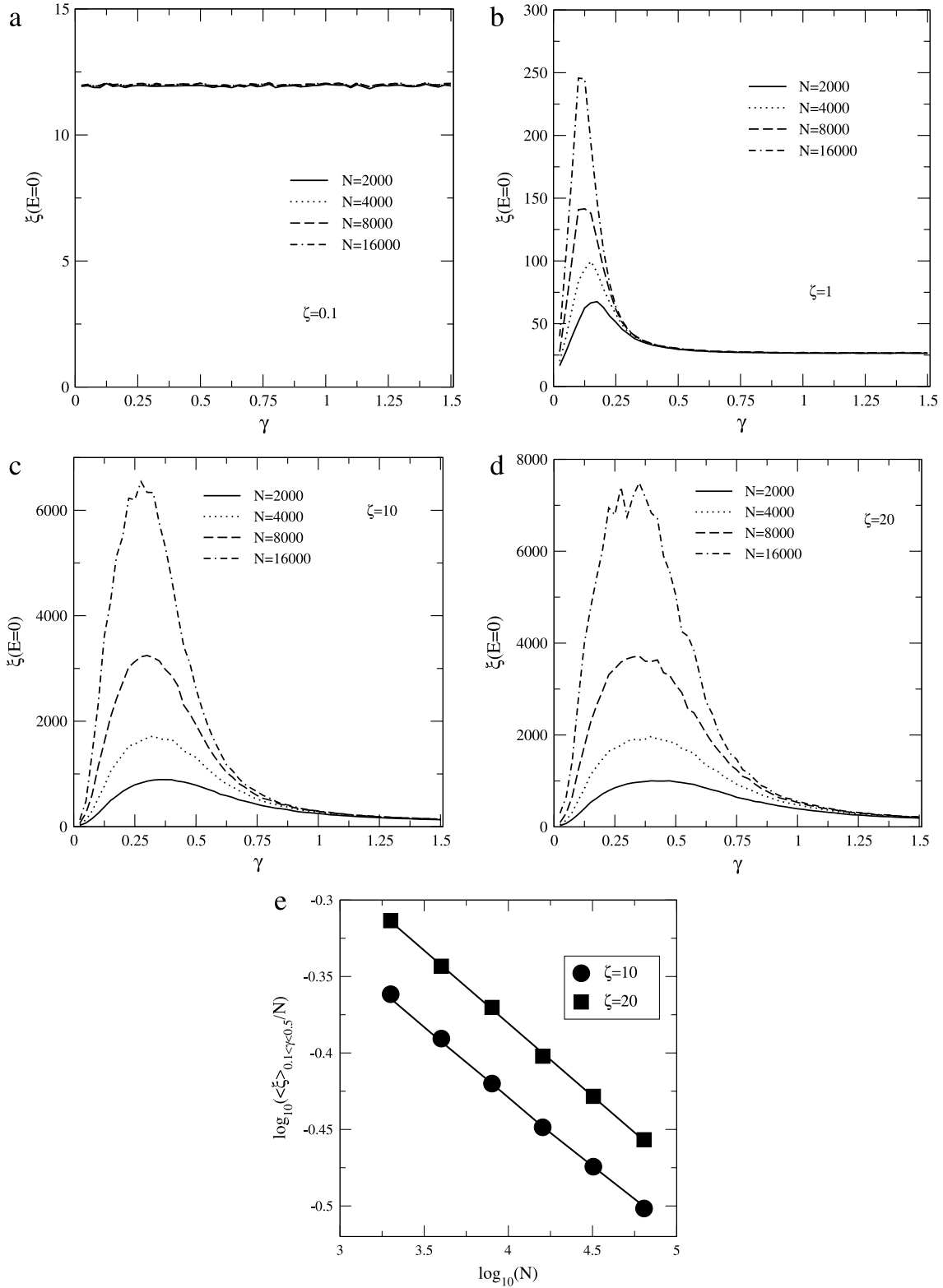


Fig. 2. (a–d) Participation number at the band center ($E = 0$) versus γ for $\zeta = 0.1, 1, 10$ and 20 . (e) Log–log plot of the mean participation number within the interval $[0.1, 0.5]$ ($\langle \xi \rangle_{0.1 < \gamma < 0.5}$) versus the system size N .

single curve, signaling extended states with $\xi \propto N$. In our case, the calculations show no data collapse. Therefore, even for large ζ , the scaled participation number ξ/N decreases as the system size increases, pointing to a localized character of the eigenstates in the thermodynamic limit.

Now, let us show our results for the absorption spectrum of this model. In Fig. 6(a, b, c) we plot $A(E)$ versus energy E for $\gamma = 0.35$ (panel (a)), $\gamma = 0.5$ (panel (b)), $\gamma = 1$ (panel (c)) and $\zeta = 0.01, 0.1, 0.3, 0.5$, and 0.7 . Our calculations were done for $N = 2000$ sites and 1200 realizations of disorder. For $\zeta = 0.01$ we observe a peak slightly above the largest

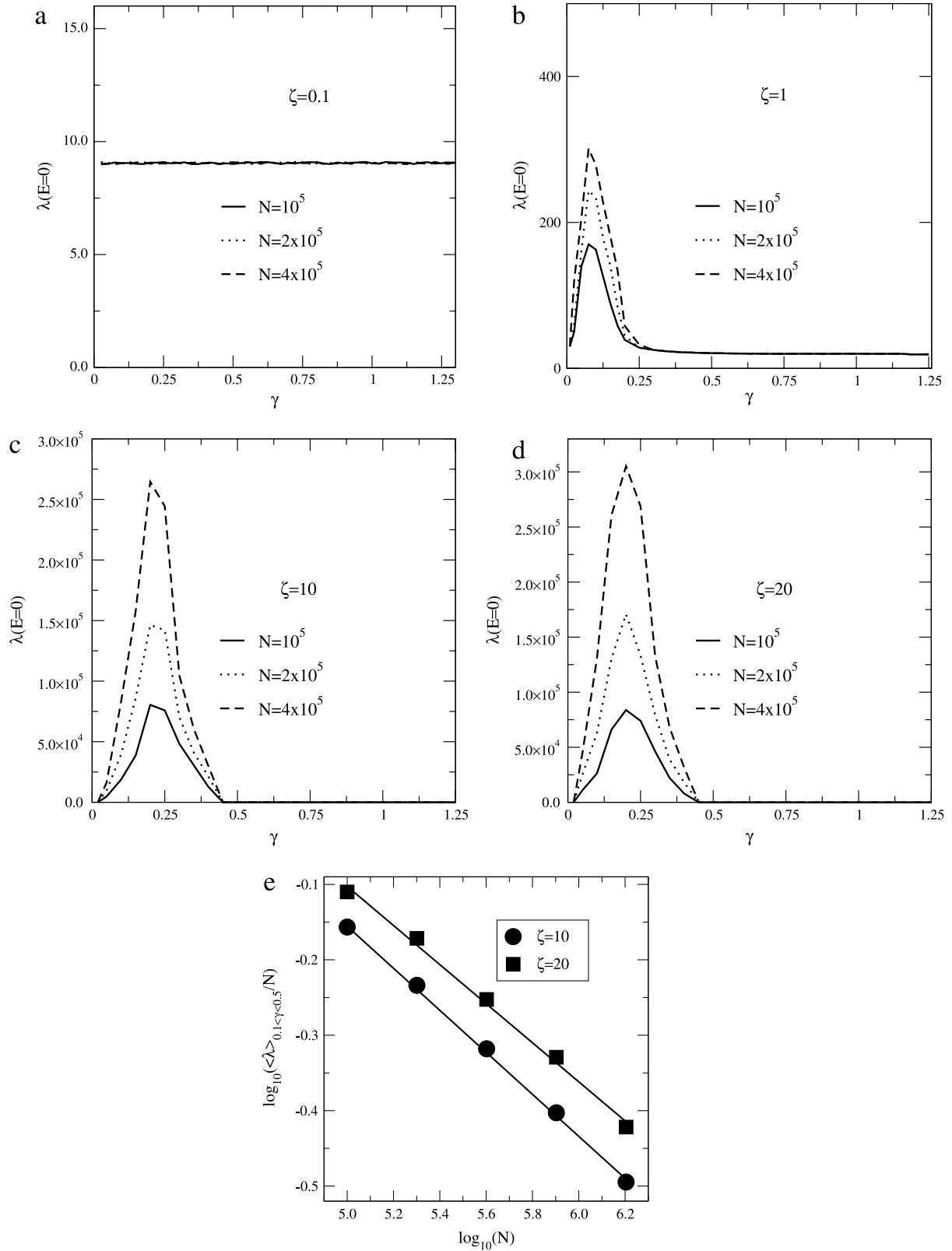


Fig. 3. (a–d) Localization length λ at the band center ($E = 0$) versus γ for $\zeta = 0.1, 1, 10$ and 20 . (e) Log–log plot of the mean localization length within the interval $[0.1, 0.5]$ ($\langle \lambda \rangle_{0.1 < \gamma < 0.5}$) versus the system size N .

