

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

CARLOS ALBERTO ARAGÃO DOS SANTOS

Modos Vibracionais em Sistemas
Aperiódicos Anarmônicos

Maceió
2011

CARLOS ALBERTO ARAGÃO DOS SANTOS

Modos Vibracionais em Sistemas Aperiódicos Anarmônicos

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

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

Maceió
2011

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

Bibliotecária Responsável: Helena Cristina Pimentel do Vale

S237m Santos, Carlos Alberto Aragão dos.
Modelos vibracionais em sistemas aperiódicos anarmônicos / Carlos
Alberto Aragão dos Santos. – 2011.
65 f. : il., graf.

Orientador: Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura.
Dissertação (dissertação em Física da Matéria Condensada) – Universidade
Federal de Alagoas. Instituto de Física. Maceió, 2011.

Bibliografia: f. 60-65.

1. Cadeias harmônicas. 2. Anarmônico (Física). 3. Modos vibracionais.
4. Aperiódico (Física). 5. Sólitons. I. Título.

CDU: 531.14



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

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

PARECER DA BANCA EXAMINADORA DE DEFESA DE
DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

"Modos Vibracionais em Sistemas Aperiódicos Anarmônicos"

por

Carlos Alberto Aragão dos Santos

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, do Departamento de Física da Universidade Federal de Alagoas/Polo Arapiraca e Iram Marcelo Gléria, do Instituto de Física Universidade Federal de Alagoas, consideram o candidato aprovado com grau "A".

Maceió, 04 de agosto de 2011

Prof. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura

Prof. Samuel Silva de Albuquerque

Prof. Iram Marcelo Gléria

Em memória do meu irmão José Roberto quem mais me incentivou e me inspirou a sempre continuar na minha caminhada. Nada apagará de minha mente seus ensinamentos e nada apagará do meu coração a saudade que sinto dele.

AGRADECIMENTOS

Creio que tudo tem o seu tempo determinado e há tempo para todo o propósito de baixo do céu. Contudo, posso contemplar o amor de Deus em minha vida e agradecê-lo por ser minha fortaleza presente em todo os momentos que precisei e pela oportunidade que me favoreceu no tempo determinado por ele.

Este é o momento mais oportuno para agradecer a todos aqueles que me propiciaram motivação e perseverança nesta caminhada, para que eu pudesse firmar meus passos e concretizar este ideal. E em especial aos meus pais José Araujo e Irene Aragão pelo amor e carinho e aos meus irmãos e sobrinhos que sempre estiveram me incentivando na minha caminhada, e também a minha namorada Tamires Cristina pela compreensão e pelo carinho que me transmitiu nessa minha jornada.

Agradeço aos professores e funcionários do instituto de física da UFAL em especial ao meu orientador Prof. Francisco Fidelis pela paciência e incentivo durante a minha caminhada.

Aos colegas do mestrado, um agradecimento especial a Thaila, Átila, Uéslen, Wesley, Tiago, Ana Paula, Rafael, Felipe, Hemerson, Pedro Heades, Moniellen, Lidiane, Núcia, Álvaro, Paulo, Júlio, pelo companheirismo e amizade durante essa jornada.

Agradeço ao apoio financeiro cedido pelas agências CAPES e FAPEAL.

Seja quem você for, seja qualquer posição que você tenha na vida, nível altíssimo ou mais baixo social, tenha sempre como meta: muita força, muita determinação e sempre faça tudo com muito amor e muita fé em Deus que um dia você chega lá, de alguma maneira você chega lá.

Ayrton Senna.

RESUMO

Neste trabalho vamos nos concentrar sobre o efeito da anarmonicidade em uma rede clássica não-periódica. Estudamos numericamente a competição entre as constantes de mola harmônicas aperiódicas com potenciais quadráticos não-lineares. Para produzir a distribuição da constante de mola aperiódica, utilizou-se uma função senoidal cuja fase varia como uma lei de potência, $\phi \propto n^\nu$, onde n é a posição ao longo da cadeia. Na ausência de acoplamento anarmônico foi demonstrado numericamente a existência de estados estendidos e propagação de energia livre para o grau suficiente de aperiodicidade. Os cálculos foram feitos usando o formalismo da matriz de transferência, diagonalização exata e solução numérica das equações de Hamilton. Nossos resultados indicam a presença de soluções estáveis de sólitons para o grau suficiente de aperiodicidade $\nu < 1$. No limite pseudo-aleatório $\nu > 1$, nossos cálculos indicam a presença de comportamento solitônico instável. O fluxo de energia em ambos regimes foi considerado.

Palavras-chave: Cadeias Harmônicas. Anarmônico. Modos Vibracionais. Aperiódico. Sólitons.

ABSTRACT

In this work we focus on the effect of anharmonicity on non-periodic classical lattices. We study numerically the competition between aperiodic harmonic spring constants with nonlinear quartic potentials. To produce an aperiodic distribution spring constants, it was used sinusoidal functions whose phase vary as a power-law, $\phi \propto n^\nu$, where n labels the positions along the chain. In the absence of unharmonic coupling we numerically demonstrated the existence of extended states and free energy propagation for sufficient degree of aperiodicity. Calculations were done by using transfer matrix formalism, exact diagonalization and numerical solution of Hamilton equations. By using numerical solutions of Hamilton's equations, we consider the effect of nonlinear terms in the Hamiltonian. Our results indicate the presence of stable soliton solutions for sufficient degree of aperiodicity $\nu < 1$. In the pseudorandom limit $\nu > 1$, our calculations indicated the presence of unstable solitonic behavior. The energy flux in both regime was considered.

Keywords: Cadeias Harmônicas, Anarmônico, Aperiódico, Modos Vibracionais, Sólitons.

Sumário

1	Vibrações em Cadeia Harmônica	11
1.1	Introdução	11
1.2	Aproximação Harmônica	12
1.2.1	Modos Vibracionais de um Cadeia Monoatômica	13
1.2.2	Modos Vibracionais de uma Cadeia Diatômica	21
1.3	Transporte de energia em Cadeia Harmônica: Formalismo Hamiltoniano	28
1.3.1	Excitação Inicial Tipo Impulso	33
1.3.2	Análise dos Momentos da Distribuição de Energia	34
1.4	Modos Vibracionais de uma Cadeia Harmônica com Desordem	36
1.5	A Matriz de Transfêrencia em uma Dimensão e o Expoente de Lyapunov	37
1.6	Modos Vibracionais de uma Cadeia Harmônica em Potencial Aperiódico	39
1.7	Termo Não Linear: Sóliton	40
2	Aspectos da Dinâmica Vibracional	45
2.1	Introdução	45
2.2	Cadeia Harmônica com Potencial Aperiódico	46
2.3	Dinâmica Energética no Limite Harmônico	51
2.4	Limite Anarmônico	54
3	Conclusão	59

Capítulo 1

Vibrações em Cadeia Harmônica

1.1 Introdução

O estudo da interação entre a desordem e a não-linearidade é de grande importância no campo da física da matéria condensada. Por exemplo, a localização dos modos vibracionais em sistemas de baixa dimensionalidade com desordem não correlacionada é um resultado bem estabelecido com diversas consequências sobre o transporte de calor. Por outro lado, a presença de potenciais não harmônicos representa uma mudança completa nas propriedades mecânicas, ópticas e eletrônicas. Dentro do contexto de modos vibracionais em sistemas não lineares, um dos efeitos mais importantes é a existência de sólitons [1–3]. Um dos principais estudos sobre transporte de energia em cadeias não lineares foi o trabalho de Fermi-Pasta-Ulam (FPU) [4]. FPU consideraram uma cadeia de osciladores não lineares e estudaram a redistribuição de energia entre os modos. Com esse trabalho chegou-se à descoberta dos fenômenos de recorrência de excitação explicada mais tarde como manifestação de sólitons. O transporte de energia em sistemas não lineares tem recebido até hoje uma forte atenção pela comunidade científica [5–11]. Neste trabalho de dissertação estamos interessados em estudar a competição entre a ausência

de periodicidade e a presença de potências não harmônicas.

1.2 Aproximação Harmônica

Em um sólido, as interações entre os átomos se dão por meio das ligações químicas existentes entre os mesmos [12; 13]. Vamos considerar que cada átomo apresente uma dada posição de equilíbrio $|\vec{r}| = r_0$; esta posição corresponde ao mínimo da energia potencial atômica $U(\vec{r})$. A aproximação harmônica para a vibração do átomo no entorno de sua posição de equilíbrio é obtida com a hipótese de ser pequena a amplitude da oscilação, ou seja, pequenos valores $|u| = |r - r_0| \ll r_0$. Portanto a sua energia potencial pode ser obtida expandindo-se em uma série de Taylor:

$$U(u) = U(0) + \left(\frac{dU}{du}\right)_{u=0} u + \frac{1}{2} \left(\frac{d^2U}{du^2}\right)_{u=0} u^2 + \frac{1}{6} \left(\frac{d^3U}{du^3}\right)_{u=0} u^3 + \dots \quad (1.1)$$

O primeiro termo da equação (1.1), de ordem zero, é uma constante, e não desempenha qualquer papel na dinâmica atômica. A primeira derivada deve ser nula, uma vez que na posição de equilíbrio, $U(u)$ assume um valor mínimo, ou seja: $\left[\left(\frac{dU}{du}\right)_{u=0} = 0\right]$. Os termos de ordem mais alta são desprezíveis para pequenos deslocamentos. Desta forma, a energia de interação é dada pela seguinte forma:

$$U(u) \simeq U(0) + \frac{1}{2}Cu^2 \quad (1.2)$$

Onde $C = \left(\frac{d^2U}{du^2}\right)_{u=0}$. O termo $\frac{1}{2}Cu^2$ na equação (1.2) representa a energia potencial harmônica que está associada à resultante das forças que atuam no átomo e é definida pelo gradiente de energia potencial

$$F = - \left(\frac{dU}{du} \right)_{u=0} = -Cu. \quad (1.3)$$

Observa-se que essa força é do tipo Lei de Hooke. Esta aproximação de primeira ordem desenvolvida anteriormente é conhecida como aproximação harmônica. A equação (1.2) corresponde à expressão da energia potencial de um oscilador harmônico em uma dimensão. No caso para pequenos deslocamentos em torno da posição de equilíbrio, os átomos se comportam como duas massas ligadas por uma mola, portanto numa primeira aproximação uma rede cristalina pode ser modelada por uma cadeia de osciladores harmônicos. Para uma expressão mais geral, uma rede cristalina tridimensional, em um sistema de coordenada xyz a energia potencial toma a seguinte forma:

$$U(\vec{u}) \simeq U(0) + \frac{1}{2}C_{xx}u_x^2 + \frac{1}{2}C_{yy}u_y^2 + \frac{1}{2}C_{zz}u_z^2, \quad (1.4)$$

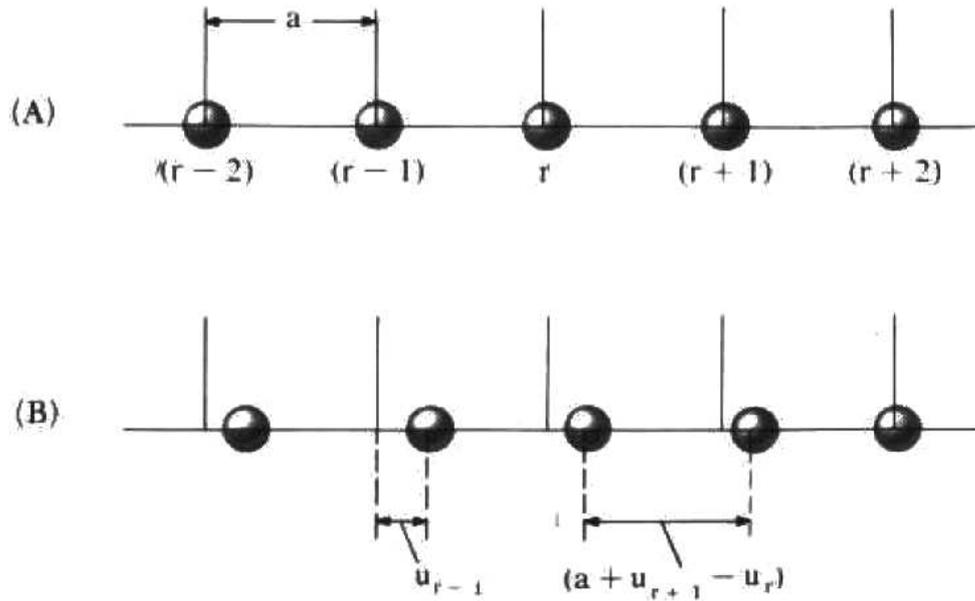
onde $U(u)$ é determinada pela energia total de um sistema formado por três osciladores harmônicos independentes, com constantes elásticas, C_{xx} , C_{yy} e C_{zz} .

No caso da energia potencial ser quadrática, eq. (1.2), a força resultante exercida entre os átomos é linear ao deslocamento, eq. (1.3). Em muitos casos, mantendo-se a temperatura baixa, pode-se usar apenas a energia potencial harmônica; os termos de ordem superior, ou termo anarmônicos, em geral são mais importantes em temperatura alta.

1.2.1 Modos Vibracionais de um Cadeia Monoatômica

Um cristal monoatômico unidimensional consiste num conjunto de átomos idênticos, com movimentos de oscilação em torno da posições de equilíbrio, espaçados entre si com

Figura 1.1: Modelo de um cristal em uma estrutura de cadeia linear monoatômico. (A) os átomos nas posições de equilíbrio, e (B) os átomos deslocados pela passagem de uma onda longitudinal.



Fonte:(Blakemore,1985)

uma distância a , chamada de parâmetro da rede cristalina unidimensional, representada na figura (1.1).

A força que o átomo $r + p$ exerce sobre o r -ésimo átomo em um dado instante, com a aproximação harmônica, é proporcional à diferença $u_{r+p} - u_r$. A resultante das forças que todos os átomos exercem sobre ele é determinada por:

$$F_r(t) = \sum_p C_p [u_{r+p}(t) - u_r(t)]; \quad (1.5)$$

onde $p = \dots, -2, -1, 0, +1, +2, \dots$ é o índice que computa a contribuição de cada átomo

da cadeia linear para essa força resultante, e C_p é a constante de força entre os átomos separados por uma distância p .

De acordo com a segunda Lei de Newton, essa força é igual à massa, m , do átomo em estudo, multiplicado pela sua aceleração que é dada por $a_r(t) = \frac{d^2 u_r(t)}{dt^2}$. Dessa forma, obtém-se a equação de onda para meios cristalinos.

$$m \frac{d^2 u_r(t)}{dt^2} = \sum_p C_p [u_{r+p}(t) - u_r(t)]. \quad (1.6)$$

Considerando, somente os modos de propagação (com frequência angular w e o vetor de onda \vec{k}) em uma cadeia linear, pode se encontrar as soluções para $u_r(t)$ através de ondas planas a saber:

$$u_r(t) = u_0 \exp[i(rka - wt)], \quad (1.7)$$

substituindo esta função em (1.6), obtém-se:

$$-mw^2 u_r(t) = \sum_p C_p u_r(t) [e^{ipka} - 1]. \quad (1.8)$$

Esta relação pode também ser escrita como:

$$-mw^2 u_r(t) = \sum_{p_+} C_p u_r(t) [e^{ip_+ka} - 1] + \sum_{p_-} C_p u_r(t) [e^{ip_-ka} - 1]; \quad (1.9)$$

onde $p_+ = 0, +1, +2, +3, \dots$ e $p_- = \dots, -3, -2, -1$. Considerando a simetria de translação, $C_{p_+} = C_{p_-}$, e também $p = p_+ = -p_-$, pode-se reescrever a equação (1.9) na forma:

$$-mw^2 u_r(t) = \sum_{p>0} C_p u_r(t) [e^{ipka} + e^{-ipka} - 2]; \quad (1.10)$$

substituindo a identidade $e^{ipka} + e^{-ipka} = 2 \cos pka$ e cancelando o termo $u_r(t)$ de ambos os membros, temos a relação de dispersão para os cristais unidimensionais. Esta relação relaciona w com o vetor de onda \vec{k} .

$$w^2 = \frac{2}{m} \sum_{p>0} C_p (1 - \cos pka); \quad (1.11)$$

utilizando a identidade $\cos pka = 1 - 2 \sin^2 \left(\frac{pka}{2} \right)$, a relação toma a seguinte forma:

$$w^2 = \frac{4}{m} \sum_{p>0} C_p \sin^2 \left(\frac{pka}{2} \right). \quad (1.12)$$

Da equação (1.11), onde os pontos de máximo dessa relação de dispersão ocorrem quando $\frac{dw^2}{dk} = 0$, ou seja:

$$\frac{dw^2}{dk} = \frac{2}{m} \sum_{p>0} pa C_p \sin pka = 0, \quad (1.13)$$

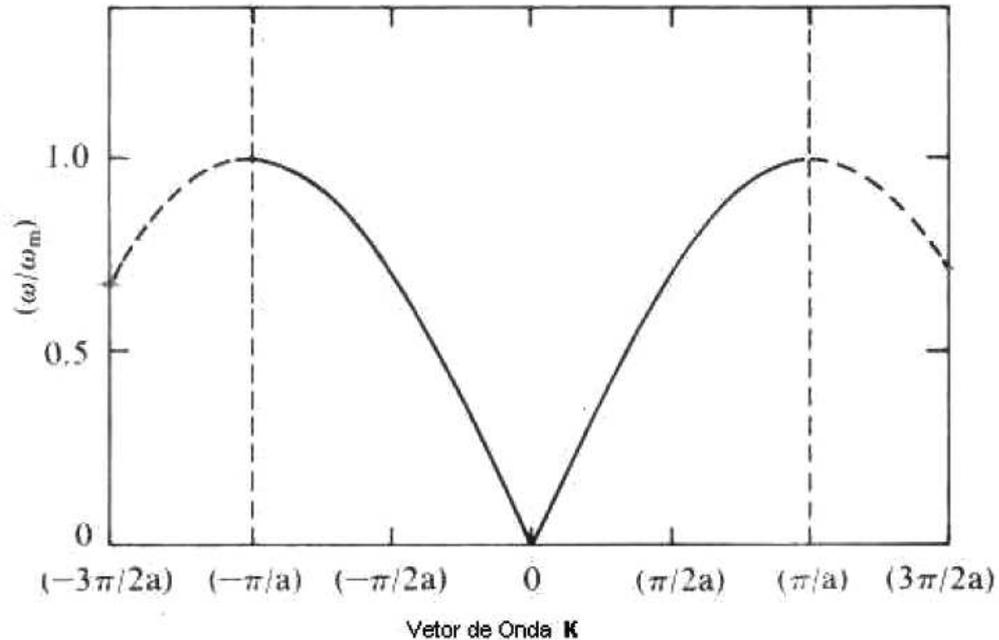
para que a igualdade da equação (1.14) seja satisfeita, é necessário que o vetor de onda \vec{k} assumam valores: $\pm\pi/a$, que são os limites da primeira zona de Brillouin, onde $\sin pka = \sin p\pi = 0$.

Considerando interações somente entre os primeiros vizinhos, isto é, p se restringe a ± 1 , a equação (1.12) torna-se:

$$w^2 = \frac{4C}{m} \sin^2 \frac{ka}{2}; \quad w = \pm w_m \left| \sin \frac{ka}{2} \right|, \quad (1.14)$$

onde $w_m = 2\sqrt{C/m}$, é a frequência máxima permitida para as vibrações longitudinais

Figura 1.2: Relação de dispersão para as vibrações num cristal monoatômico unidimensional, considerando interações somente entre os primeiros vizinhos. O intervalo $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$ corresponde à primeira zona de Brillouin [14].



Fonte:(Blakemore,1985)

numa cadeia monoatômica. O sinal \pm da equação (1.14) indica a direção de propagação da vibração, onde a onda se propaga tanto para direita ou para esquerda. o movimento em qualquer ponto é periódico no tempo [14].

A relação de dispersão da equação (1.14) corresponde ao chamado modo acústico de vibração para a propagação de ondas longitudinais em uma estrutura linear monoatômica, considerando apenas as interações entre os primeiros vizinhos. Na figura (1.2) nos mostra o gráfico da frequência w em função do vetor de onda \vec{k} , onde destaca-se a região $-\pi/a \leq k \leq \pi/a$, que corresponde à primeira zona de Brillouin do cristal.

Uma das principais características das relações de dispersão em meios cristalinos unidimensionais (1.11), é o fato de w ser uma função periódica do vetor de onda \vec{k} , de período $2\pi/a$, ou seja,

$$w\left(k + \frac{2\pi}{a}\right) = w(k). \quad (1.15)$$

Da eq. (1.7), a razão entre dois deslocamentos sucessivos é dada por:

$$\frac{u_{r+1}}{u_r} = \frac{u_0 e^{i(r+1)ka}}{u_0 e^{irka}} = e^{ika}, \quad (1.16)$$

o intervalo de $-\pi \leq ka \leq \pi$, cobre todos os valores fisicamente possíveis para o vetor de onda ka [15]. Deste modo, basta conhecer a função $w(k)$, sendo esta completamente definida no intervalo

$$k \in \left[-\frac{\pi}{a}, +\frac{\pi}{a}\right]. \quad (1.17)$$

Este intervalo corresponde à primeira zona de Brillouin [12; 13].

Os valores de k na fronteira da primeira zona de Brillouin estão associados à ondas estacionárias. De fato, quando $k = \pm\pi/a$ o deslocamento torna-se:

$$u_r = u_0 e^{\pm ir\pi} = u_0 (-1)^r. \quad (1.18)$$

Da equação acima conclui-se que os átomos da rede movem-se em fases opostas, ou seja, a onda não se propaga nem para a direita nem para a esquerda, independentemente de r ser um número par ou um número ímpar. Logo, a equação (1.18) representa uma onda estacionária e não uma onda progressiva. Então, no limite da primeira zona de Brillouin, $k = \pm\pi/a$, esta situação é análoga à reflexão de Bragg dos raios X [13; 14]. Deste modo, quando a condição de Bragg for satisfeita, a onda sofre reflexões sucessivas para frente e para trás produzindo uma onda estacionária. Assim, pela condição de Bragg

$2d \sin \theta = n\lambda$, no limite da primeira zona de Brillouin pode-se definir que $\theta = \pi/2$, $d = a$, $k = 2\pi/\lambda$ e $n = 1$, de modo que $\lambda = 2a$

Limite Contínuo

No limite contínuo, isto é, para longos comprimentos de onda, temos que $\lambda \gg a$ ou $pka \ll 1$. Lembrando que $k = 2\pi/\lambda$, conseqüentemente $\sin^2 pka \cong (pka/2)^2$, de modo que a relação de dispersão da equação (1.12) pode ser escrita como:

$$w^2 = k^2 \left(\frac{a^2}{m} \sum_{p>0} p^2 C_p \right). \quad (1.19)$$

Assim, a relação de dispersão $w(k)$, no limite de grandes comprimentos de onda, é diretamente proporcional ao vetor de onda k . Este resultado define a relação de ondas mecânicas em meios contínuos, que são determinadas por $w = vk$. Considerando apenas as interações entre primeiros vizinhos, $p = 1$, $w(k)$ é determinado por:

$$w(k) = 2\sqrt{\frac{C}{m}} \left| \frac{ka}{2} \right| = a\sqrt{\frac{C}{m}} |k|. \quad (1.20)$$

Ao analisar a velocidade de um pacote de onda, definida como $v_g = \vec{\nabla}_k w(k)$, que se propaga na cadeia monoatômica linear tem-se

$$v_g = \vec{\nabla}_k w(k) = \frac{dw}{dk} = a\sqrt{\frac{C}{m}} \cos \frac{ka}{2}. \quad (1.21)$$

Através do cálculo da velocidade de grupo, pode-se constatar o aparecimento de ondas estacionárias para $k = \pm\pi/a$, onde $v_g = 0$. No limite contínuo, verifica-se das expressões (1.20) e (1.21), que a frequência angular w é diretamente proporcional ao módulo do vetor de onda, $|\vec{k}|$, o que é equivalente a dizer que a velocidade de propagação da vibração é

independente da frequência. Por este motivo as velocidades de fase ($v_f = w/k$) e de grupo ($v_g = dw/dk$) das ondas são equivalentes. Então, para o limite contínuo podemos escrever:

$$v_g = v_f \approx a \sqrt{\frac{C}{m}}. \quad (1.22)$$

Dedução da Constante de Força

A partir do cálculo da função de dispersão $w(\vec{k})$ pode-se determinar a constante de força efetiva entre os átomos.

A constante de força C_p é determinada multiplicando ambos os membros da equação (1.11) por $\cos rka$, onde r é um inteiro, e integrando sobre o intervalo de valores independentes de k , de modo que:

$$m \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk w^2 \cos rka = 2 \sum_{p>0} C_p \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk (1 - \cos pka) \cos rka. \quad (1.23)$$

A integral da direita se anula, exceto para $p = r$. Logo tem-se que,

$$2 \sum_{p>0} C_p \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk (1 - \cos pka) \cos rka = -2\pi \frac{C_p}{a}, \quad (1.24)$$

resultando em:

$$C_p = -\frac{ma}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk w^2 \cos pka. \quad (1.25)$$

A constante C_p corresponde à transformada de Fourier da relação de dispersão $w^2(K)$.

Essa relação é válida apenas para redes monoatômicas [16; 17].

1.2.2 Modos Vibracionais de uma Cadeia Diatômica

Numa descrição clássica, usamos as equações de movimento de Newton para o movimento vibratório dos átomos nos sólidos diatômicos unidimensionais. Os aspectos de relação de dispersão de fônons são evidenciados quando da consideração de bases com dois ou mais átomos, tais como as estruturas de NaCl ou do diamante, ambos com dois átomos por célula primitiva [13]. Para cada direção de propagação de ondas, a relação de dispersão w versus k desenvolve dois ramos conhecidos como acústico e óptico. Consequentemente, os modos de vibracionais se desdobram em longitudinal e transversal.

Consideremos uma rede unidimensional com dois átomos com massas m_1 e m_2 situados em planos paralelos e alternados entre si, como é mostrado na figura (1.3), onde assume-se que a constante de força elástica C é a mesma para todos os pares de átomos e que o parâmetro da rede na direção perpendicular aos planos considerados seja a . Nesse caso, para cada plano que contém apenas um tipo de átomo, a onda se propaga na mesma direção do deslocamento dos átomos.

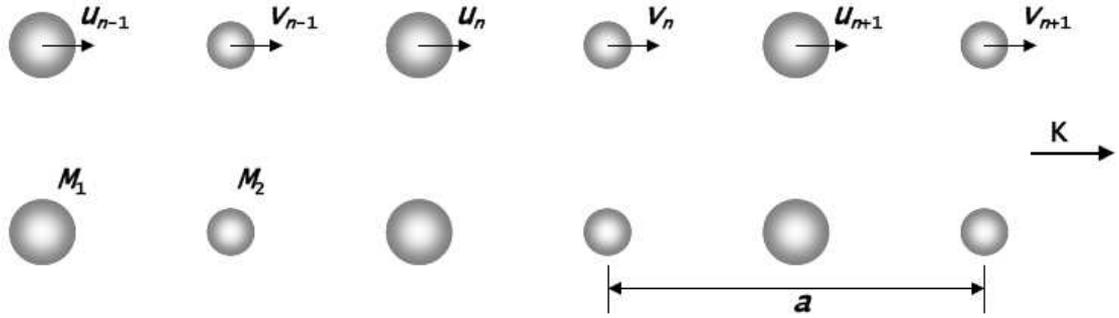
Os deslocamentos em relação às posições de equilíbrio são u_n e v_n para os átomos na posição n , cujas massas são m_1 e m_2 , respectivamente. Analogamente ao caso da cadeia monoatômica linear, é possível desenvolver as equações de movimento para cada um dos átomos, como segue:

$$m_1 \frac{d^2 u_n}{dt^2} = C(v_n + v_{n-1} - 2u_n); \quad (1.26)$$

$$m_2 \frac{d^2 v_n}{dt^2} = C(u_{n+1} + u_n - 2v_n). \quad (1.27)$$

Cada par de átomos tem um modo normal representado por uma onda plana sim-

Figura 1.3: Cadeia cristalina diatômica linear com átomos de massas m_1 e m_2 ligadas pela constante de força C entre os planos adjacentes, onde o espaçamento entre dois planos idênticos é definido por a .