band edge $E = 2$ of the periodic lattice. This result is easily understood by remembering that for $\zeta = 0.01$ we are dealing with an uncorrelated diagonal disorder. In $1d$ systems with uncorrelated diagonal disorder and positive hopping only the states around the top band edge contribute to the absorption spectrum [35–37,39]. Our calculations for $\zeta = 0.01$ are in good agreement with these previous results. Now we will increase the parameter ζ . We observe that as ζ is increased the

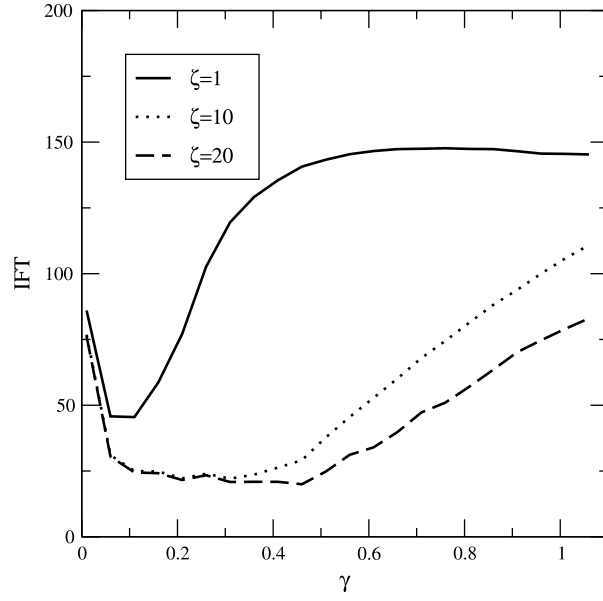


Fig. 4. The integrated Fourier transform (*IFT*) versus γ for $\zeta = 1, 10$ and 20 .

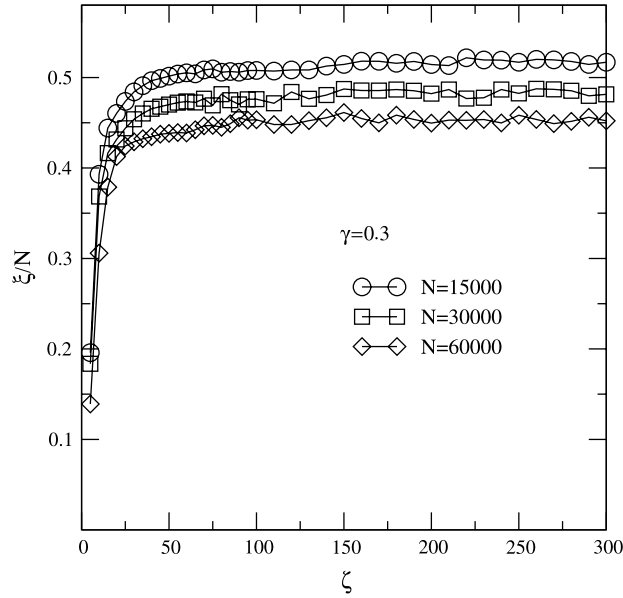


Fig. 5. Scaled participation number ξ/N versus ζ . Calculations were done for $E = 0$, $\gamma = 0.3$ and $N = 15,000, 30,000$ and $60,000$.

absorption spectrum $A(E)$ becomes wider and its intensity decreases. Therefore, for $\zeta > 0$ we observe an increase of the absorption bandwidth. We stress that an increase of the absorption bandwidth was observed previously in other works with correlated disorder [32,33,35,38]. We emphasize that the correlated disorder distributions considered in Refs. [32,33,35,38] were quite distinct from that we have considered in our present work. In Fig. 6(d) the standard deviation σ_A of the absorption spectra is shown as a function of the generalized correlation length ζ . To accurately determine the standard deviation σ_A we fitted the high-energy side of the absorption spectra using Gaussians. We observe that σ_A monotonously increases as ζ is increased and saturates for $\zeta > 1$. The limiting value of σ_A displays a weak dependence on the γ exponent; however, in all γ considered, we observed $\sigma_A \propto \zeta$ before the saturation (see the inset). We also observe that the limiting value of σ_A is roughness $\langle \sigma_A(\zeta \rightarrow \infty) \rangle \approx 0.9$. This value is quite close to the standard deviation $\sigma = 1$ of the on-site disorder distribution. We stress that in Ref. [33] the authors have reported that the width of the absorption spectrum should converge to the standard deviation of the disorder distribution. We have obtained approximately this behavior in our model i.e. $\sigma_A \approx \sigma$. However, the authors in Ref. [33] also demonstrated the existence of a particular dependence of σ_A on the degree of correlations. The authors demonstrate the existence of a crossover at the limit of strong correlations. In our model we did not find the same behavior reported in Ref. [33]. We stress that in our model we are dealing with a stretched exponential correlated disorder with standard deviation $\sigma = 1$. The correlated disorder used in Ref. [33] consisted of $S = N/N_c$ consecutive segments with equal energies ϵ_s within each segment. The set $\{\epsilon_s\}_{s=1}^S$ was chosen as statistically independent

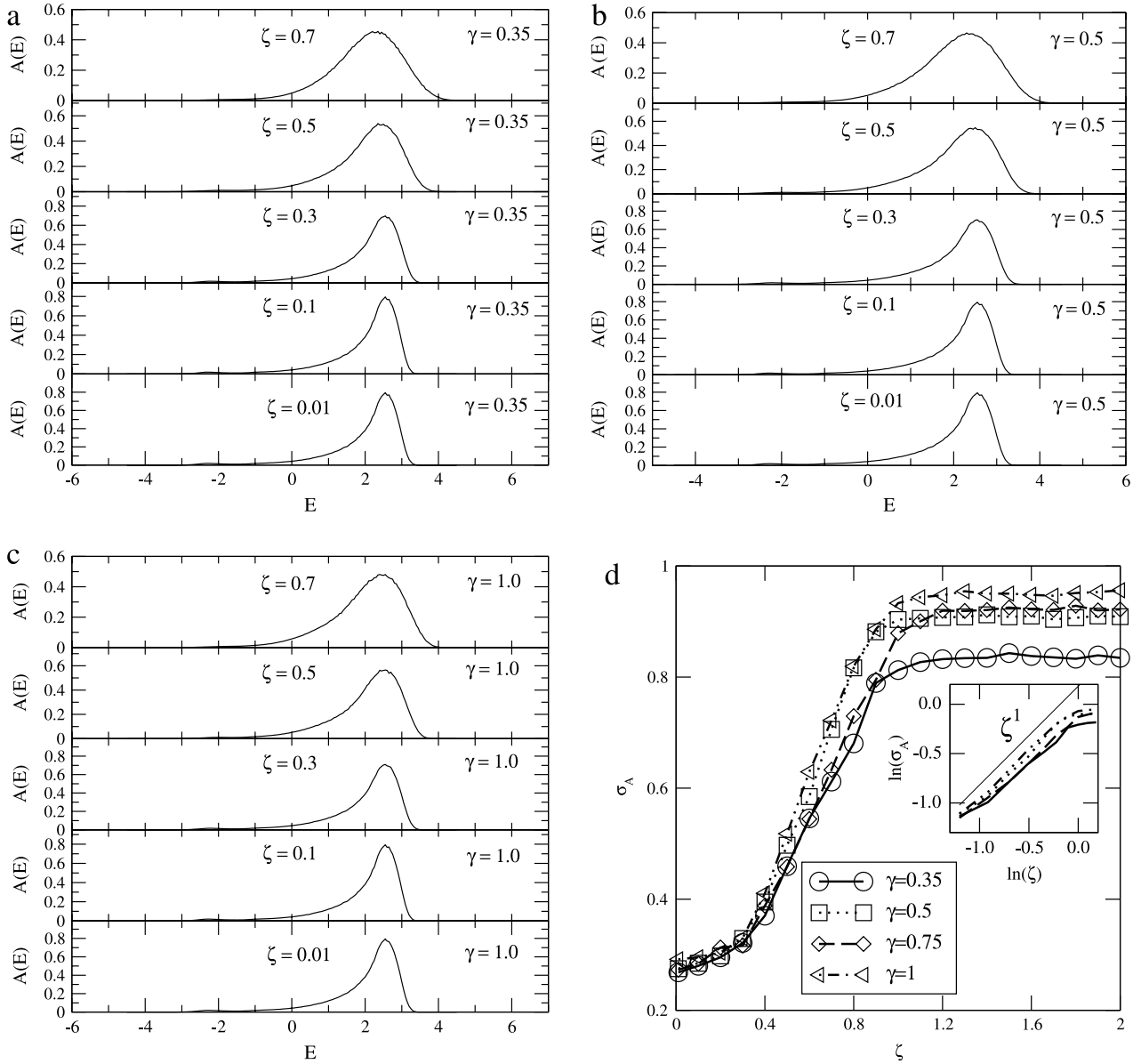


Fig. 6. (a–c) Absorption spectrum $A(E)$ versus energy E for $\gamma = 0.35$ (panel (a)), $\gamma = 0.5$ (panel (b)) and $\gamma = 1$ (panel (c)). Calculations were done for $N = 2000$ sites, 1200 realizations of disorder and $\zeta = 0.01, 0.1, 0.3, 0.5$, and 0.7 . (d) The standard deviation σ_A of the absorption spectrum $A(E)$ versus the generalized correlation length ζ .

Gaussian variables with probability distribution $P(\epsilon_s) \propto \exp(-\epsilon_s^2/2\sigma^2)$. The correlation length in Ref. [33] was well defined as N_c ; however, the functional form of the correlation function was not defined clearly. The authors in Ref. [33] have defined the probability distribution within the disorder distribution however, they did not define the type of correlation function was considered. Moreover, the disorder degree used in our manuscript ($\sigma = 1$) is larger than the value considered in Ref. [33] ($\sigma = 0.2$). We will provide some additional numerical calculations to investigate some specificities of the optical properties in the vicinity of the band edge $E = 2$. We will show that the decreases of intensity of the absorption spectrum $A(E)$ can be explained by analyzing the localization aspects at the band edges. In the following we will show new numerical and heuristic analytical calculations that explain in detail the behavior of $A(E)$ in this $1d$ model with short-range correlated disorder. The localization length λ around $E = 2$ decreases as the on-site potential becomes more correlated [45]. In our model, $\lambda(E \approx 2)$ will decrease as the generalized correlation length ζ is increased. This anomalous behavior of λ around $E \approx 2$ explains qualitatively the enlargement of the absorption spectrum band around $E \approx 2$. Following Ref. [35], it was known that the stronger localization at the band edges promotes a spread in the absorption bandwidth. We are interested in giving additional quantitative information of the absorption spectrum and its dependence on the localization degree around $E \approx 2$. Let us consider the mean localization length around $E = 2$ ($\lambda(E \approx 2)$) versus the generalized correlation length ζ . To compute the mean localization length we use the arithmetic average within the interval $[1.6, 2.4]$. We stress that within this interval, the localization length displays the anomalous behavior reported in Ref. [45]. Results are shown in Fig. 7(a). Now, let us consider in Fig. 7(b) the maximum intensity of the absorption spectrum A_{\max} versus the generalized correlation length

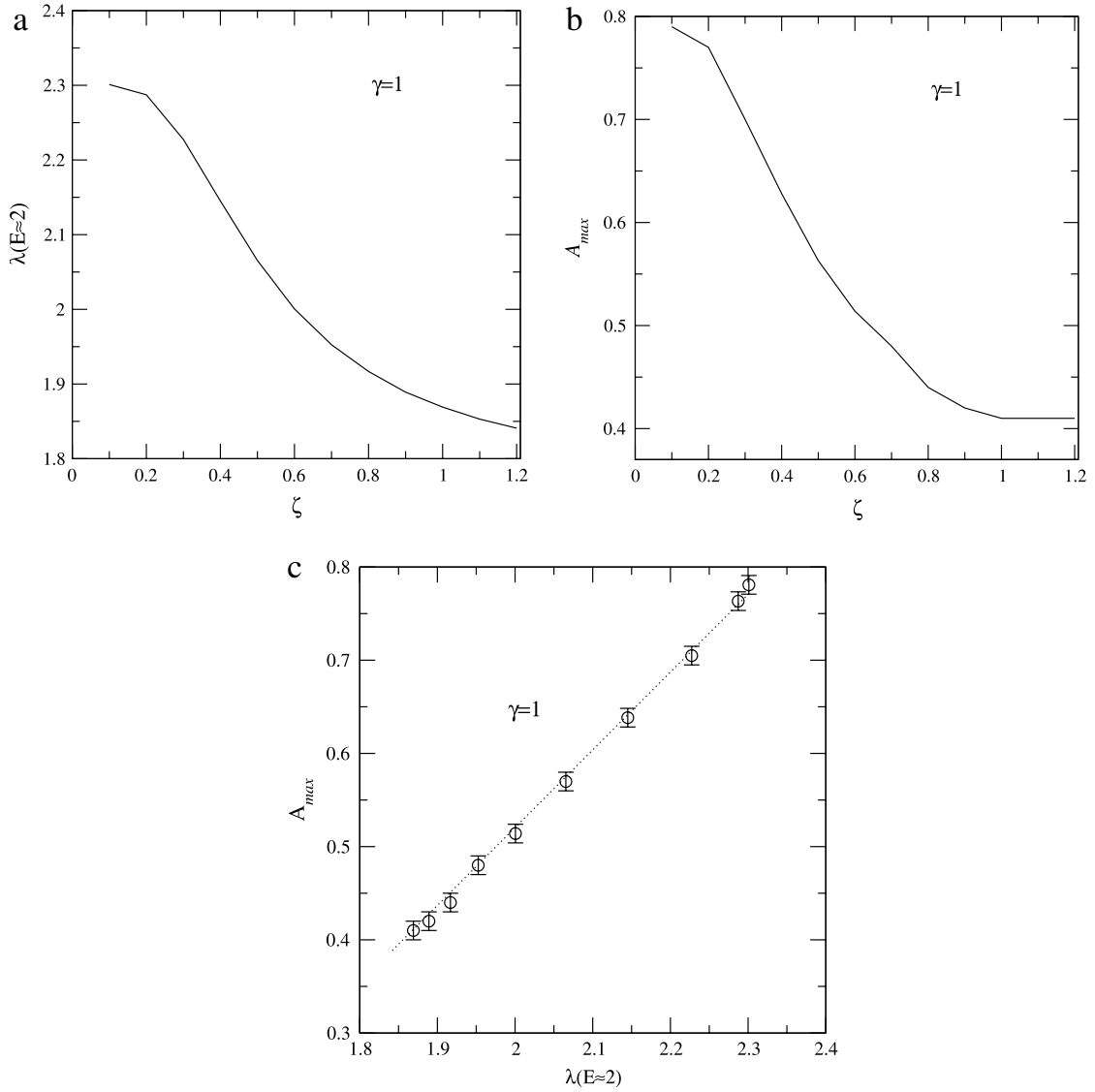


Fig. 7. (a) Mean localization length around $E = 2$ ($\lambda(E \approx 2)$) versus the generalized correlation length ζ . (b) The maximum intensity of the absorption spectrum A_{\max} versus the generalized correlation length ζ . (c) By combining (a) and (b) we obtain the absorption spectrum intensity A_{\max} versus the mean localization length $\lambda(E \approx 2)$.

ζ . We can combine Fig. 7(a) and (b) to provide the dependence of the maximum absorption spectrum intensity A_{\max} versus the mean localization length $\lambda(E \approx 2)$ (see Fig. 7(c)). Our numerical results suggest that the maximum intensity of the absorption spectrum depends linearly on the localization length. We have considered other values of γ and no qualitative changes to the behavior of the maximum absorption spectrum were found. We would like to emphasize that we have also considered other values of ζ . Particularly we have computed the absorption spectrum for ζ up to 20 (results not shown here). In general, for ζ roughly larger than 1 the width σ_A of the absorption spectrum and the maximum absorption intensity A_{\max} become roughly independent of ζ .

Our numerical calculations of the localization length explained the anomalous behavior of $A(E)$ in 1d models with stretched exponential correlated disorder. However, we will show another treatment of the optical properties based on a heuristic procedure. Our formalism is based on the topology of the eigenstates that contribute to the absorption spectrum. It is known that in a 1d disordered system with positive hopping the eigenstates with energy in the vicinity of $E \approx 2$ are those with the largest oscillator strength [35]. The high-energy range of the spectrum contains a hidden structure as was reported in Ref. [37]. The nature of states around $E \approx 2$ can be understood as a superposition of states of weakly coupled quantum wells of width λ . This feature reflects on a specific topology of those states; they display a topology similar to a bell. The states about $E \approx 2$ with bell shape are those with larger oscillator strength [35,39]. In Fig. 8 we can see a pedagogical picture of this kind of state. In a system with size N we will consider a localized bell shape state with width λ . Therefore, the wave function amplitude f_n is nonzero within the region of length λ and it is negligible for any another part of this 1d system. We will consider that $f_n = \mathcal{F} e^{-(|n-n_0|/\lambda)}$ within the region of size λ and $n_0 = 0$ as being the center of chain. Therefore, the normalization condition at the thermodynamic limit can be written as $\sum_{n=-N/2}^{N/2} f_n^2 \approx \int_{-N/2}^{N/2} \mathcal{F}^2 e^{(-2|n|/\lambda)} dn = 1$. After some

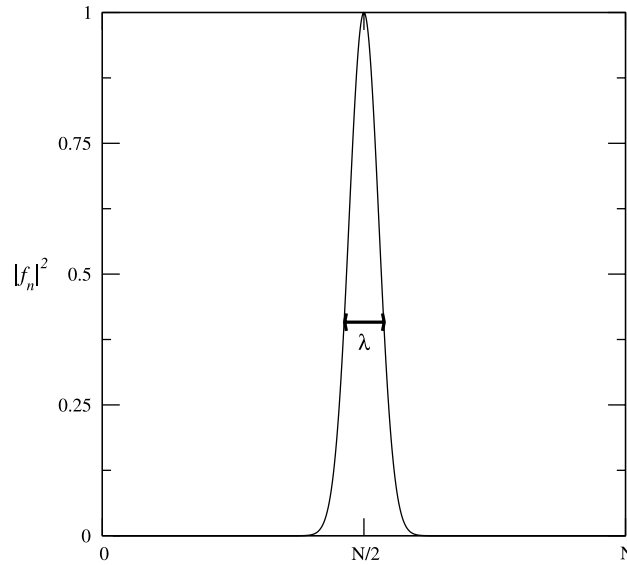


Fig. 8. Pedagogical picture of a localized bell shape state with width λ .