Fonte:(Kittel, 2006)

ilar a da equação (1.7), mas com diferentes amplitudes u e v para ambos os átomos, determinada por:

$$u_n = u \exp(inka - i\omega t); \quad (1.28)$$

$$v_n = v \exp(inka - i\omega t). \quad (1.29)$$

Deste modo as equações (1.26) e (1.27) assumem a forma:

$$(2C - m_1\omega^2)u - Cv[1 + \exp(-ika)] = 0; \quad (1.30)$$

$$(2C - m_2\omega^2)v - Cu[\exp(ika) + 1] = 0. \quad (1.31)$$

Dadas as equações (1.30, 1.31) podemos escrevê-las na forma matricial:

$$\begin{bmatrix} 2C - m_1 w^2 & -C(1 + e^{-ika}) \\ -C(1 + e^{ika}) & 2C - m_2 w^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (1.32)$$

A solução não trivial das equações diferenciais acopladas é obtida da condição de que o determinante da matriz, cujos coeficientes são u e v , seja nulo:

$$\begin{vmatrix} 2C - m_1 w^2 & -C(1 + e^{-ika}) \\ -C(1 + e^{ika}) & 2C - m_2 w^2 \end{vmatrix} = 0. \quad (1.33)$$

ou seja

$$m_1 m_2 w^4 - 2C(m_1 + m_2)w^2 + 2C^2(1 - \cos ka) = 0. \quad (1.34)$$

Esta equação do segundo grau (em w^2) admite duas soluções dadas pela seguinte expressão:

$$w^2 = \frac{C}{m_1 m_2} \left[(m_1 + m_2) \pm (m_1^2 + m_2^2 + 2m_1 m_2 \cos(ka))^{1/2} \right]. \quad (1.35)$$

A equação (1.35) corresponde à relação de dispersão para a cadeia diatômica linear. Com isso, podemos analisar alguns casos limites para esta relação de dispersão.

Primeiro caso limite:

Considerando valores pequenos, $ka \ll 1$, pode-se escrever a expansão de Taylor,

$\cos(ka) \cong 1 - \frac{1}{2}k^2a^2 + \dots$. Ao substituir esta expansão na relação de dispersão dada pela equação (1.35), obtém-se:

$$w^2 = \frac{C}{m_1m_2} \left[(m_1 + m_2) \pm (m_1 + m_2) \left(1 - \frac{m_1m_2k^2a^2}{(m_1 + m_2)^2} \right)^{1/2} \right]; \quad (1.36)$$

Onde o termo $\frac{m_1m_2k^2a^2}{(m_1+m_2)^2}$ da equação (1.36) é bastante pequeno, desta forma pode-se usar a expansão em série de Taylor $(1 - x)^n \approx 1 - nx + \dots$, obtendo:

$$w^2 = \frac{C}{m_1m_2} \left[(m_1 + m_2) \pm (m_1 + m_2) \left(1 - \frac{1}{2} \frac{m_1m_2k^2a^2}{(m_1 + m_2)^2} \right) \right]. \quad (1.37)$$

A existência do sinal (\pm) na equação (1.37) permite escrever duas relações de dispersão, uma para o sinal negativo e outra para o sinal positivo. Da relação de dispersão com o sinal negativo, obtém-se:

$$w_-^2 = \frac{C}{2} \frac{k^2a^2}{(m_1 + m_2)}. \quad (1.38)$$

Esta relação de dispersão é chamada de Modo Acústico de Vibração. Nesta solução os átomos movem-se juntos produzindo as vibrações acústicas de longos comprimentos de onda.

Ao analisar a relação de dispersão com sinal positivo, partindo da equação (1.37), encontra-se:

$$w_+^2 = \frac{2C(m_1 + m_2)}{m_1m_2} \left[1 - \frac{1}{4} \frac{m_1m_2k^2a^2}{(m_1 + m_2)^2} \right], \quad (1.39)$$

onde o termo $\frac{1}{4} \frac{m_1 m_2 k^2 a^2}{(m_1 + m_2)^2}$ da equação (1.39) pode ser desprezado, pois $ka \ll 1$. Deste modo, temos:

$$w_+^2 = 2C \left[\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right]. \quad (1.40)$$

Esta relação de dispersão é chamada de Modo Óptico de Vibração. Nesta frequência os átomos com massas diferentes vibram uns contra os outros, caso eles tenham cargas elétricas opostas é possível excitar este movimento através do campo elétrico de uma onda luminosa.

Segundo caso limite:

Dentro da primeira zona de Brillouin o vetor de onda \vec{k} pode variar dentro do intervalo $\pi/a \leq k \leq \pi/a$. Deste modo, analisando o comportamento da relação de dispersão dada pela equação (1.35) no limite da primeira zona de Brillouin temos que:

$$w^2 = \frac{C}{m_1 m_2} [(m_1 + m_2) \pm (m_1 - m_2)]. \quad (1.41)$$

Da mesma forma que no primeiro caso limite, pode-se encontrar uma relação de dispersão com sinal negativo e outra com sinal positivo. A relação de dispersão com sinal negativo e positivo é determinada por:

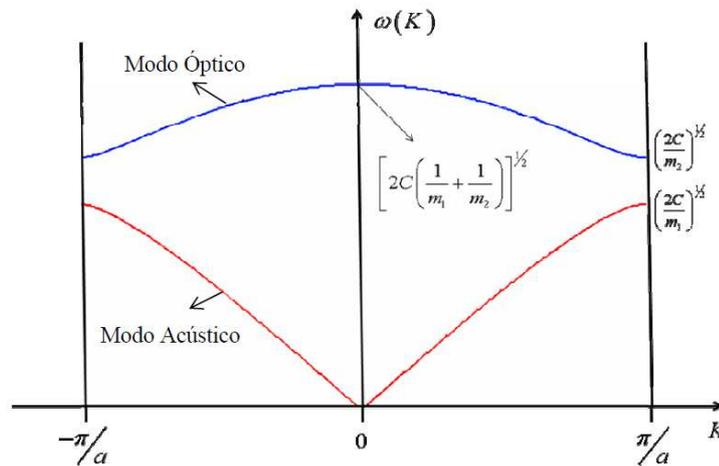
$$w_-^2 = \frac{2C}{m_1}; \quad w_+^2 = \frac{2C}{m_2}. \quad (1.42)$$

Conclui-se que para a relação de dispersão de uma cadeia diatômica linear a frequên-

cia w_- corresponde ao Modo Acústico de Vibração e a frequência w_+ corresponde ao Modo Óptico de Vibração. Através dos resultados obtidos nos dois casos limites, pode-se construir o gráfico da relação de dispersão determinada pela expressão (1.35).

Na figura (1.4) é mostrada a curva de dispersão da rede diatômica. Entre os dois ramos se encontra uma faixa de frequência que não tem solução para k real. Esta faixa é conhecida como *band gap* [13].

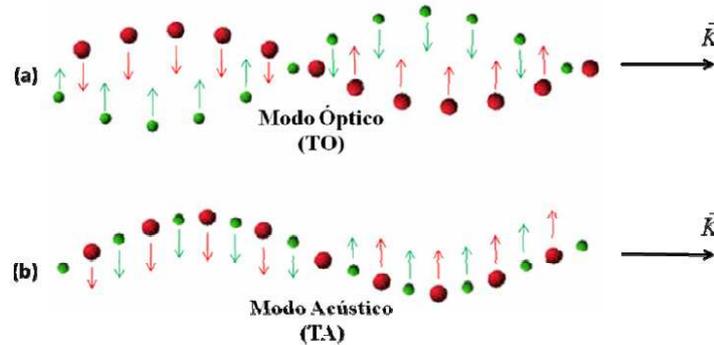
Figura 1.4: Relação de dispersão para a propagação de uma onda longitudinal em uma cadeia diatômica linear, para $m_1 > m_2$. O ramo inferior é o ramo acústico e o ramo superior é chamado de ramo óptico.



Fonte:(Ashcroft,1976)

A figura (1.5) ilustra os modos vibracionais transversais de movimento dos átomos na cadeia diatômica linear [12; 13]. O movimento de vibração dos átomos acontece numa direção perpendicular ao vetor de onda \vec{k} da onda progressiva de fônons. Por este motivo, os dois modos normais de vibração são chamados de transversais, Modo Óptico Transversal (TO) e Modo Acústico Transversal (TA). Além destes modos transversais de vibração, existem também os modos longitudinais de vibração, conhecido como Modo

Figura 1.5: O movimento vibracional dos átomos em uma cadeia diatômica linear. (a) representa o modo óptico transversal (TO), o qual possui a frequência w_+ . (b) representa o modo acústico transversal (TA), o qual possui a frequência w_- .



Fonte:(Ashcroft,1976)

Acústico Longitudinal (LA) e Modo Óptico Longitudinal (LO). Nos modos vibracionais longitudinais, o movimento de vibração dos átomos acontece na mesma direção do vetor de onda \vec{k} da onda progressiva de fônons.

A classificação dos modos de vibração em ramos acústico e óptico pode ser estendido a um sólido tridimensional com base diatômica. Para cada valor de \vec{k} existem $3p$ modos normais de vibração, onde p é o número de átomos que estão na base ou célula primitiva do cristal. Sendo que, deste total de modos normais ($3p$), 3 são modos acústico e ($3p - 3$) ramos ópticos [12]. O número de ramos é função da quantidade de graus de liberdade dos átomos. Considerando N células primitivas e p átomos por célula, ou seja, pN átomos no cristal, e tendo cada átomo três graus de liberdade, um para cada direção x , y e z , obtém-se um total de $3pN$ graus de liberdade para os átomos do cristal. O número de ramos para cada grau de liberdade é distribuído da seguinte forma:

N modos acústicos longitudinais

$2N$ modos acústico transversais

$(p - 1)N$ modos ópticos longitudinais

$2(p - 1)N$ modos ópticos transversais

1.3 Transporte de energia em Cadeia Harmônica: Formalismo Hamiltoniano

Considerando uma cadeia harmônica unidimensional de N massas, no qual pode-se escrever o Hamiltoniano clássico de uma cadeia harmônica como $H = \sum_{n=1}^N h_n(t)$, onde a energia $h_n(t)$ de massa no sítio (n) é determinada por:

$$h_n(t) = \frac{p_n^2}{2m_n} + \frac{1}{4}[\beta_n(q_{n+1} - q_n)^2 + \beta_{n-1}(q_n - q_{n-1})^2]. \quad (1.43)$$

Os termos p_n representa o momento e o q_n é o deslocamento do átomo n ao longo da cadeia com relação a sua posição de equilíbrio. As equações de movimento para p_n e q_n podem ser obtidas a partir das equações de Hamilton determinada abaixo:

$$\begin{aligned} \dot{p}_n(t) &= -\frac{\partial H}{\partial q_n} = \beta_n(q_{n+1} - q_n) - \beta_{n-1}(q_n - q_{n-1}); \\ \dot{q}_n(t) &= \frac{\partial H}{\partial p_n} = \frac{p_n(t)}{m_n}. \end{aligned} \quad (1.44)$$

Aqui deve-se considerar $\beta = \beta_n = \beta_{n-1}$, que determina a constante de força. A sua frequência máxima de fônons é dado por $\Omega_D^2 = 4\beta/m_n$ [1]. Introduz-se algumas variáveis adimensionais:

$$P_m = p_n/m_n\Omega_D, \quad Q_m = q_n,$$

$$\tau = \Omega_D t. \quad (1.45)$$

Pode-se determinar da equação (1.43) a evolução espacial e temporal da energia de vibrações da rede, localizada no centro do sítio, que pode ser descrita pela densidade de energia $E_m(t) = \frac{h_n(t)}{m_n\Omega^2}$ da seguinte forma:

$$E_m(t) = \frac{P_m^2}{2} + \frac{\Omega_D^2}{16} [(Q_{m+1} - Q_m)^2 + (Q_m - Q_{m-1})^2]. \quad (1.46)$$

Para determinar a diagonalização do Hamiltoniano da eq. (1.43) partindo da coordenadas normais (Q_k, P_k) obtem-se:

$$Q_m = \sum_k \mu_m(k) Q_k, \quad (1.47)$$

$$P_m = \sum_k \mu_m^*(k) P_k; \quad (1.48)$$

onde os autovetores $\mu_m(k)$ constituem um sistema de ortonormal completo determinado da seguinte forma:

$$\mu_m(k) = \frac{1}{\sqrt{(N+1)}} \exp\left(i \frac{2\pi}{N+1} km\right), \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots, \pm N/2 \quad (1.49)$$

o Hamiltoniano diagonalizado é da seguinte forma $H = \frac{1}{2} \sum_k [P_k P_k^* + \Omega_k^2 Q_k Q_k^*]$, onde

$\Omega_k^2 = \Omega_D^2 \sin^2(\pi k/(N+1))$ é a relação de dispersão [18]. A dinâmica do sistema das coordenadas normais (Q_m, P_m) em termos das condições iniciais é determinada por Hamilton-Heisenberg da seguinte forma:

$$Q_k(t) = Q_k(0) \cos \Omega_k t + \Omega_k^{-1} P_k^*(0) \sin \Omega_k t, \quad (1.50)$$

$$P_k(t) = P_k(0) \cos \Omega_k t - \Omega_k Q_k^*(0) \sin \Omega_k t, \quad (1.51)$$

onde pode-se definir a evolução temporal das coordenadas originais partindo da equação (1.47 e 1.48) obtêm-se as seguintes expressões

$$Q_m = \sum_n Q_n(0) \sum_k \mu_m(k) \mu_n^*(k) \cos \Omega_k t + \sum_n P_n(0) \sum_k \mu_m(k) \mu_n^*(k) \Omega_k^{-1} \sin \Omega t, \quad (1.52)$$

$$P_m = \sum_n P_n(0) \sum_k \mu_m(k) \mu_n^*(k) \cos \Omega_k t - \sum_n Q_n(0) \sum_k \mu_m(k) \mu_n^*(k) \Omega_k \sin \Omega t. \quad (1.53)$$