simple algebra we obtain $\mathcal{F} = [\sqrt{\lambda(1 - e^{-N/2\lambda})}]^{-1}$. Therefore, the oscillator strength F of this eigenstate can be written as $F = (\sum_{n=-N/2}^{N/2} f_n)^2 \approx (\int_{-N/2}^{N/2} \mathcal{F} e^{-|n|/\lambda} dn)^2 = \mathcal{F}^2 \lambda^2 (2 - 2e^{-N/2\lambda})^2$. The localization length λ at the high energy region ($E \approx 2$) is much smaller than the system size N ; thus we can consider $e^{-N/\lambda} \rightarrow 0$ and $e^{-N/2\lambda} \rightarrow 0$. Therefore, at this limit the oscillator strength scales proportional to the localization length $F \propto \lambda$. This simple heuristic procedure corroborates our numerical calculations shown in Fig. 7(d) for the linear dependence of the intensity of the absorption spectrum on the localization length. We stress that in Ref. [33] it was pointed out that the oscillator strength is an inconvenient measure for the extension of the exciton states for the case of strong correlations. Therefore, we emphasize that our calculations should be valid only for small ζ .

4. Summary and conclusions

In this work we studied the problem of one-electron localization in 1d systems with correlated disorder as well as the optical absorption spectrum. We have considered chains with stretched exponential correlations on the diagonal disorder distribution ϵ_n . In order to impose these kinds of correlations we have considered the on-site energy ϵ_n proportional to $\sum_{m=1}^N \eta_m * \exp(-|n - m|^\gamma / \zeta)$ where η_m are uncorrelated random numbers and γ and ζ are tunable parameters that control the degree of correlations. We perform exact numerical diagonalization to compute the participation number and the absorption spectrum. Our formalism provides an estimate for the dependence of the localization length on the parameters γ and ζ . We analyzed the case with weak correlations ($\gamma \gg 1$ and $\zeta \rightarrow 0$) and also the case with strong correlations ($0 < \gamma < 1$ and $\zeta \gg 0$). Our calculations demonstrated that the weak correlated case exhibits a behavior similar to those obtained for the Anderson model with uncorrelated disorder. From another side, the strong correlated case reveals a new and interesting behavior. For $0 < \gamma < 1$, our calculations demonstrated that the localization length increases as the generalized correlation length ζ is increased. However, we have proved, by using a finite size scaling, that this model does not contain extended states. We also observe a non intuitive dependence of the localization properties on the exponent γ . For a fixed ζ we demonstrated that there is a particular interval $[\gamma_1, \gamma_2]$ in which the participation number and the localization length become almost of the same order of magnitude of the system size N . Therefore, our analysis provides the range of values of γ that promote higher electronic propagation. We used a spectral analysis of the correlated disorder and have explained the dependence of the participation number on the γ exponent. Our spectral analysis reveals that this kind of stretched exponential correlation behaves as a mechanism of smoothing of the internal roughness. Our results for the optical absorption spectra reveal an interesting dependence of the absorption profile on the correlated disorder distribution. We showed that as the generalized correlation length ζ is increased the absorption bandwidth increases linearly. Moreover, we also observed that the intensity of the absorption spectrum $A(E)$ also depends on the degree of correlations. We used a standard transfer matrix procedure and established numerically the direct relation between the absorption spectrum behavior and the localization length of those eigenstates that contribute to the absorption. We focused on the numerical calculation of the localization length λ of those eigenstates that contribute to the absorption band, and we have numerically demonstrated that the maximum intensity of the absorption spectrum A_{\max} depends linearly on the localization length. Furthermore, we have used an analytical heuristic procedure based on the topology of those eigenstates. Our heuristic procedure corroborates the numerical prediction of the linearity between the intensity of the absorption spectrum and the localization length. In our calculations, we did not find a substantial dependence of the absorption spectrum on the γ exponent. In summary we have provided a detailed analysis of localization aspects and optical properties in chains with

stretched exponential correlations on the diagonal disorder distribution. We expect that the present work will stimulate further theoretical and experimental investigations along this line.

Acknowledgments

This work was partially supported by the Brazilian research agencies CNPq, CAPES, INCT-Nano(Bio)Simes, as well as FAPEAL (Alagoas State Agency). The research works of J.L.L. dos Santos and M.O. Sales were supported by a graduate program of CAPES.

References

- [1] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello, T.V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.* 42 (1979) 673.
- [2] B. Kramer, A. MacKinnon, *Rep. Prog. Phys.* 56 (1993) 1469;
For a review see, e.g. I.M. Lifshitz, S.A. Gredeskul, L.A. Pastur, *Introduction to the Theory of Disordered Systems*, Wiley, New York, 1988.
- [3] B. Kramer, K. Broderix, A. Mackinnon, M. Schreiber, *Physica A* 167 (1990) 163.
- [4] R.A. Romer, H. Schulz-Baldes, *Europhys. Lett.* 68 (2004) 247.
- [5] V.N. Kuzovkov, W. von Niessen, *Physica A* 377 (2007) 115.
- [6] J. C. Flores, *J. Phys.: Condens. Matter* 1 (1989) 8471.
- [7] D.H. Dunlap, H.L. Wu, P.W. Phillips, *Phys. Rev. Lett.* 65 (1990) 88;
H.-L. Wu, P. Phillips, *Phys. Rev. Lett.* 66 (1991) 1366.
- [8] F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, *Phys. Rev. Lett.* 81 (1998) 3735.
- [9] F.A.B.F. de Moura, M.D. Coutinho-Filho, E.P. Raposo, M.L. Lyra, *Europhys. Lett.* 66 (2004) 585.
- [10] I.F. dos Santos, F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, M.D. Coutinho-Filho, *J. Phys.: Condens. Matter.* 19 (2007) 476213.
- [11] F. Domínguez-Adame, V.A. Malyshev, F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, *Phys. Rev. Lett.* 91 (2003) 197402.
- [12] F.A.B.F. de Moura, *Eur. Phys. J. B* 78 (2010) 335.
- [13] F.M. Izrailev, A.A. Krokhnin, *Phys. Rev. Lett.* 82 (1999) 4062;
F.M. Izrailev, A.A. Krokhnin, S.E. Ulloa, *Phys. Rev. B* 63 (2001) 41102.
- [14] W.S. Liu, T. Chen, S. J. Xiong, *J. Phys.: Condens. Matter* 11 (1999) 6883.
- [15] G.P. Zhang, S.-J. Xiong, *Eur. Phys. J. B* 29 (2002) 491.
- [16] V. Bellani, E. Diez, R. Hey, L. Toni, L. Tarricone, G.B. Parravicini, F. Domínguez-Adame, R. Gómez-Alcalá, *Phys. Rev. Lett.* 82 (1999) 2159.
- [17] V. Bellani, E. Diez, A. Parisini, L. Tarricone, R. Hey, G.B. Parravicini, F. Domínguez-Adame, *Physica E* 7 (2000) 823.
- [18] H. Shima, T. Nomura, T. Nakayama, *Phys. Rev. B* 70 (2004) 075116.
- [19] U. Kuhl, F.M. Izrailev, A. Krokhnin, H.J. Stöckmann, *Appl. Phys. Lett.* 77 (2000) 633.
- [20] H. Cheraghchi, S.M. Fazeli, K. Esfarjani, *Phys. Rev. B* 72 (2005) 174207.
- [21] G. Schubert, A. Weiße, H. Fehske, *Physica B* 801 (2005) 359.
- [22] F.M. Izrailev, A.A. Krokhnin, N.M. Makarov, *Phys. Rep.* 512 (2012) 125–254.
- [23] Rabah Benhenni, Khaled Senouci, Rachid Bouamrane, Nouredine Zekri, *Physica A* 389 (2010) 1002.
- [24] W.W. Cheng, J.X. Li, C.J. Shan, L.Y. Gong, S.M. Zhao, *Physica A* 398 (2014) 1.
- [25] G. Long-Yan, T. Pei-Qing, Z. Zi-Cong, *Chin. Phys. B.* 20 (2011) 087102.
- [26] A. Croy, M. Schreiber, *Phys. Rev. B* 85 (2012) 205147.
- [27] C. Albrecht, S. Wimberger, *Phys. Rev. B* 85 (2012) 045107.
- [28] M.O. Sales, S.S. Albuquerque, F.A.B.F. de Moura, *J. Phys.: Condens. Matter* 24 (2012) 495401.
- [29] M.O. Sales, F.A.B.F. de Moura, *Physica E* 45 (2012) 97.
- [30] G.M. Petersen, N. Sandler, *Phys. Rev. B* 87 (2013) 195443.
- [31] M. Hilke, *Phys. Rev. A* 80 (2009) 063820;
A. Crisanti, *J. Phys. A* 23 (1990) 5235.
- [32] A. Rodríguez, V.A. Malyshev, F. Domínguez-Adame, *J. Lumin.* 131 (1999) 83–84.
- [33] V.A. Malyshev, A. Rodríguez, F. Domínguez-Adame, *Phys. Rev. B* 60 (1999) 14140.
- [34] F. Domínguez-Adame, V.A. Malyshev, A. Rodríguez, *Chem. Phys.* 244 (1999) 351.
- [35] E. Díaz, A. Rodríguez, F. Domínguez-Adame, V.A. Malyshev, *Europhys. Lett.* 72 (2005) 1018.
- [36] H. Fidder, J. Knoester, D.A. Wiersma, *J. Chem. Phys.* 95 (1991) 7880.
- [37] V.A. Malyshev, *J. Lumin.* 55 (1993) 225–230.
- [38] F. Domínguez-Adame, *Phys. Rev. B* 51 (1995) 12801.
- [39] T.F. Assunção, M.L. Lyra, F.A.B.F. de Moura, F. Domínguez-Adame, *Phys. Lett. A* 375 (2011) 1048.
- [40] A. Eisfeld, S.M. Vlaming, V.A. Malyshev, J. Knoester, *Phys. Rev. Lett.* 105 (2010) 137402.
- [41] A. Werpachowska, A. Olaya-Castro, *Phys. Rev. Lett.* 109 (2012) 259701;
A. Eisfeld, S.M. Vlaming, V.A. Malyshev, J. Knoester, *Phys. Rev. Lett.* 109 (2012) 259702.
- [42] A.V. Malyshev, V.A. Malyshev, F. Domínguez-Adame, *J. Lumin.* 129 (2009) 1779.
- [43] E.M. Nascimento, F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, *Photon. Nanostruct. Fundamentals Appl.* 7 (2009) 101–107.
- [44] E. Macia, *Rep. Prog. Phys.* 69 (2006) 397.
- [45] S. Russ, S. Havlin, I. Webman, *Phil. Mag. B* 77 (1998) 1449.



Fast-track Communication

Electronic transport in disordered chains mediated by interactions with acoustic waves

A. Ranciaro Neto^{a,b}, M.O. Sales^a, F.A.B.F. de Moura^{a,*}^a Instituto de Física, Universidade Federal de Alagoas, Maceió AL 57072-970, Brazil^b Faculdade de Economia, Administração e Contabilidade, Av. Lourival Melo Mota, s/n, bl. 14. Tabuleiro dos Martins 57072-970, Brazil

ARTICLE INFO

Article history:

Received 16 November 2015

F. Peeters

Available online 2 January 2016

Keywords:

wave-packet dynamics

disorder

acoustic waves

electron–phonon

ABSTRACT

We considered the dynamics of an initially localized wave packet in one-dimensional disordered chains under the effect of electron–phonon interaction and an acoustic wave's pumping. Our procedure consists of a quantum mechanics formalism for the electron transport and a classical Harmonic Hamiltonian model for lattice vibrations. We also introduce an electron–lattice interaction by assuming electron energy transfer between neighboring atoms as an exponential function of its effective distance. In our model, the electron was initially localized at the first site of the chain and we also added pumping of an acoustic wave at the zeroth site. We solved numerically the dynamic equations for the electron and lattice performing calculations for the spreading of an electronic wave-packet. We report numerical evidences with regard to the sub-diffusive transport.

© 2015 Elsevier Ltd. All rights reserved.

1. Introduction

In the end of 1950s P.W. Anderson and co-workers demonstrated that extended eigenstates are completely absent in low-dimensional systems with uncorrelated disorder [1–7]. One of its consequences result in the saturation of the width of an initially localized wave-packet at a finite region around the initial position in the long time limit. Some years ago, it was demonstrated that the competition between nonlinearity and disorder plays an interesting role within the electronic transport [8–36]. By using a wide range of techniques, authors had shown that, even in the presence of disorder, nonlinearity can promote the appearance of a counter-intuitive electronic transport. From an experimental point of view, within the context of coupled waveguides patterned on an AlGaAs substrate, the presence of nonlinearity enhances the localization of linear modes whereas it induces the delocalization of nonlinear modes [13]. It is also interesting to emphasize the results of M.G. Velarde and co-workers [22–33] on the possibility of electronic transport mediated by a new type of electron–soliton pair.

Within the context of electron transport mediated by nonlinearity or electron–phonon interaction, the problem involving surface acoustic wave (SAW) has attracted an intense interest. In

general lines, SAW has been used to control electronic dynamics in nano-devices. One of the best observations of electronic transport induced by SAW was experimentally done in Ref. [37]. The authors applied a surface acoustic wave through a GaAs–AlGaAs two-dimensional electron gas. In Ref. [38], an interesting investigation of the electronic flux mediated by high frequency (SAW) in GaAs–AlGaAs heterostructures was reported. In a recent excellent experiment [39], the authors moved a single electron along a wire to mimic a kind of ping-pong behavior. Moreover, it was pointed out that “controlled motion” might be used within the framework of quantum computing for moving a quantum ‘bit’ between two far from places [39]. The experimental setup consisted of trapping a single electron in a quantum dot and moved this electron around a channel by using a SAW. The authors obtained up to 60 shots with good quality. The possibility of using SAW to move electrons and construct quantum bits has attracted an intense interest [40–43].

We considered the dynamics of an initially localized wave packet in one-dimensional disordered chain under the effect of electron–phonon interaction and an acoustic wave's pumping. Our formalism consists of a quantum mechanics formalism for the electron transport and a classical harmonic Hamiltonian model for the lattice vibrations. We also introduce an electron–lattice interaction by considering electron energy transfer between neighboring atoms as an exponential function of its effective distance. In our model we made the electron initially localized at the first site of the chain and we added the pumping of an acoustic wave at the

* Corresponding author.

E-mail address: fidelis@fis.ufal.br (F.A.B.F.de. Moura).

zero site. We solved numerically the dynamic equations for the electron and lattice performing calculations for the spreading of the electronic wave-packet. We report numerical evidences of the sub-diffusive transport.

2. Model and formalism

In our work the formalism consists of two Hamiltonians: the quantum electronic and lattice vibration dynamics. The electron Hamiltonian (H_e) and the lattice Hamiltonian $H_{lattice}$ are described, respectively, by

$$H_e = \sum_{m=1}^N \epsilon_m f_m^\dagger f_m + \sum_{m=1}^N \tau_{m+1,m} (f_{m+1}^\dagger f_m + f_m^\dagger f_{m+1}) \quad (1)$$

and

$$H_{lattice} = \frac{p_m^2}{2M_m} + \frac{1}{4} \sum_{m=1}^N [(x_{m+1} - x_m)^2 + (x_m - x_{m-1})^2], \quad (2)$$

where ϵ_m represents the on-site disorder distribution uniformly chosen within the interval $[-W/2, W/2]$, $\tau_{m+1,m}$ represents the energy transfer between the nearest sites, M_m represents the disordered distribution of masses and x_m and $p_m = M_m \dot{x}_m$ represents the atomic position and the momentum of the m th site. M_m is generated by using the following procedure: $M_m = e^{\eta_m}$ where η_m are random numbers uniformly distributed within a range $[-W/2, W/2]$. Electron–lattice interaction will be constructed by considering the electronic hopping term as $\tau_{m+1,m} = -e^{[-\alpha(x_{m+1} - x_m)]}$ where α represents, in units of the lattice spacing, the electron–phonon term. For small relative displacement we recover the Su, Schrieffer, Heeger approximation $\tau_{m+1,m} \approx -[1 - \alpha(x_{m+1} - x_m)]$. The time-dependent wave function $\Phi(t) = \sum_m c_m(t) |m\rangle$ is obtained by numerical solution of the time-dependent Schrödinger equation. The Wannier amplitudes evolve in time according to the time-dependent Schrödinger equation as ($\hbar = 1$)

$$i \frac{dc_m(t)}{dt} = \epsilon_m c_m(t) - e^{[-\alpha(x_{m+1} - x_m)]} c_{m+1}(t) - e^{[-\alpha(x_m - x_{m-1})]} c_{m-1}(t). \quad (3)$$

The classical equations governing the lattice vibrations may be written as

$$M_m \frac{d^2 x_m}{dt^2} = x_{m+1} - 2x_m + x_{m-1} - \alpha \{ e^{[-\alpha(x_{m+1} - x_m)]} (c_{m+1}^*(t) c_m(t) + c_{m+1}(t) c_m^*(t)) - e^{[-\alpha(x_m - x_{m-1})]} (c_m^*(t) c_{m-1}(t) + c_m(t) c_{m-1}^*(t)) \}. \quad (4)$$