A partir dessas equações pode-se definir que:

$$Q_m = \sum_n Q_n(0) S_{mn}^{(1)}(t) + \sum_n P_n(0) S_{mn}^{(2)}(t) \quad (1.54)$$

$$P_m = \sum_n P_n(0) S_{mn}^{(1)}(t) - \sum_n Q_n(0) S_{mn}^{(3)}(t), \quad (1.55)$$

onde essa expressão determina a propagação de energia espacial para qualquer condição inicial. Com isso, utilizando as funções de Bessel [19] pode-se determinar os valores de

$S_{mn}^{(1)}(t)$, $S_{mn}^{(2)}(t)$ e $S_{mn}^{(3)}(t)$ da seguinte forma:

$$S_{mn}^{(1)} = \sum_k \mu_m(k) \mu_n^*(k) \cos \Omega_k t = \frac{1}{N+1} \sum_{k=-N/2}^{N/2} \exp[i2\pi(m-n)k/(N+1)] \cos[\Omega_D t \sin(\pi k/(N+1))]. \quad (1.56)$$

No limite para N muito grande, ou seja, $N \gg 1$, pode-se transformar a soma da eq. (1.56) para uma forma integral e fazendo uma mudança de variável $\varepsilon = \pi k/(N+1)$ obtém-se

$$S_{mn}^{(1)} = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\varepsilon \exp[2i(m-n)\varepsilon] \cos(\Omega_D t \sin \varepsilon), \quad (1.57)$$

utilizando a fórmula de Euler $e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$ na equação acima tem-se:

$$S_{mn}^{(1)} = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos(\Omega_D t \sin \varepsilon) \cos[2(m-n)\varepsilon] d\varepsilon + \frac{i}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos(\Omega_D t \sin \varepsilon) \sin[2(m-n)\varepsilon] d\varepsilon, \quad (1.58)$$

a segunda integral do lado direito é nula, pois temos o produto entre uma função ímpar e outra par. Deste modo, obtém-se

$$S_{mn}^{(1)} = \frac{1}{\pi/2} \int_0^{\pi/2} \cos(\Omega_D t \sin \varepsilon) \cos[2(m-n)\varepsilon] d\varepsilon, \quad (1.59)$$

utilizando as propriedades da função de Bessel, $J_n(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi [\cos(x \sin \theta) \cos n\theta] d\theta$, e fazendo algumas considerações na expressão (1.59) temos que:

$$S_{mn}^{(1)}(t) = J_{2|m-n|}(\tau) \quad \text{onde } \tau = \Omega_D t. \quad (1.60)$$

Analogamente ao caso da expressão anterior pode-se desenvolver para $S_{mn}^{(2)}(t)$ e $S_{mn}^{(3)}(t)$ por meio das propriedades da função de Bessel obtem os seguintes valores

$$\begin{aligned} S_{mn}^{(2)}(t) &= \sum_k \mu_m(k) \mu_n^* \Omega_k^{-1} \sin \Omega_k t \\ &= \frac{2}{\Omega_D} \sum_{\nu=0}^{\infty} J_{2|m-n|+1+2\nu}(\tau), \end{aligned} \quad (1.61)$$

e

$$\begin{aligned} S_{mn}^{(3)}(t) &= \sum_k \mu_m(k) \mu_n^* \Omega_k \sin \Omega_k t = \frac{dS_{mn}^{(1)}(t)}{dt} \\ &= \frac{2}{\Omega_D} [J_{2|m-n|-1}(\tau) - J_{2|m-n|+1}(\tau)], \end{aligned} \quad (1.62)$$

reescrevendo a equação (1.54 e 1.55) por meio dessa expressão temos

$$Q_m = \sum_n Q_n(0) J_{2|m-n|}(\tau) + \sum_n P_n(0) \frac{2}{\Omega_D} \sum_{\nu=0}^{\infty} J_{2|m-n|+1+2\nu}(\tau), \quad (1.63)$$

$$P_m = \sum_n P_n(0) J_{2|m-n|}(\tau) - \sum_n Q_n(0) \frac{2}{\Omega_D} [J_{2|m-n|-1}(\tau) - J_{2|m-n|+1}(\tau)]. \quad (1.64)$$

Na seção seguintes serão discutidas as especificações das condições iniciais. Calculando a evolução temporal da energia dentro do sistema.

1.3.1 Excitação Inicial Tipo Impulso

A evolução espacial da energia exibe uma dependência da natureza da excitação inicial localizada. A condição inicial para uma excitação do tipo impulso (tipo P) com uma energia $E_m(t)$ no sítio m para um tempo inicial $t = 0$ é definido por:

$$P_m(t) = P_n \delta_{m,n}, \quad Q_m(t) = 0. \quad (1.65)$$

Analisando a equação (1.63 e 1.64) pela condição contorno da equação (1.65) resulta em:

$$Q_m(t) = P_n S_{mn}^{(2)}(t) = P_n \frac{2}{\Omega_D} \sum_{v=0}^{\infty} J_{2|m|+1+2v}(\tau);$$

$$P_m(t) = P_n S_{mn}^{(1)} = P_n J_{2|m|}(\tau). \quad (1.66)$$

Considerando que a energia cinética e potencial ($E_m^{cint.}$ e $E_m^{pot.}$) no sítio m (partindo da equação 1.66) é da seguinte forma:

$$E_m^{cint.}(t) = \frac{1}{2} P_n^2 (J_{2|m|})^2; \quad (1.67)$$

$$\begin{aligned}
E_m^{pot.}(t) &= \frac{\Omega_D^2}{16} [(Q_{m+1} - Q_m)^2 + (Q_m - Q_{m-1})^2] \\
&= \frac{1}{4} P_n^2 \left(\sum_{v=0}^{\infty} (J_{2|m+1|+1+2v}(\tau) - J_{2|m|+1+2v}(\tau)) \right)^2 \\
&\quad + \frac{1}{4} P_n^2 \left(\sum_{v=0}^{\infty} (J_{2|m|+1+2v}(\tau) - J_{2|m-1|+1+2v}(\tau)) \right)^2. \tag{1.68}
\end{aligned}$$

Fazendo uso das propriedades das funções de Bessel na energia potencial (equação (1.68)) pode ser simplificada para

$$E_m^{pot.}(t) = \frac{1}{4} P_n^2 [(J_{2|m+1}(\tau))^2 + (J_{2|m-1}(\tau))^2]; \tag{1.69}$$

onde a energia total ($E_m = E_m^{cint.} + E_m^{pot.}$) no sítio m é da seguinte forma

$$E_m(t) = \frac{1}{2} P_n^2 [(J_{2|m}(\tau))^2 + \frac{1}{2} [(J_{2|m+1}(\tau))^2 + (J_{2|m-1}(\tau))^2]]. \tag{1.70}$$

Portanto, a equação acima representa a evolução espacial e temporal da energia na natureza da excitação inicial localizada. Quando a excitação é do tipo impulso (tipo P), conforme a expressão (1.70), a energia $E_m(t)$ para o m -ésimo sítio é escrita em termo da função de Bessel [1].

1.3.2 Análise dos Momentos da Distribuição de Energia

Uma das forma de analisar o comportamento da evolução energética no espaço é por meio dos momentos. O m -ésimo momento da distribuição de energia foram estudados por Datta e Kundu [5]. O momento da distribuição de energia é definida da seguinte forma:

$$M_q(t) = \sum_{n=1}^N (n - n_0)^q [h_n(t)/H]; \quad (1.71)$$

onde a quantidade $h_n(t)/H$ determina a fração de energia concentrada no sítio n no tempo t ($h_n(t)$) e o H é a energia total do sistema. Além disso, pode ser interpretado como um pacote de energia localizada com uma probabilidade de ser encontrado no sítio n no tempo t . Em $t = 0$ a energia H é introduzida na cadeia por meio de uma perturbação, esta perturbação pode ser dada ao sistema através de um impulso (tipo P) ou por meio de um deslocamento (tipo Q). O segundo momento da distribuição espacial, $M_2(t)$, tem uma semelhança com o desvio médio quadrático de um pacote eletrônico em cristais ou materiais amorfos [5]. O comportamento da propagação de energia pode ser caracterizada pela dependência temporal do segundo momento; para uma excitação tipo P, em uma cadeia pura, foi mostrado na referência [18] que $M_2(t)$ diverge da seguinte forma

$$(M_2(\tau)/M_0)^{(P)} = \frac{1}{2} \left(\frac{\tau}{2}\right)^2; \quad (1.72)$$

o segundo momento está relacionado com a constante de difusão, D , na cadeia por meio da relação da referência [5; 20] da seguinte forma

$$D = \frac{1}{2} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{dM_2(t)}{dt}. \quad (1.73)$$

1.4 Modos Vibracionais de uma Cadeia Harmônica com Desordem

Os efeitos da desordem no sistema cristalino tem sido objeto de estudo desde o trabalho de Anderson [21] sobre a localização, em 1958. Dentro do contexto de física do estado sólido, o estudo dos modos vibracionais em cadeias harmônicas desordenadas tem sido objeto de estudo durante várias décadas [5; 22–32]. Em sólidos reais a presença de defeitos induz uma aleatoriedade nos acoplamentos entre as massas ou entre as constantes de forças.

A equação para os modos normais de vibração em cadeias harmônicas desordenadas podem ser facilmente demonstrados. Considerando uma cadeia de N átomos interagente por meio de uma força harmônica, que obedece a lei de Hook, onde a força é proporcional a distância entre os átomos. Desde que as forças de acoplamentos são lineares nos deslocamentos, sendo que a vibração do sistema é uma superposição de $(N - 1)$ modos normais, com uma frequência característica ω , como temos abaixo:

$$F = \beta_{m,n}(u_m - u_n), \quad (1.74)$$

onde $\beta_{m,n}$ é a constante elástica da força entre os sítios m e n ; u_m e u_n representam as posições de dois átomos consecutivos. Neste modelo, a desordem pode ser introduzida de duas formas: colocando uma distribuição de massas aleatórias e constantes de forças iguais ou massas iguais e constantes de forças aleatórias. As equações de movimentos para uma cadeia unidimensional de massas m_n , com $n = 1, 2, 3, \dots, N$, acopladas por forças harmônicas, considerando apenas interações entre os primeiros vizinhos, são dada por:

$$m_n \frac{d^2 u_n}{dt^2} = \beta_n (u_{n+1} - u_n) + \beta_{n-1} (u_{n-1} - u_n); \quad (1.75)$$

onde m_n é o valor da massa no n -ésimo sítio. Assumindo uma dependência temporal com uma única frequência [$u_n = u_n e^{-i\omega t}$], da equação (1.75) podemos obter uma equação estacionária para os modos vibracionais de uma cadeia harmônica:

$$(\beta_{n-1} + \beta_n - \omega^2 m_n) u_n = \beta_{n-1} u_{n-1} + \beta_n u_{n+1}. \quad (1.76)$$

Com base no formalismo da matriz de transferência unidimensional, utilizado por Matsuda e Ishii [24; 25], podemos escrever a equação (1.76) na forma matricial como:

$$\begin{bmatrix} u_{n+1} \\ u_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\beta_{n-1} + \beta_n - m_n \omega^2}{\beta_n} & -\frac{\beta_{n-1}}{\beta_n} \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_n \\ u_{n-1} \end{bmatrix}. \quad (1.77)$$

Matsuda e Ishi mostraram que os modos vibracionais da cadeia harmônica com frequência não nula ($\omega > 0$) são localizados e próximo de $\omega = 0$ existem \sqrt{N} estados estendidos, ou seja, o comprimento de localização λ dos modos diverge como $\lambda \propto 1/\omega^2$.

1.5 A Matriz de Transfêrencia em uma Dimensão e o Expoente de Lyapunov

A localização dos auto-estados de sistemas ordenados e desordenados é calculada com base no expoente de Lyapunov γ (ou inverso do comprimento de localização λ). Para isto, é necessário conhecer a matriz de transferência do sistema em estudo. Sendo assim,

podemos reescrever a equação (1.76) na forma matricial como:

$$\begin{bmatrix} u_{n+1} \\ u_n \end{bmatrix} = T_n \begin{bmatrix} u_n \\ u_{n-1} \end{bmatrix}; \quad (1.78)$$

onde T_n é a matriz de transfêrencia determinada por:

$$T_n = \begin{bmatrix} \frac{\beta_{n-1} + \beta_n - m_n w^2}{\beta_n} & -\frac{\beta_{n-1}}{\beta_n} \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (1.79)$$

Dada uma condição inicial $c(0) = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_0 \end{pmatrix}$, através do produto de todas as matrizes de transfêrencia Q_N , as amplitudes da função de onda do N -ésimo sítio são obtidas por:

$$C_N = C_0 \cdot Q_N \quad (1.80)$$

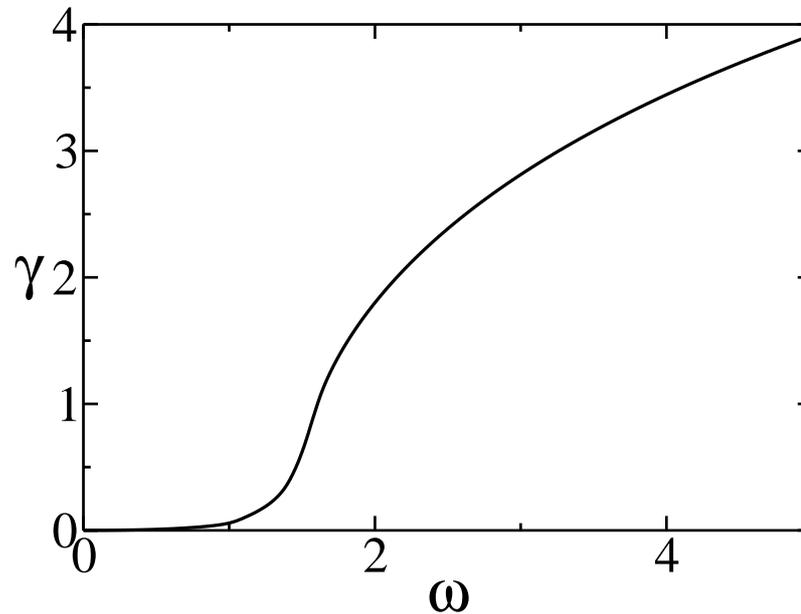
onde $Q_N = T_N T_{N-1} \dots T_1$. Sendo assim, o grau de localização de cada modo vibracional é obtido pelo inverso do comprimento de localização λ ou expoente de Lyapunov γ [26; 29], dado por:

$$\gamma = \lambda^{-1} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \log \frac{|Q_N c(0)|}{|c(0)|}; \quad (1.81)$$

A expressão acima para o expoente de Lyapunov também pode assumir todos os auto-valores para o produto de matrizes aleatórias não correlacionadas.

Na figura 1.6 plotamos o gráfico do expoente de Lyapunov γ em função da frequência

Figura 1.6: O expoente Lyapunov γ (ou inverso do comprimento de localização λ) em função da frequência w . Para uma cadeia harmônica com constantes de forças aleatória uniformemente distribuídas no intervalo $[1,3]$ e massas iguais, para uma cadeia com $N = 10^5$.



Fonte:(Autor, 2011)

w obtido pelo método da matriz de transferência para uma cadeia unidimensional. Este resultado para uma cadeia harmônica com constantes de forças aleatória uniformemente distribuídas no intervalo $[1,3]$ e massas iguais, ou seja, $m_n = 1$. O expoente de Lyapunov é pequeno na região de baixa frequência ($w \rightarrow 0$) e é finito para a região de auto frequência.

1.6 Modos Vibracionais de uma Cadeia Harmônica em Potencial Aperiódico

Estabelecidas em 1933 por Horald Bohr [33], as bases matemáticas de ordem aperiódica há muito tempo vêm sendo estudadas e devido às suas propriedades quasi-periódicas, que ocorrem pela falta de simetria translacional, foram inseridas naturalmente nos domínios

da investigação aplicada. Atualmente, na literatura científica, existem diversas investigações teóricas baseadas em sistemas quasi-periódicos unidimensionais, pois eles podem ser descritos por modelos simples que apontam propriedades relevantes destes sistemas, como eletrônicas e vibracionais [34].

Quando as estruturas aperiódicas e a desordem estão relacionadas, a localização dos modos vibracionais em uma cadeia unidimensional pode ser descrita pelo modelo de Anderson [21]. Anderson estudou a possibilidade de localização eletrônica em um semicondutor, a partir de um grau de desordem em uma rede unidimensional. Outros estudos das propriedades de localização eletrônica em uma dimensão foram utilizados no modelo tight-binding com potencial pseudo-aleatório [35; 36]. Neste modelo, foram considerados o potencial de um sítio $V_n = \lambda \cos(\pi\alpha|n|^\nu)$ com α sendo um número irracional, cuja fase da modulação segue uma lei de potência em n . Nesse trabalho foram feitos cálculos numéricos, e usando método perturbativo para $\lambda \ll 1$ encontraram o comprimento de localização para valores diferentes de ν .

No presente trabalho analisaremos os efeitos de aperiodicidade na localização dos estados, através de uma sequência de constantes elástica aperiódicas, onde vamos considerar β_n usando uma função senoidal cuja fase varia como uma lei de potência, $\phi \propto n^\nu$, onde n é a posição do átomo ao longo da cadeia.

1.7 Termo Não Linear: Sóliton

Diversos fenômenos físicos podem ser descritos por equações não lineares. Dentre esses fenômenos podemos citar como exemplo: sólitons óticos em conjuntos de guias de onda [37], dinâmica de biopolímeros [38] e dinâmica não linear do DNA [39]. Vários estudos sobre sistemas não lineares foram feitos também no contexto da mecânica quântica, como nos condensados de Bose-Einstein [40], na física de supercondutores de alta temperatura

crítica [41] e em super-redes semicondutoras [42]. Deste modo, a grande diversidade de sistemas que apresentam comportamento não linear torna interessante o estudo deste fenômeno. Por sua vez, uma das manifestações interessantes de efeitos não-lineares (ou anarmônicos) em vibrações de cadeias harmônicas longas é a existência de sólitons.

A descoberta do sóliton, também conhecido como onda solitária, é atribuída a John Scott Russel [43; 44]. Em 1834 John Scott Russel observando o movimento de um barco que estava sendo rapidamente puxado por dois cavalos, ao longo de um estreito canal, verificou que quando o mesmo foi subitamente freado, surgiu uma grande onda solitária com uma forma bem definida. Seguindo a onda formada, ele observou que a mesma continuou seu curso ao longo do canal sem mudar a sua forma e sem diminuir sua velocidade por um longo trecho. Depois desta observação, Russel realizou várias experiências em laboratório. Analisando colisões entre duas ondas solitárias, ele verificou que elas mantinham suas características. As ondas solitárias foram consideradas como uma curiosidade até 1960, quando os cientistas começaram a utilizar os computadores para estudar a propagação de ondas em meio não-linear.

As descobertas de soluções matemáticas começaram com a análise de equações diferenciais parciais não-lineares. Korteweg e de Vries [45; 46], em 1895 derivaram a equação de onda que estabeleceu a base matemática para o estudo de vários fenômenos de ondas solitárias. Tal equação tem a seguinte forma:

$$u_t + 6uu_x + u_{xxx} = 0, \quad (1.82)$$

onde os subscritos t e x representam as diferenciações parciais em relação às variáveis t e x , respectivamente. Esta equação é conhecida como a equação não-linear KdV, a qual é integrável e sua evolução temporal não é linear [47].

Os primeiros a desempenharem um papel importante na história da simulação com-

putacional foram Fermi-Pasta-Ulam (FPU). Eles procuram analisar os processos de termalização de um sólido [4]. Este trabalho, publicado em um classificado do relatório do Los Alamos National Laboratory no ano de 1955, foi concluído pouco antes da morte de Enrico Fermi, em 1954 [48]. Através da simulação de uma cadeia de partículas de massa unitária, ligadas por um potencial de interação quadrática, além de uma uma interação fraca não linear, Fermi, Pasta e Ulam decidiram estudar como ocorre a evolução para o equilíbrio térmico de um cristal.

No modelo utilizado por FPU, foi considerada uma cadeia unidimensional, fixa nas extremidades, de 64 massas idênticas com forças agindo entre os vizinhos mais próximos, sendo que o Hamiltoniano do sistema é descrito por:

$$H = \sum_{i=0}^N \left[\frac{1}{2} p_i^2 + \frac{1}{2} (x_{i+1} - x_i)^2 + \frac{\alpha}{3} (x_{i+1} - x_i)^3 \right]; \quad (1.83)$$

onde x_i é o deslocamento do i -ésimo ponto da posição de equilíbrio e p_i é o momento. O último termo é gerado pela contribuição não linear para o potencial e leva ao acoplamento entre os modos.

A partir das equações de Hamilton são obtidas as seguintes equações de movimento:

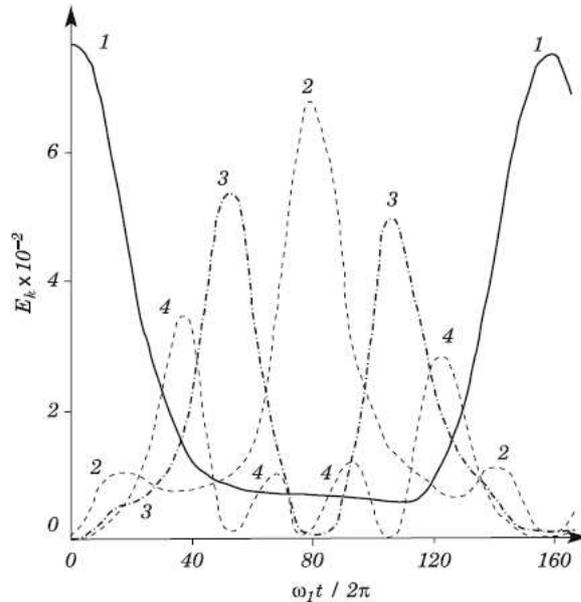
$$\ddot{x}_i = (x_{i+1} + x_{i-1} - 2x_i) + \alpha[(x_{i+1} - x_i)^2 - (x_i - x_{i-1})^2] \quad (i = 1, 2, \dots, 64); \quad (1.84)$$

ou

$$\ddot{x}_i = (x_{i+1} + x_{i-1} - 2x_i) + \beta[(x_{i+1} - x_i)^3 - (x_i - x_{i-1})^3] \quad (i = 1, 2, \dots, 64); \quad (1.85)$$

onde α (coeficiente do termo quadrático) e β (coeficiente do termo cúbico) são escolhidos

Figura 1.7: A figura mostra a evolução temporal da quantidade de energia cinética e potencial em cada um dos quatros primeiros modos.



Fonte:(Neweel, 1985)

de modo que o deslocamento máximo do termo não linear seja pequeno.

A figura (1.7) mostra o comportamento da energia em vários modos em função do tempo (entre os 4 primeiros modos). Considerando um termo não-linear na energia potencial, FPU esperavam que a energia introduzida em um único modo fosse lentamente distribuída para os outros modos, até que fosse atingida a equipartição de energia. No entanto, após um período de recorrência, em que os 3 primeiros modos menores trocam energia entre si de forma regular, o estado inicial foi praticamente recuperado, onde quase toda a energia (a menos de 3 por cento) estava de volta para o modo de menor frequência, o que caracterizava um sistema quase periódico.

A solução para a recorrência de FPU, em termos da dinâmica dos sólitons, foi encontrada por Zabusky e Kruskal [46], os quais utilizaram o então chamado *limite contínuo*. Utilizando a equação do movimento de FPU (1.84), derivada do Hamiltoniano (1.83), e

considerando os modos com grandes comprimentos de onda obtiveram a equação KdV (1.82) com derivadas espaciais e temporais apropriadamente escalonadas. Deste modo, chegaram à conclusão de que em um sistema com uma força quadrática e uma onda senoidal como a posição inicial da cadeia, o estado senoidal inicial desenvolve frentes acentuadas e depois se divide em uma série de pulsos, os quais são os sólitons. Do mesmo modo que a recorrência de FPU é observada, esses pulsos preservam suas formas e velocidades durante o movimento em um sistema finito com condições de contorno periódicas, e em determinados intervalos eles voltam às posições que possuíam antes, restaurando assim a condição inicial.

Podemos enfatizar que a descoberta resultante destes estudos não apenas deram origem ao conceito de sólitons, como também introduziu o conceito de *experimento numérico* e conseqüentemente o uso da simulação computacional na investigação de fenômenos físicos.

Outro método utilizado para a resolução de equações não lineares foi desenvolvido em 1967 por Morihazu Toda [49], quem introduziu uma função exponencial como uma solução analítica para as equações de movimento de uma rede unidimensional.

A partir da obtenção das soluções das equações diferenciais parciais não-lineares, concluiu-se que sóliton é causado pelo cancelamento dos efeitos não-lineares e dispersivos no meio, o qual passou a ser definido como uma onda de forma permanente e localizada, a qual pode interagir fortemente com outros sólitons e manter a sua forma. Em outras palavras, um sóliton é um pacote de onda (um pulso), que mantém sua forma enquanto a sua velocidade é mantida constante [50].

Capítulo 2

Aspectos da Dinâmica Vibracional

2.1 Introdução

O estudo de vibrações atômicas são de importância fundamental para a análise de propriedades termodinâmicas, elásticas, ópticas e elétricas de sólidos cristalinos. Nos últimos anos apareceram várias aplicações de técnicas novas, tanto teóricas quanto experimentais, ao estudo da dinâmica de redes atômicas.

O fenômeno da localização é uma transição de fase de segunda ordem entre os auto-estados que são espacialmente localizados e os que são deslocalizados ou estendidos [51]. Para o problema vibracional de uma cadeia harmônica, devido à invariância translacional, os auto-estados são estado simples de Bloch [52], sendo portanto estendidos. Contudo, grande parte dos sólidos não possuem invariância translacional, podendo ser descritos por sequências quasi-periódicas. Por conseguinte, neste capítulo, analisaremos os efeitos da aperiodicidade em uma cadeia harmônica unidimensional, através da análise da competição entre a ausência de periodicidade e a presença de potenciais não harmônicos.

Os cálculos apresentados nas seções subsequentes foram feitos utilizando o formalismo da matriz de transferência, diagonalização exata e a solução numérica da equação de

movimento de Hamilton. Também, foram realizados os cálculos do expoente de Lyapunov ($\gamma = 1/\lambda$) e o número de participação $\xi(w)$ dos autovetores na faixa de frequências permitidas.