We impose the electron initially localized at site $m=1$, i.e. $|\Phi(t=0)\rangle = \sum_m c_m(t=0) |m\rangle$, where $c_m(t=0) = \delta_{m,1}$. For $t=0$ we set $x_m(t=0) = \dot{x}_m(t=0) = 0$ for m within the interval $[1, N]$. Furthermore, we consider the pumping of an acoustic wave at the extreme left side of the chain (i.e. at the site $m=0$) given by the equation

$$x_0 = A_0 \cos(\omega t), \quad (5)$$

where ω represents the frequency of the acoustic wave. We solve the set of quantum/classical coupled equations using combined high-order Taylor expansion and a second order finite-difference procedure. The former is employed to obtain a numerical solution of Schrödinger equation (Eq. (3)) via series expansion of the evolution operator $U(\Delta t)$ [44]:

$$U(\Delta t) = \exp(-iH_e \Delta t) = 1 + \sum_{l=1}^{n_0} \frac{(-iH_e \Delta t)^l}{l!} \quad (6)$$

where H_e is the one electron Hamiltonian. The wave function at time Δt is given by $|\Phi(\Delta t)\rangle = U(\Delta t) |\Phi(t=0)\rangle$. The method can be used recursively to obtain the wave-function at time t . Classical equations (Eq. (4)) are solved by using the latter approach on a discretized time. We write the second time derivative in Eq. (4) as

$$\frac{d^2 x_m}{dt^2} \approx \frac{x_m(t + \Delta t) - 2x_m(t) + x_m(t - \Delta t)}{(\Delta t)^2} \quad (7)$$

Applying the previous formula to the classical equation we derive the following equation which can be solved numerically:

$$x_m(t + \Delta t) \approx 2x_m(t) - x_m(t - \Delta t) + \frac{(\Delta t)^2}{M_m} \{ x_{m+1}(t) - 2x_m(t) + x_{m-1}(t) - \alpha [e^{[-\alpha(x_{m+1}(t) - x_m(t))]} (c_{m+1}^*(t) c_m(t) + c_{m+1}(t) c_m^*(t)) - e^{[-\alpha(x_m(t) - x_{m-1}(t))]} (c_m^*(t) c_{m-1}(t) + c_m(t) c_{m-1}^*(t))] \}, \quad (8)$$

Our calculations are made with step $\Delta t = 1 \times 10^{-3}$ and the sum of Eq. (6) is truncated at $n_0=10$. Then we could keep the wave function norm within the following numerical tolerance: $|1 - \sum_m |c_m(t)|^2| < 10^{-10}$ along the entire time interval ($t_{max} \approx 3 \times 10^4$). After solving the dynamics equations, we computed some typical quantities which describe electronic transport on this disordered model, namely, mean position (centroid) and mean square displacement defined as [34–36]

$$\langle m(t) \rangle = \sum_m \langle m | c_m(t) |^2 \quad (9)$$

and

$$\sigma(t) = \sqrt{\sum_m (m - \langle m(t) \rangle)^2 |c_m(t)|^2}, \quad (10)$$

respectively. The centroid for a given time t represents the mean position of the electron using the center of a self-expanded chain as the origin. The mean square displacement provides an estimate of the size of the wave packet at time t .

3. Results and discussion

We considered the electron fully localized at the left side of the chain (i.e. $\{c_m(t=0) = \delta_{m,1}\}$) and the pumping of an acoustic wave at the site $m=0$ i.e. $x_0 = A_0 \cos(\omega t)$, where ω represents the frequency of the acoustic wave. We set $W=2$ for all calculations obtained in Figs. 1–3. Due to the presence of a mass disordered distribution in our model, we adopted pumping at low-frequencies $\omega \ll 1$. High frequencies do not propagate easily within disordered harmonic chains [45]. In our calculations we have used the self-expanding chain to minimize border effects; whenever the probability of finding the electron or the atomic vibration at the right side of the chain exceeded 10^{-20} , 10 new sites were added to the right side. Numerical convergence was ensured by checking the conservation of the norm of the wave packet at every time step; our results provide $|1 - \sum_m |c_m(t)|^2| < 10^{-10}$ for all times considered. In Fig. 1 we show results of several calculations for $\omega = 0.1, 0.2, 0.3$ and $\alpha = 0$ up to 0.5. For $\alpha = 0$ we detected clearly that the electron remains localized close to initial position. We emphasize that in the absence of electron–phonon coupling ($\alpha = 0$) our present model converged to the standard one-dimensional Anderson model with diagonal disorder of the same order of the bandwidth. Therefore, in this case the electronic behavior is characterized by exponentially localized eigenstates, thus promoting the saturation of σ and $\langle m(t) \rangle$ at long time limit. For $\alpha > 0$ we observed that the square root of the mean square displacement and the mean position increases with time. We also noticed that $\sigma \propto t^\zeta$ with $\zeta = 0.4 - 0.45$ i.e., a sub-diffusive behavior. The calculations in Fig. 1 suggest a disruption of the Anderson

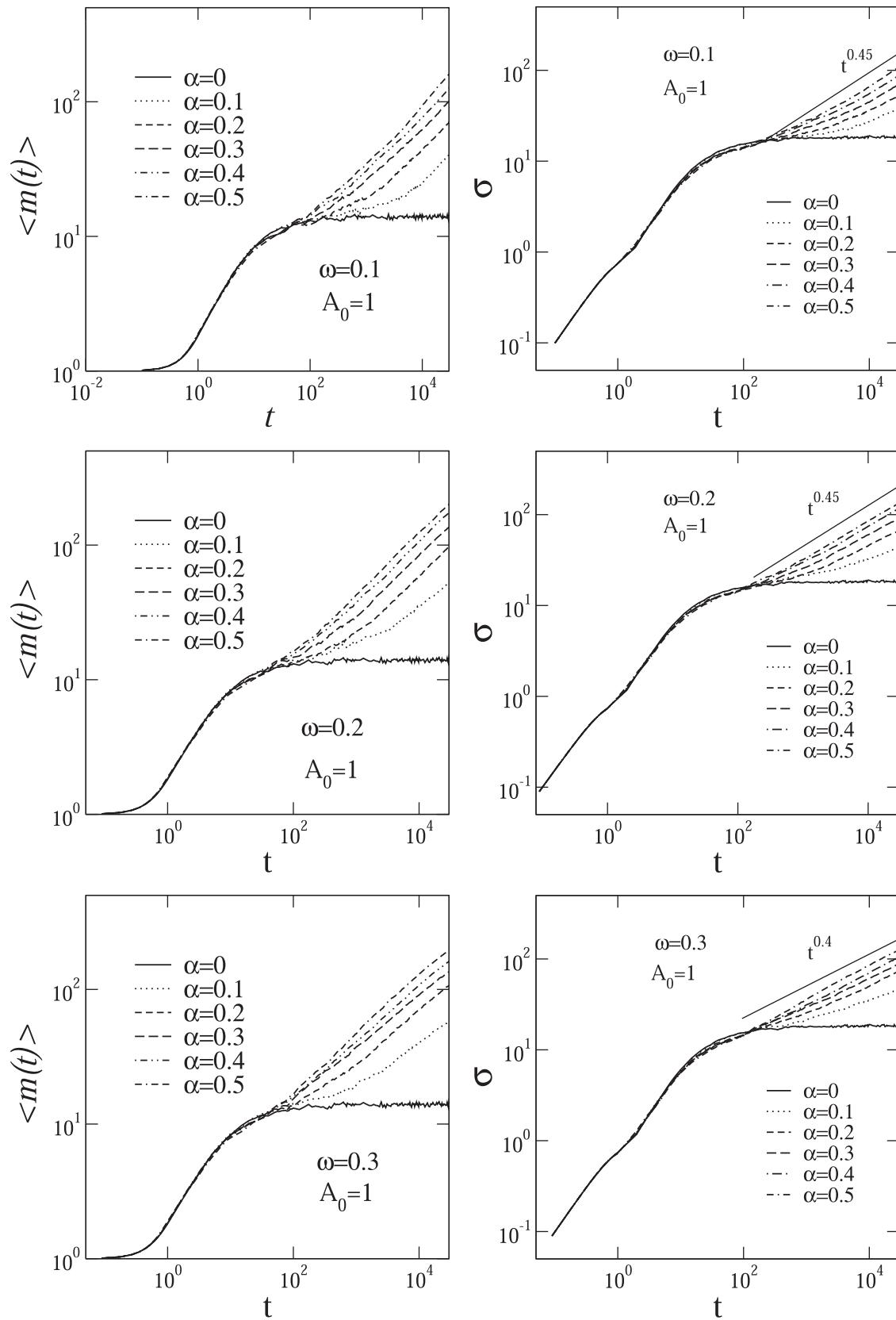


Fig. 1. The mean position and mean square displacement computed for $\omega = 0.1, 0.2, 0.3$ and $\alpha = 0$ up to 0.5. The amplitude of the pumping was set at $A_0 = 1$. For $\alpha > 0$ we can see that both $m(t)$ and $\sigma(t)$ increases along the time. Our calculations suggest that the coupling of the electron with the acoustic mode pumped in the left side of chain promotes the breakdown of the Anderson localization.