2.2 Cadeia Harmônica com Potencial Aperiódico

Dentre os diversos modelos que representam sistemas desordenados, consideramos o modelo no qual o efeito de desordem é introduzido através de um potencial aperiódico. Considerando uma cadeia harmônica unidimensional com N massas, o Hamiltoniano clássico pode ser escrito como:

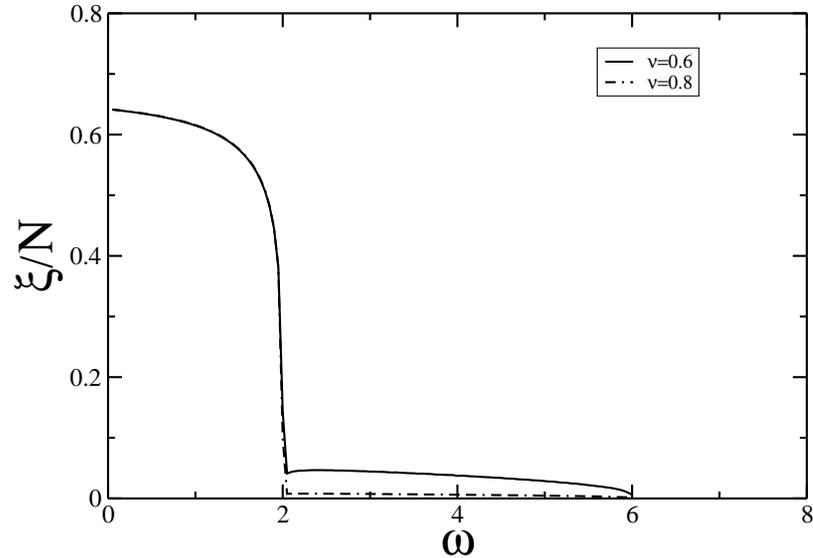
$$H = \sum_{n=1}^N h_n(t), \quad (2.1)$$

onde a energia $h_n(t)$ é a porção de energia total sobre a massa m_n do sítio n . A energia $h_n(t)$ é a energia potencial das molas que estão acopladas na massa m_n mais a energia cinética desta massa. Deste modo, $h_n(t)$ é dada por:

$$h_n(t) = \frac{p_n^2}{2m_n} + \frac{1}{4}[\beta_n(q_{n+1} - q_n)^2 + \beta_{n-1}(q_n - q_{n-1})^2]. \quad (2.2)$$

Temos que p_n e q_n são definidos respectivamente como o momento e o deslocamento da massa no n -ésimo sítio, assim como todas as massas são idênticas e unitárias, isto é, $m_n = 1$. Neste caso, a constante de força elástica β_n é uma função senoidal cuja fase varia como a lei de potência, $\varphi \propto n^\nu$, de modo que seguindo uma lei determinística é dada da seguinte forma:

Figura 2.1: A razão participação rescalada pelo tamanho da cadeia (ξ/N) versus w para $\nu < 1$ e para uma cadeia com $N = 10^4$.

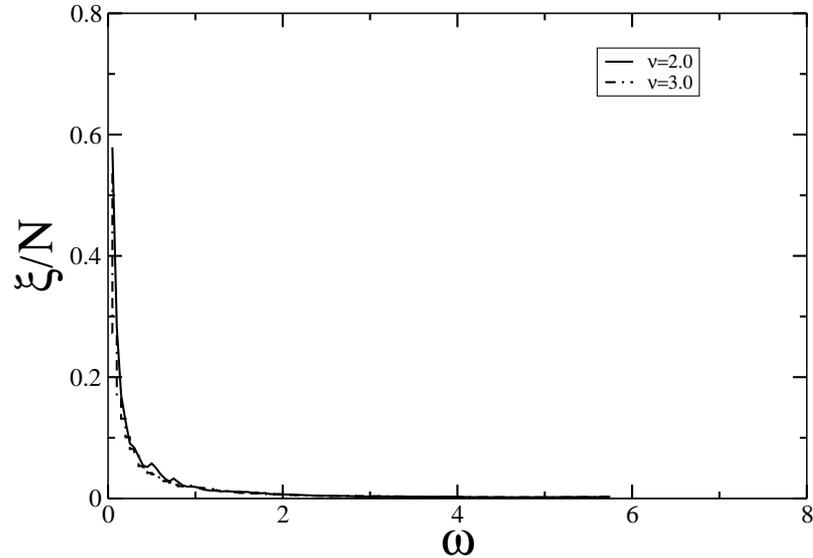


Fonte:(Autor, 2011)

$$\beta_n = \beta_0 + \lambda \cos(\alpha n^v), \quad (2.3)$$

onde α é um número arbitrário racional, λ e v são parâmetros ajustáveis e n as posições ao longo da cadeia. Em nosso cálculo vamos considerar $\beta_0 = 2$, $\lambda = 1$ e $\alpha = 0.1$, sendo que $\beta_0 > \lambda$ para evitar valores negativos e nulos na distribuição das constantes elástica do meio. Em um estudo semelhante, realizado em cadeias harmônicas unidimensionais [53], onde o efeito da aperiodicidade foi abordado considerando uma distribuição de massa aperiódica e pseudoaleatória como uma função senoidal, analisando os auto-estados dos modos vibracionais, observou-se que devido ao efeito da aperiodicidade na distribuição de massa, para baixas frequências podem existir estados estendidos para os modos vibracionais. A medida de localização da função de onda em um meio aleatório

Figura 2.2: A razão participação rescalada pelo tamanho da cadeia (ξ/N) versus w para $\nu > 1$, para uma cadeia com $N = 10^4$.



Fonte:(Autor, 2011)

pode ser fisicamente caracterizada por diversos parâmetros [54]. A natureza dos modos vibracionais pode ser investigada por meio do cálculo da função razão participação, ξ . As figuras (2.1,2.2) mostram a razão participação rescalada ξ/N versus ω , com uma distribuição da constante de força elástica aperiódica. Desta forma, a razão participação é determinada por [54; 55]:

$$\xi(\omega) = \frac{\sum_{n=1}^N |u_n|^2}{\sum_{n=1}^N |u_n|^4}. \quad (2.4)$$

onde os deslocamentos u_n são aqueles associados as autofrequências w de uma cadeia de N massas, obtidos pelo formalismo numérico de diagonalização direta $N \times N$ da matriz secular A definida por $A_{n,n} = (\beta_n + \beta_{n-1})$, $A_{n,n+1} = A_{n+1,n} = \beta_n$ e todos os outros $A_{n,m} = 0$ [53; 56; 57].

Para compreender o grau de localização da função participação, vamos considerar uma cadeia pura onde todos os autoestados são estendidos com u_n constantes. Sendo que o numerador da equação (2.4) é igual a 1 para manter a normalização dos autoestados, ou seja, $|u_n| = \frac{1}{\sqrt{N}}$. Substituindo na expressão da participação obtém-se

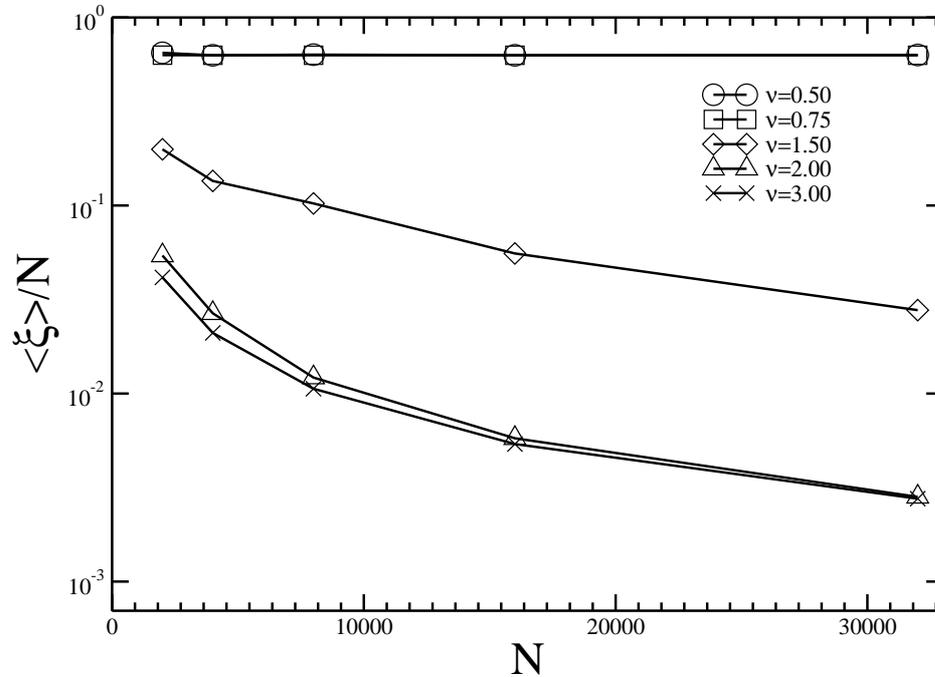
$$\xi(\omega) = \frac{1}{\sum_{n=1}^N \frac{1}{N^2}} = N. \quad (2.5)$$

A função razão participação ξ representa o número de massas que participam de um modo vibracional de frequência ω . Sendo que as amplitudes u_n da função de onda são diferentes de zero. Desta forma, calculamos a taxa de participação média definida por $\langle \xi \rangle = \frac{1}{N_f} \sum_{w=0.5}^{w=1.5} \xi(w)$, onde N_f é o número de modos acústicos no intervalo $[0.5, 1.5]$, representado na figura (2.3). No entanto, $\langle \xi \rangle / N$ não depende de N para os modos estendidos e vai até zero para os modos localizados.

Na figura (2.1,2.2) são mostrados os dados relativos da função participação escalada para $\nu < 1$, $\nu > 1$ e $N = 1 \times 10^4$. Os dados na baixa frequência confirmam o caráter estendido para os modos vibracionais. No caso em que $\nu > 1$ (fig. 2.2), apenas para $w = 0$ o número da participação escalada é proporcional ao tamanho do sistema. Na frequência crítica $w_c = 2$ observa-se a transição dos modos vibracionais estendidos para os localizados, independentemente do expoente ν . Na figura (2.3), analisando a escala média de participação $\langle \xi \rangle / N$ versus o número de massas N para $\nu = 0.5$ até $\nu = 3.0$, pode ser notado que para os cálculos numéricos com $\nu < 1.0$ obtemos os estados estendidos e com $\nu > 1.0$ os estados localizados.

Outra medida utilizada para determinar a localização dos auto-estados é dada pelo comprimento de localização λ , o qual descreve o comportamento assintótico da função de onda [54]. Deste modo, para grandes distâncias a função de onda apresenta um decaimento exponencial dado por:

Figura 2.3: A participação média rescalada $\langle \xi \rangle / N$ versus o número de massas N , para ν variando de $[0.5, 3.0]$, para uma cadeia com $N = 10^4$. Como pode ser notado, obtivemos estados estendidos para $\nu < 1.0$ e estados localizados para $\nu > 1$.



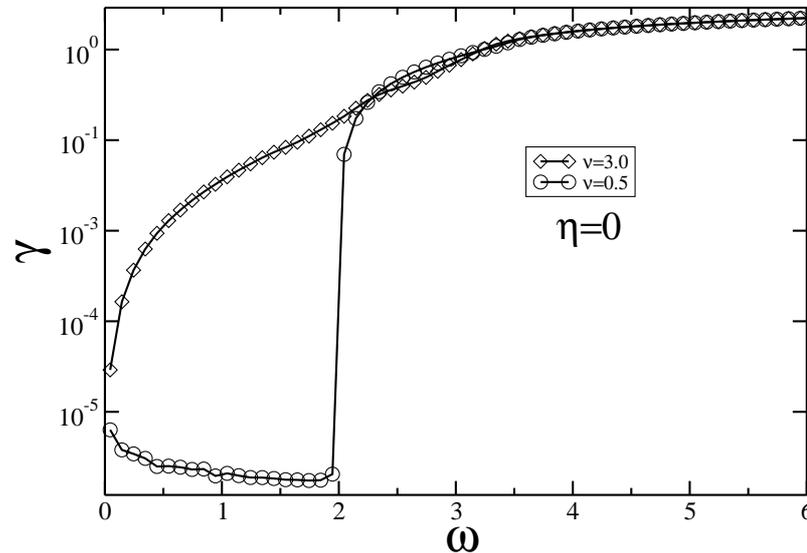
Fonte:(Autor, 2011)

$$\psi_i(r) = f(r) \exp(-r/\lambda); \quad (2.6)$$

onde $f(r)$ é uma função que varia aleatoriamente. No caso dos estados estendidos, $\lambda \rightarrow \infty$. Existem vários métodos para calcular λ , dentre os quais temos o grupo de renormalização e a matriz de transferência. No entanto, esta quantidade não é muito usual na prática, visto que sua aplicação requer o cálculo de auto-estados únicos.

Os expoentes de Lyapunov (ou inverso do comprimento de localização λ) dos autovetores foram calculados usando a técnica de matriz transferência para uma cadeia

Figura 2.4: O expoente Lyapunov γ em função da frequência w para $\nu = 0.5$ e 3.0 , para uma cadeia com $N = 10^4$. Para $\nu = 3.0$ o expoente Lyapunov desaparece na região de baixa frequência ($w \rightarrow 0$). Para $\nu = 0.5$, o expoente de Lyapunov é aproximadamente $1/N$, com $w < w_c \approx 2$.



Fonte:(Autor, 2011)

unidimensional. Contudo, os autovetores e auto frequências foram obtidos por diagonalização direta $N \times N$ da matriz secular A com N até 32000. Na figura (2.4) plotamos o gráfico do expoente de Lyapunov γ em função da frequência w para $\nu = 0.5$, $\nu = 3.0$ e $\eta = 0$. Para $\nu = 3.0$, o expoente de Lyapunov desaparece perto da região de baixa frequência ($w \rightarrow 0$) e é finito para a região de auto frequência em sistemas harmônicos não periódicos de baixa dimensionalidade. Para $\nu = 0.5$, o expoente de Lyapunov é aproximadamente $1/N$ para $w < w_c \approx 2$. Além disso, os cálculos indicam que na ausência do termo anarmônico esta rede aperiódica pode apresentar modos de vibrações estendidos.