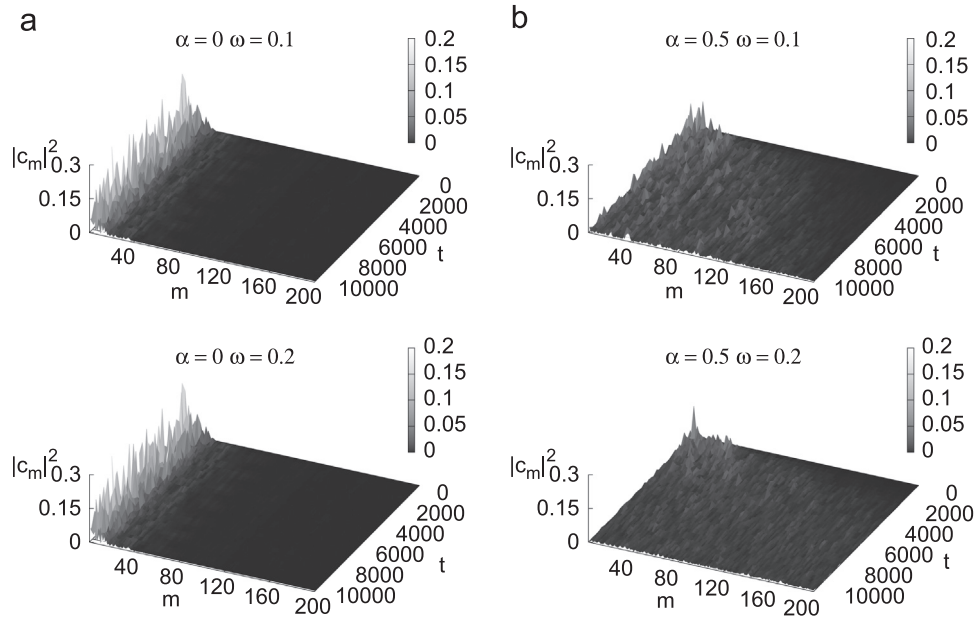


Fig. 2. $|c_m(t)|^2$ versus t and m for $\omega = 0.1, 0.2$ and $\alpha = 0, 0.5$.

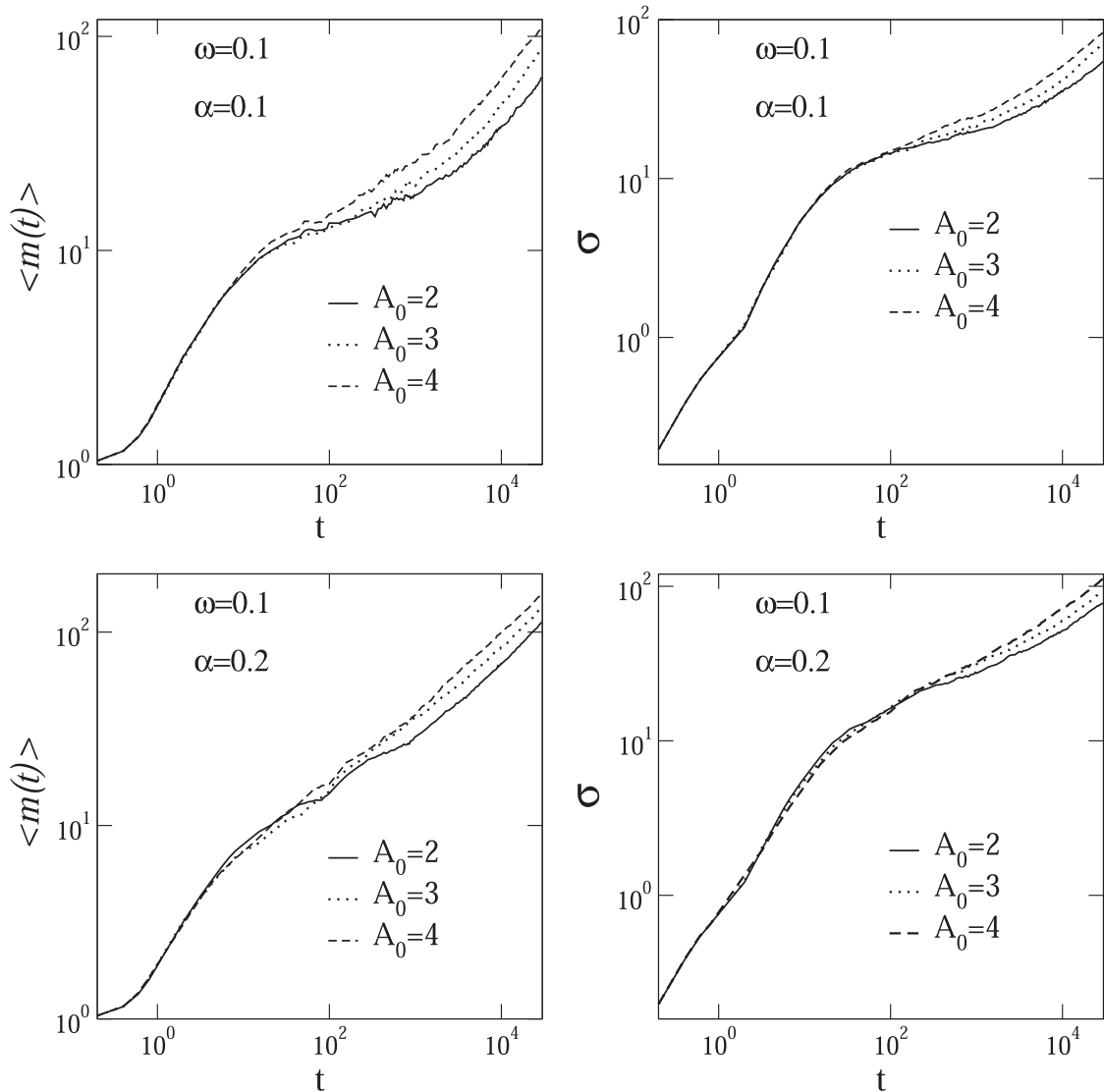


Fig. 3. The electronic centroid $\langle m(t) \rangle$ and the spread of the wave packet σ versus time for $\omega = 0.1$, $\alpha = 0.1, 0.2$ and $A_0 = 2, 3, 4$.

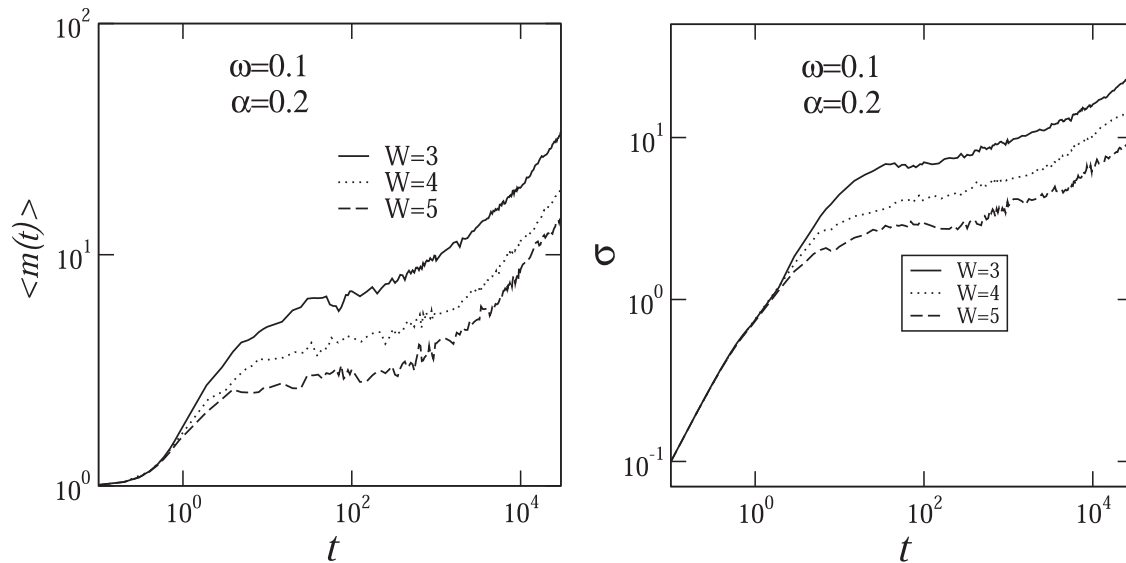


Fig. 4. The electronic centroid $\langle m(t) \rangle$ and the spread of the wave packet σ versus time for $\omega=0.1$, $\alpha=0.2$, $A_0=1$ and $W=3, 4, 5$.

localization induced by the coupling with acoustic mode pumped in the left side of chain. It is an interesting result. In general lines, the injection of the acoustic wave in one of the ends of the chain associated with the electron–phonon coupling promotes the electronic propagation even at the presence of strong diagonal disorder. The acoustic wave seems to “push” the electron through the disordered chain. In Fig. 2 we plot $|c_m(t)|^2$ versus t and m for $\omega=0.1, 0.2$ and $\alpha=0, 0.5$. We noticed that for $\alpha=0$ the wave-packet remains localized close to the left side of chain. For $\alpha=0.5$ we observed that the wave-packet spreads along the chain. The results shown in Fig. 2 are in good agreement with Fig. 1 thus suggesting that the coupling between the electron and the acoustic mode developed electronic transport. In Fig. 3 we analyzed briefly the effect of the pumping amplitude A_0 on the electronic transport. We plotted the electronic position $\langle m(t) \rangle$ and the wave-packet width σ versus time for $\omega=0.1$, $\alpha=0.1, 0.2$ and $A_0=2, 3, 4$. Our calculations suggest a small increment of both quantities as the pumping amplitude A_0 increases. However, in general lines, the main results seemed to be qualitatively independent of the pumping amplitude A_0 . Therefore the main summary of results shown in Figs. 1–3 suggests that, within the harmonic approximation, the coupling between the electron and a acoustic mode promote electronic dynamics. We emphasize that in our model we have considered a reasonable amount of disorder ($W=2$, i.e. the same order of the crystalline electronic bandwidth). We also emphasize that our results shown in the previous figures point out that even in the presence of intermediate amount of disorder, the acoustic wave mediates electron wave-packet dynamics along the chain. So this brings up the question: What happens at the limit of strong disorder? In Fig. 4 we included additional calculations for a more intense amount of disorder. We plotted the electronic position $\langle m(t) \rangle$ and the wave packet width for $\omega=0.1$, $\alpha=0.2$ and $W=3, 4, 5$. We emphasize that this threshold can be considered a strong disordered limit in one-dimensional chains (in special $W=5$). Our results denote again that the electron transport is maintained even in this case. We observed that the diffusion constant in fact decreases as the disorder parameter increases. However, both quantities have shown a subdiffusive behavior similar to those obtained in the previous calculations.