2.3 Dinâmica Energética no Limite Harmônico

Considerando uma cadeia harmônica unidimensional de N massa, no qual podemos escrever o Hamiltoniano clássico como $H = \sum_{n=1}^N h_n(t)$ (equação (2.2)), onde as equações de movimento para p_n e q_n podem ser obtidas a partir das equações de Hamilton (onde todas as massas são idênticas, isto é $m_n = 1$) determinada abaixo:

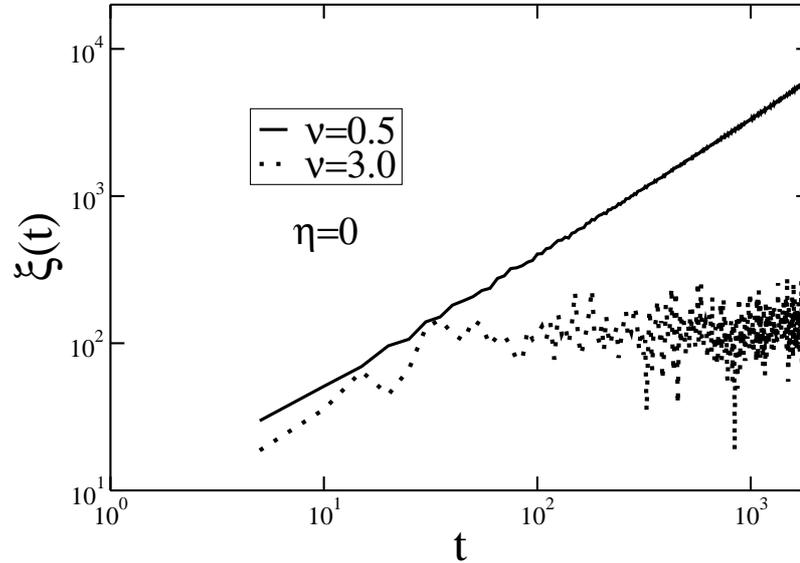
$$\begin{aligned}\dot{p}_n(t) &= -\frac{\partial H}{\partial q_n} = \beta_n(q_{n+1} - q_n) - \beta_{n-1}(q_n - q_{n-1}); \\ \dot{q}_n(t) &= \frac{\partial H}{\partial p_n} = p_n(t).\end{aligned}\tag{2.7}$$

Considerando uma excitação inicial no sítio n_0 em $t = 0$, resolvemos as equações diferenciais de Hamilton por meio do método de Runge-Kutta de quarta ordem com passo de tempo $dt \approx 10^{-3}$, para encontrar $p_n(t)$ e $q_n(t)$. Numa cadeia harmônica para um impulso inicial de excitação a energia se espalha mais rápido do que para o deslocamento inicial de excitação, de tal forma que o comportamento depende das condições iniciais [1; 5; 53]. Nesse contexto fizemos uso de métodos numéricos computacionais para calcular a fração de energia $f_n = h_n(t)/H$ no sítio n . Ao considerar um pacote de energia uniforme se propagando em uma cadeia harmônica pura com N massas, temos que $f_n \approx 1/N$. Portanto, podemos definir a quantidade de tempo da seguinte forma:

$$\xi(t) = \frac{1}{\sum_n^N f_n^2}.\tag{2.8}$$

Para um pacote de energia uniforme se propagando neste modelo temos que $\sum_{n=1}^N f_n^2 = (1/N^2) \sum_n^N (1) = (1/N)$, ou seja, numa cadeia harmônica com N massas, $\xi \propto N$. Portanto, concluímos que $\xi(t) \propto t$ para o transporte de energia em uma cadeia harmônica periódica [53; 56]. A função de medidas $\xi(t)$ é o número de massas que participam do transporte de energia, ou seja, esta função é semelhante a número de participação de elétrons [57]. Consequentemente, calculamos a transformada de Fourier do deslocamento

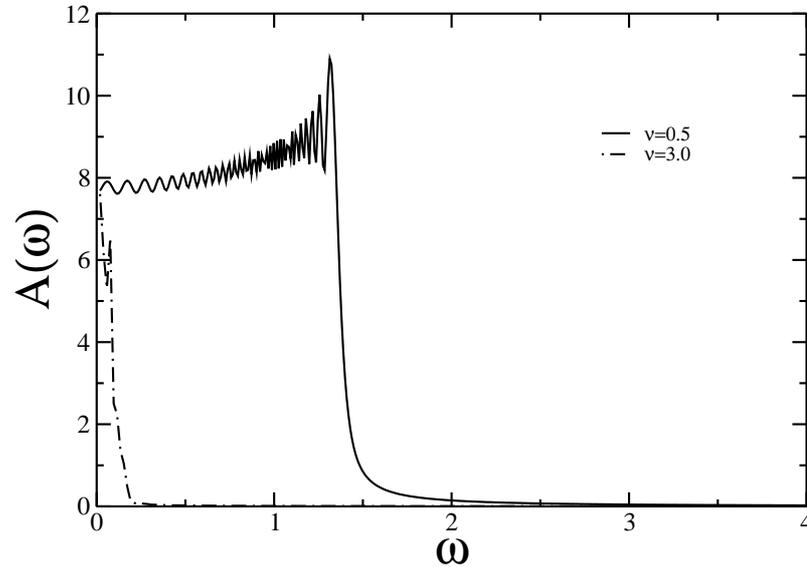
Figura 2.5: A função participação $\xi(t)$ versus o tempo em uma rede harmônica aperiódica com $\nu = 0.5$ (linha sólida) e $\nu = 3.0$ (pontilhada), para uma cadeia com $N = 10^4$. Para ν menor que 1 há uma propagação de energia balística $\xi(t) \propto t^2$. Para $\nu > 1$ existe um transporte de energia localizada.



Fonte:(Autor, 2011)

da massa na posição nf ($A(w) = q_{nf}(w)$), onde definimos no nosso cálculo $nf \approx 0.9N$. Do mesmo modo, podemos obter a fração de energia do movimento da massa nf ($f_{nf}(w)$ ou $p_{nf}(w)$). Na figura (2.5) plotamos o gráfico em relação da função participação $\xi(t)$ em função do tempo de uma rede harmônica aperiódica com $\nu = 0.5$ (linha sólida) e $\nu = 3.0$ (pontilhada). Determinamos a excitação inicial do tipo impulso (tipo P) no sistema para $p_n = \delta_{n,n_0}$ com $n_0 = N/2$ no meio da cadeia e $q_n = 0$. Para ν menor que 1, a função participação é diretamente proporcional a t (onde é observada uma propagação balística da energia) e o segundo momento $M_2 \sim t^2$. No entanto, quando o grau de aperiodicidade é superior a 1, $\nu > 1$, existe uma localização transporte de energia. Na figura (2.6) coletamos os dados da intensidade espectral dos deslocamentos das massas na posição $nf = 0.9N$ ($A(w) = q_{nf}(w)$) em função da frequência w para $\nu = 0.5$, $\nu = 3.0$ e $\eta = 0$,

Figura 2.6: A intensidade espectral do deslocamento das nf massas $f(A(w) = q_{nf}(w))$ em função da frequência w para $\nu = 0.5$, $\nu = 3.0$ e $\eta = 0$, para uma cadeia com $N = 10^4$. Onde definimos no nosso cálculo $nf = 0.9N$.



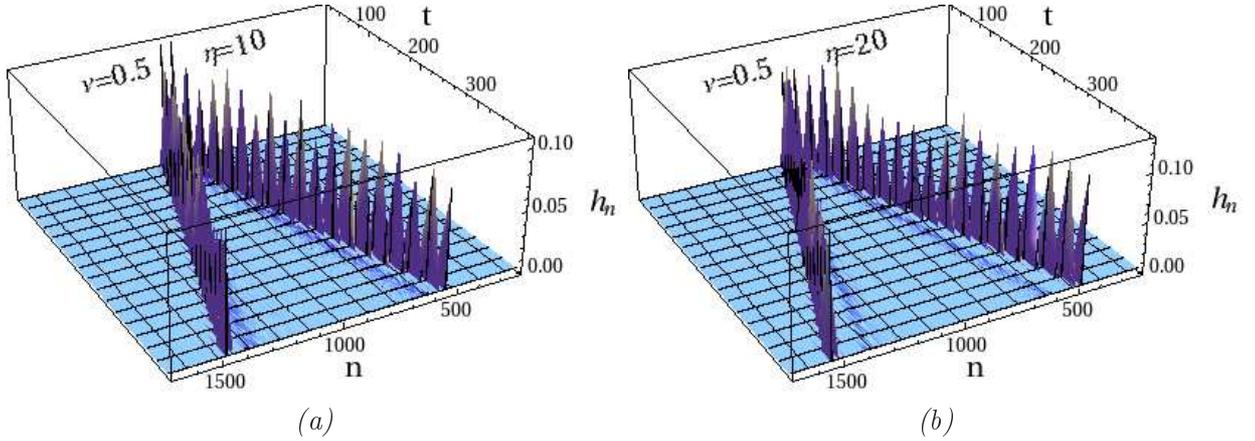
Fonte:(Autor, 2011)

para uma cadeia com $N = 10^4$. Para $\nu = 0.5$ todos os modos de vibração com $w > w_c$ existe um decaimento, e o meio se comporta como um filtro para transmitir os modos de baixa frequência $w_c \approx 2$. Para $\nu = 3.0$, apenas os modos próximos à região de baixa frequência ($w \rightarrow 0$) se propagam ao longo da cadeia, demonstrando assim, que estão de acordo com o caráter pseudo aleatório da cadeia.

2.4 Limite Anarmônico

A partir da distribuição da energia de excitação nos modos vibracionais em uma rede anarmônica aperiódica, é possível encontrar pontos com localização de Anderson e soluções do tipo sóliton. Considerando que a existência de sólitons é decorrente de

Figura 2.7: $h_n(t)$ versus a t e n para uma cadeia aperiódica anarmônica com $\mu = 0.5$ e $\eta = 10$ e 20 , para uma cadeia com $N = 10^3$. A excitação inicial foi $P_m = \delta_{n,n_0}$ com $n_0 = N/2$ e $Q_m = 0$. Nossos resultados mostraram que a excitação inicial é dividida em dois sólitons estáveis que se propagam ao longo da cadeia.



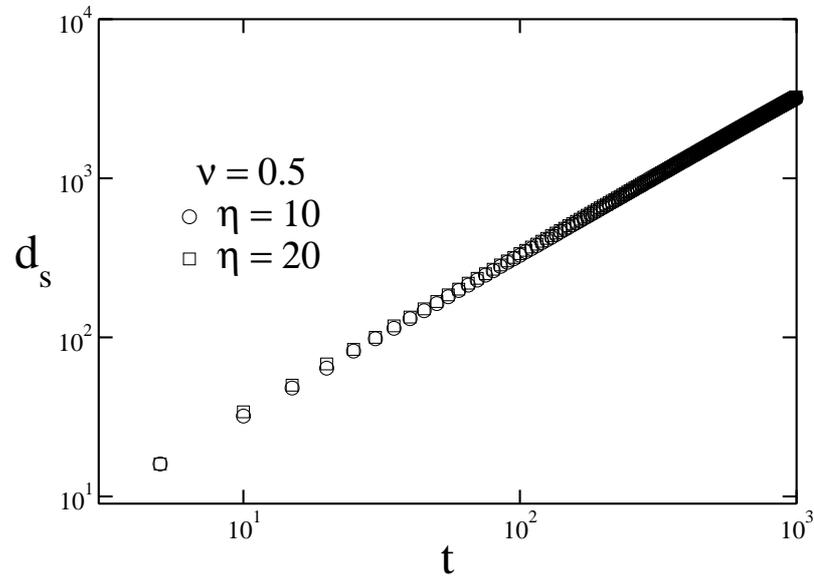
Fonte: (Autor, 2011)

fenômenos não-lineares, para uma cadeia unidimensional de N massas, podemos escrever o Hamiltoniano clássico $H = \sum_{n=1}^N h_n(t)$ acoplado com o termo anarmônico, onde a energia $h_n(t)$ de massa no site (n) agora é determinada da seguinte forma:

$$h_n(t) = \frac{p_n^2}{2m_n} + \frac{1}{4}[\beta_n(q_{n+1} - q_n)^2 + \beta_{n-1}(q_n - q_{n-1})^2] + \frac{\eta}{8}[(q_{n+1} - q_n)^4 + (q_n - q_{n-1})^4]. \quad (2.9)$$

O termo p_n representa o momento e o q_n é o deslocamento do átomo n ao longo da cadeia com relação a sua posição de equilíbrio e o η é o termo anarmônico. A figura 2.7 mostra a evolução espacial e temporal da energia $h_n(t)$ numa cadeia anarmônica aperiódica após uma excitação inicial do tipo “P”. Foi considerado $\nu = 0.5$ e $\eta = 10$ e 20 usando inicialmente uma excitação inicial no sitio $n_0 = N/2$. Desta maneira, podemos observar que há uma divisão da excitação inicial em dois modos do tipo sóliton que

Figura 2.8: O comportamento da distância d_s entre os sólitons, onde exibe uma dinâmica balística, $d_s \propto t$, numa cadeia aperiódico anarmônico feito para a mesma cadeia da figura 2.7, para uma cadeia com $N = 10^3$.

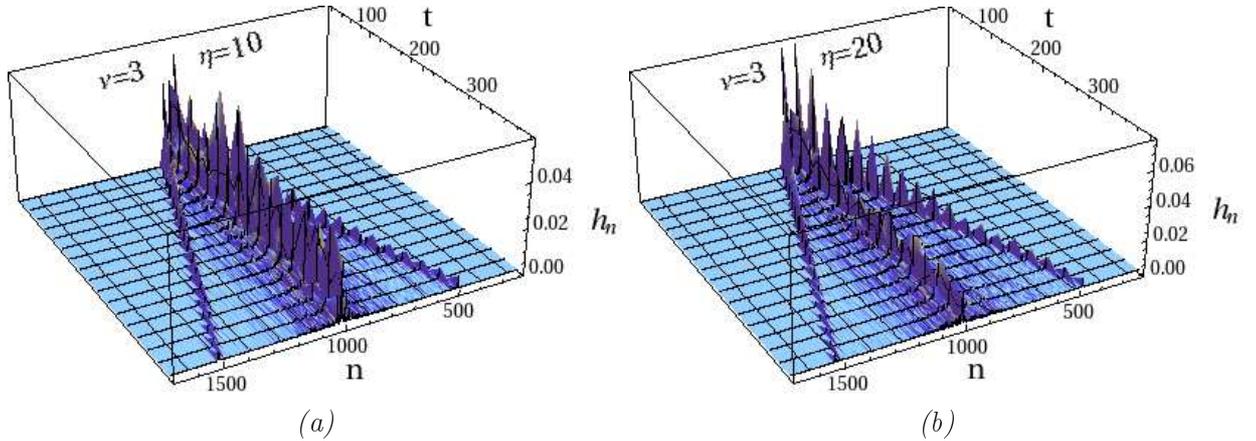


Fonte:(Autor, 2011)

se propagam ao longo da cadeia. De acordo com os resultados obtidos, a dinâmica de energia encontrada para essa cadeia aperiódica aponta para a existência de soluções de sólitons estáveis. Além disso, calculamos numericamente a distância d_s entre os sólitons (figura 2.8). Os cálculos foram feitos para a mesma cadeia da figura 2.7. No entanto, os resultados indicam que os sólitons exibem uma dinâmica balística com $d_s \propto t$ para $\nu = 0.5$ e $\eta = 10$ e 20.