4. Summary and conclusions

In this work we have considered the dynamics of an initially localized wave packet in one-dimensional disordered chain under effect of electron–phonon interaction and the acoustic wave’s pumping. Our formalism consists of describing quantum electronic dynamics within the disordered chain and lattice vibration by two distinct Hamiltonians. The electron–lattice interaction was modeled by considering electron energy transfer between neighboring atoms as an exponential function of its effective distance. In our mathematical representation we set the electron initially localized at the first site of the chain and we add the pumping of an acoustic wave at the zero site. We solved numerically the dynamic equations for the electron and lattice performing calculations for the spreading of the electronic wave-packet. Our results point out that the electron–phonon coupling and the acoustic wave pumping promotes a breakdown of the Anderson localization. We analyzed the dependence of latter with the degree of disorder and we found that at the range of strong disorder, the electronic transport mediated by the electron–lattice coupling is still present. Our calculations were done describing the lattice by using a simplified harmonic theory. In general, nonlinear vibrations also play interesting roles within the context of electronic dynamics mediated by lattice vibrations. Our calculations demonstrated that, even within the harmonic approximation, the coupling with an acoustic wave propagating along the lattice can promote the charge transport. We hope that those calculations stimulate further studies 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] F.M. Izrailev, A.A. Krokhin, N.M. Makarov, *Phys. Rep.* 512 (2012) 125–254.
- [2] B. Santos, L.P. Viana, M.L. Lyra, F.A.B.F. de Moura, *Solid State Commun.* 138 (2006) 585.

- [3] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello, T.V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.* 42 (1979) 673.
- [4] B. Kramer, A. MacKinnon, *Rep. Prog. Phys.* 56 (1993) 1469; T.A.L. Ziman, *Phys. Rev. Lett.* 49 (1982) 337.
- [5] P.W. Anderson, *Phys. Rev.* 109 (1958) 1492.
- [6] R.A. Romer, H. Schulz-Baldes, *Europhys. Lett.* 68 (2004) 247.
- [7] V.N. Kuzovkov, W. von Niessen, *Physica A* 377 (2007) 115.
- [8] F.A.B.F. de Moura, Iram Gléria, I.F. dos Santos, M.L. Lyra, *Phys. Rev. Lett.* 103 (2009) 096401.
- [9] A.S. Pikovsky, D.L. Shepelyansky, *Phys. Rev. Lett.* 100 (2008) 094101.
- [10] Ignacio Gracia-Mata, Dima L. Shepelyansky, *Phys. Rev. E* 79 (2009) 026205.
- [11] A. Iomin, *Phys. Rev. E* 81 (2010) 017601.
- [12] S. Tietsche, A. Pikovsky, *Europhys. Lett.* 84 (2008) 10006.
- [13] Y. Lahini, A. Avidal, F. Pozzi, M. Sorel, R. Morandotti, D.N. Christodoulides, Y. Silberberg, *Phys. Rev. Lett.* 100 (2008) 013906.
- [14] S.E. Skipetrov, R. Maynard, *Phys. Rev. Lett.* 85 (2000) 736.
- [15] T. Schwartz, G. Bartal, S. Fishman, M. Sergev, *Nature* 446 (2007) 53.
- [16] S. Flach, D.O. Krimer, Ch. Skokos, *Phys. Rev. Lett.* 102 (2009) 024101.
- [17] D. Abhishek, J.L. Lebowitz, *Phys. Rev. Lett.* 100 (2008) 134301.
- [18] W.P. Su, J.R. Schrieffer, A.J. Heeger, *Phys. Rev. Lett.* 42 (1979) 1698; W.P. Su, J.R. Schrieffer, A.J. Heeger, *Phys. Rev. B* 22 (1980) 2099; A.J. Heeger, S. Kivelson, J.R. Schrieffer, W.-P. Su, *Rev. Mod. Phys.* 60 (1988) 781.
- [19] F.A.B.F. de Moura, R.A. Caetano, B. Santos, *J. Phys.: Condens. Matter* 24 (2012) 245401.
- [20] N.J. Zabusky, *Chaos* 15 (2005) 015102.
- [21] T. Dauxois, M. Peyrard, S. Ruffo, *Eur. J. Phys.* 26 (2005) S3–S11.
- [22] L. Brizhik, A.P. Chetverikov, W. Ebeling, G. Ropke, M.G. Velarde, *Phys. Rev. B* 85 (2012) 245105.
- [23] A.P. Chetverikov, W. Ebeling, M.G. Velarde, *Physica D* 240 (2011) 1954.
- [24] D. Hennig, M.G. Velarde, W. Ebeling, A.P. Chetverikov, *Phys. Rev. E* 78 (2008) 066606.
- [25] V.A. Makarov, M.G. Velarde, A.P. Chetverikov, W. Ebeling, *Phys. Rev. E* 73 (2006) 066626.
- [26] D. Hennig, C. Neissner, M.G. Velarde, W. Ebeling, *Phys. Rev. B* 73 (2006) 024306.
- [27] B.J. Alder, K.J. Runge, R.T. Scalettar, *Phys. Rev. Lett.* 79 (1997) 3022.
- [28] L.S. Brizhik, A.A. Eremko, *Physica D* 81 (1995) 295–304.
- [29] O.G. Cantu Ross, L. Cruzeiro, M.G. Velarde, W. Ebeling, *Eur. Phys. J. B* 80 (2011) 545–554.
- [30] M.G. Velarde, C. Neissner, *Int. J. Bifurc. Chaos* 18 (2008) 885–890.
- [31] A.P. Chetverikov, W. Ebeling, M.G. Velarde, *Eur. Phys. J. B* 80 (2011) 137–145.
- [32] M.G. Velarde, *J. Comput. Appl. Math.* 233 (2010) 1432.
- [33] M.G. Velarde, A.P. Chetverikov, W. Chetverikov, E.G. Ebeling, K.J. Wilson, *Donovan EPL* 168 (2014) 27004.
- [34] F.A.B.F. de Moura, *Physica D* 253 (2013) 66.
- [35] M.O. Sales, U.L. Fulco, M.L. Lyra, E.L. Albuquerque, F.A.B.F. de Moura, *J. Phys.: Condens. Matter* 27 (2015) 035104.
- [36] J.L.L. dos Santos, Ba Phi. Nguyen, F.A.B.F. de Moura, *Physica A* 435 (2015) 15–21.
- [37] J.M. Shilton, D.R. Mace, V.I. Talyanskii, Y. Galperin, M.Y. Simmons, M. Pepper, D. A. Ritchie, *J. Phys.: Condens. Matter* 8 (1996) L337–L343.
- [38] J.M. Shilton, V.I. Talyanskii, M. Pepper, D.A. Ritchie, J.E.F. Frost, C.J.B. Ford, C. G. Smith, G.A.C. Jones, *J. Phys. Condens. Matter* 8 (1996) L531.
- [39] 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, *Nature* 477 (2011) 439–442.
- [40] C.H.W. Barnes, J.M. Shilton, A.M. Robinson, *Phys. Rev. B* 62 (2000) 8410.
- [41] M.R. Astley, M. Kataoka, C.J.B. Ford, C.H.W. Barnes, D. Anderson, G.A.C. Jones, I. Farrer, D.A. Ritchie, M. Pepper, *Phys. Rev. Lett.* 99 (2007) 156802.
- [42] H. Sanada, T. Sogawa, H. Gotoh, K. Onomitsu, M. Kohda, J. Nitta, P.V. Santos, *Phys. Rev. Lett.* 106 (2011) 216602.
- [43] M.R. Astley, M. Kataoka, C.J.B. Ford, C.H.W. Barnes, D. Anderson, G.A. C. Jones, I. Farrer, D.A. Ritchie, M. Peppera, *Physica E* 40 (2008) 1136.
- [44] F.A.B.F. de Moura, *Int. J. Mech. Phys.* 22 (2011) 63.
- [45] M.O. Sales, S.S. Albuquerque, F.A.B.F. de Moura, *J. Phys. Condens. Matter* 24 (2012) 495401.