A distribuição de energia na parte localizada pode ser definida por meio da excitação inicial sobre os modos localizados na origem. Uma cadeia harmônica desordenada com potencial pseudo-aleatório e termo anarmônico, pode ser verificado na figura 2.9, onde foi calculado o valor da energia H no sítio $n(h_n(t))$ para uma cadeia pseudo-aleatória anarmônica com $\nu = 3.0$ e $\eta = 10$ e 20. A excitação inicial foi do tipo P com $n_0 = N/2$ no meio da cadeia. Sendo assim, é evidente na figura 2.9 que após a excitação, em

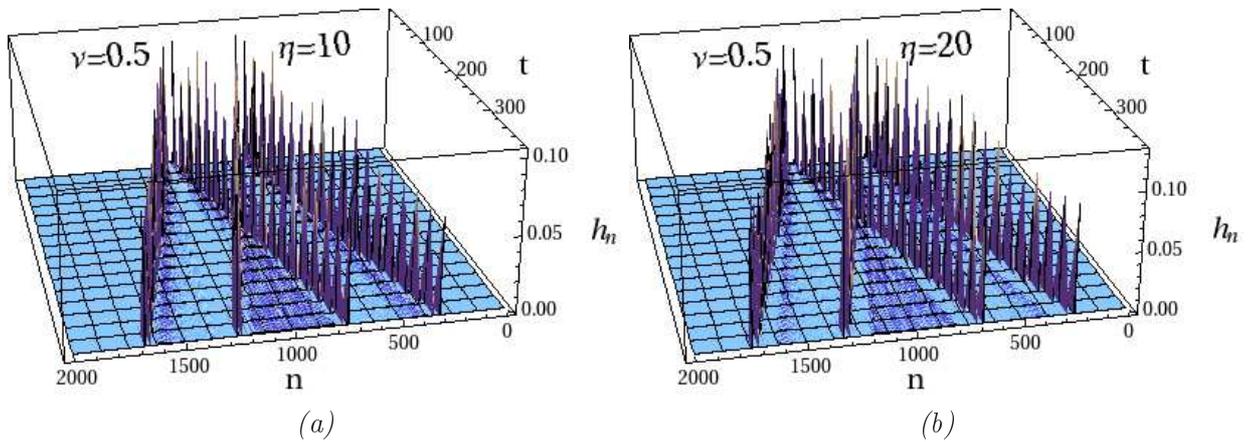
Figura 2.9: $h_n(t)$ versus a t e n para uma cadeia pseudo-aleatória anarmônica com $\nu = 3.0$ e $\eta = 10$ e 20 , para uma cadeia com $N = 10^3$. A excitação inicial foi do tipo P com $n_0 = N/2$. Nessa figura observa-se tanto a localização de Anderson, como a solução do tipo sóliton (para tempos curtos).



Fonte:(Autor, 2011)

um pequeno período de tempo, a densidade de energia é dividida em dois sólitons de tempo curto e uma fração finita do pulso de energia inicial permanece presa no sítio inicial, $n_0 = N/2$. Observamos que os modos de sóliton, que são exibidos para os tempos iniciais não são estáveis e desaparecem no tempo. O termo de anarmonicidade reduz a intensidade de energia presa no local inicial (fig.2.9 b). Estes resultados para $\nu > 1$ estão de acordo com os obtidos para a cadeia anarmônica desordenada da ref. [1]. Nossos resultados indicam que sistemas aperiódico não lineares podem apresentar comportamento físico qualitativo de sistemas puros e também desordenados dependendo do grau de aperiodicidade (controlado neste modelo pelo expoente ν). A estabilidade dos sólitons obtidos para o caso $\nu < 1$ foi estudada através da monitoração da quantidade de energia contida dentro do sóliton e também das propriedades de colisão dos mesmos. Na figura 2.10 plotamos $h_n(t)$ versus a t e n para uma cadeia aperiódica anarmônica com $\mu = 0.5$ e $\eta = 10$ e 20 . Neste experimento numérico a energia inicial foi introduzida

Figura 2.10: $h_n(t)$ versus a t e n para uma cadeia aperiódica anarmônica com $\mu = 0.5$ e $\eta = 10$ e 20 , para uma cadeia com $N = 10^3$. A energia inicial foi introduzida no sistema através de duas excitações tipo impulso : $P_{N/4} = 1$ e $P_{3N/4} = 1$. Desta forma podemos visualizar a colisão dos sólitons formados em torno de $N/4$ e $3N/4$. A colisão não modifica a estrutura da onda solitônica.



Fonte:(Autor, 2011)

no sistema através de duas excitações tipo impulso : $P_{N/4} = 1$ e $P_{3N/4} = 1$. Deste forma observamos a formação de sólitons em torno das posições $N/4$ e $3N/4$. A colisão dos sólitons em torno da posição central da cadeia não modifica a estrutura da onda solitônica.

Capítulo 3

Conclusão

No presente trabalho foram estudados os modos vibracionais em cadeias harmônicas e anarmônicas aperiódicas. Utilizando métodos numéricos na solução das equações de Hamilton, o formalismo da matriz de transferência e a diagonalização exata, foi calculada a função de participação e o expoente de Lyapunov ou inverso do comprimento de localização. Esses métodos possibilitaram estudar sistemas não periódicos com potenciais aperiódicos e anarmônicos. Os efeitos da aperiodicidade numa cadeia harmônica unidimensional foram introduzidos por meio de uma função senoidal cuja fase varia como uma lei de potência, $\varphi \propto n^\nu$. O que possibilitou simular as distribuições das constantes elásticas aperiódicas e pseudo-aleatórias. Contudo, foi analisada a razão participação rescalada ξ/N versus a frequência w , com uma distribuição de constante elástica aperiódica para $\nu < 1$ e $\nu > 1$. Sendo assim, para baixas frequência obtivemos os modos vibracionais estendidos. Observou-se também, que transição dos modos vibracionais estendidos para os localizados ocorreram para a frequência crítica $w_c = 2$. No entanto, a média da razão participação $\langle \xi \rangle / N$ não depende de N para os modos estendidos e vai até a zero para os modos localizados.

Em outra parte do estudo foram analisados a influência da excitação em uma cadeia

harmônica unidimensional, assim como as propriedades de localização dos modos. Neste contexto foram produzidos cálculos numéricos da evolução temporal das soluções da equação de movimento de Hamilton, onde verificou-se a localização dos modos vibracionais em uma cadeia unidimensional aperiódica. Deste modo, por meio de métodos numéricos de Runge-Kutta foi calculada a propagação de energia em uma cadeia unidimensional infinita. Sendo assim, foi realizada uma excitação inicial, na forma de um impulso tipo P no meio da cadeia, com $n_0 = N/2$. Nosso modelo apresenta um transporte balístico no regime $\nu < 1$, o qual está associado com a fase de modos vibracionais. Portanto a função participação é diretamente proporcional a t , $\xi(t) \propto t$, e o segundo momento $M_2 \sim t^2$ na ausência do termo anarmônico $\eta = 0$. Para $\nu > 1$ existe uma localização no transporte de energia.

Para o caso em que o termo anarmônico é considerado. A evolução espacial e temporal da energia $h_n(t)$, na cadeia unidimensional aperiódica, foi calculada para o caso de β_n e η constantes, com $\nu = 0.5$ e $\eta = 10$ e 20 . O resultado mostrou a divisão da excitação inicial em dois modos do tipo sóliton que se propaga ao longo da cadeia. Por conseguinte, numa cadeia anarmônica com um potencial pseudo-aleatório com $\nu = 3.0$ e $\eta = 10$ e 20 , a densidade de energia após a excitação, se dividiu em dois sólitons de tempo curto e uma localização de Anderson, em torno do local de excitação, mostrando que estes resultados estão de acordo com os obtidos (já existentes na literatura) para uma cadeia anarmônica. Entretanto precisamos salientar que além do expoente ν o parâmetro α desempenha um papel importante na topologia do sistema em questão. Portanto uma de nossas perspectivas consiste de investigar o papel deste parâmetro na propagação de energia nestes sistemas.

Referências

- [1] G. S. Zavt, M. Wagner, and A. Lütze. Anderson localization and solitonic energy transport in one-dimensional oscillatory systems. *Physical Review E*, 47(4108), 1993.
- [2] J. Garnier and F. Kh. Abdullaev. Soliton dynamic in random toda chain. *Physical Review E*, 67(026609), 2003.
- [3] Ch. Skokos, D. O. Krimer, S. Komineas, and S. Floch. Delocalization of wave packets in disordered nonlinear chains. *Physical Review E*, 79(056211), 2009.
- [4] E. Fermi, J. Pasta, and S. Ulam. Studies of non linear problems. *Los Alamos Report*, 2(266), 1955.
- [5] P. K. Datta and K. Kundu. Energy transport in one-dimensional harmonic chains. *Physical Review B*, 51(6287), 1995.
- [6] B. Li, H. Zhao, and B. Hu. Can disorder induce a finite thermal. *Physical Review Letters*, 86(63), 2001.
- [7] A. Dhar. Heat conduction in the disordered harmonic chain revisited. *Physical Review Letters*, 86(5882), 2001.
- [8] A. Dhar and K. Saito. Heat conduction in the disordered fermi-pasta-ulam chain. *Physical Review E*, 78(061136), 2008.

-
- [9] A. Dhar. Heat transport in low-dimensional systems. *Advances in Physics*, 57(457-537), 2008.
- [10] H. Zhao, Z. Wen, Y. Zhang, and D. Zheng. Dynamics of solitary wave scattering in the fermi-pasta-ulam model. *Physical Review Letters*, 94(025507), 2005.
- [11] M. V. Ivanchenko and S. Flach. Disorder-induced mobility edges and heat flow control in anharmonic acoustic chains. *EPL (Europhysics Letters)*, 94(46004), 2011.
- [12] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin. *Solid State Physics*. College Edition, New York, 1976.
- [13] Kittel and Charles. *Introdução à Física do Estado Sólido*. LTC, Rio de Janeiro, 8 edition, 2006.
- [14] J. S. Blakemore. *Solid State Physics*. Second Edition, New York, 1985.
- [15] H. Jones. *The Theory of Brillouin Zones and Electronic States in Crystals*. North Holland, Amsterdam, 1960.
- [16] W. A. Harrison. Electronic structure and the properties of metals. ii. application to zinc. *Physical Review*, 129(2512), 1963.
- [17] S. H. Koenig. Kohn effect in na and other metalss. *Physical Review*, 135(A1693), 1964.
- [18] J. Vazquez-Marquez, M. Wagner, M. Montagna, O. Pilla, and G. Villiani. Spatial evolution of energy in the hamiltonian chain. *Physica B*, 172(355), 1991.
- [19] G. B. Arfken and H. J. Weber. *Física Matemática: Métodos Matemáticos para Engenharia e Física*. CAMPUS, 6th edition, 2007.
- [20] P. B. Allen and J. L. Feldman. Thermal conductivity of disordered harmonic solids. *Physical Review B*, 48(12581), 2002.

-
- [21] P. W. Anderson. Absence of diffusion in certain random lattices. *Physical Review*, 109(1492), 1958.
- [22] F. J. Dyson. The dynamics of a disordered linear. *Physical Review*, 92(1331), 1952.
- [23] P. Dean. Vibrations of glass-like disordered chains proceedings of the physical society. *Proc. Phys. Soc.*, 84(727), 1964.
- [24] H. Matsuda and K. Ishii. Localization of normal modes and energy transport in the disordered harmonic chain. *Prog. Theor. Phys. Suppl.*, 45(56), 1970.
- [25] K. Ishii. Localization of eigestates and transport phenomena in the one-dimensional disordered system. *Prog. Theor. Phys. Suppl.*, 53(77), 1973.
- [26] P. K. Datta and K. Kundu. The absence of localization in one-dimensional disordered harmonic chains. *J. Phys.: Condens. Matter*, 6(4465), 1994.
- [27] F. Domingues-Adame, E. Macia, and A. Sánchez. Delocalized vibrations in classical random chains. *Physical Review B*, 48(6054), 1993.
- [28] J. C. Cressoni and M. L. Lyra. scaling behavior of the localization length in random dimer harmonic chains with thermal correlations. *Physical Review B*, 53(5067), 1996.
- [29] S. N. Evangelou and E. N. Economou. Reflectionless modes in chains with large-size homogeneous impurities. *J. Phys. A: Math. Gen*, 26(2803), 1993.
- [30] B. Li, H. Zhao, and B. Hu. Can disorder induce a finite thermal conductivity in 1d lattice? *Physical Review Letters*, 86(63), 2001.
- [31] J. C. Cressoni and M. L. Lyra. Localization length scaling in binary harmonic chains with correlations controlled by thermal annealing. *J. Phys: Condensed Matter*, 8(L83), 1996.

-
- [32] F. A. B. F. Moura, M. D. Coutinho-Filho, E. P. Raposo, and M. L. Lyra. Delocalized in harmonic chains with long-range correlated random masses. *Physical Review B*, 68(012202), 2003.
- [33] E. M. Barber. *Aperiodic Structures in Condensed Matter: Fundamentals and Applications*. CRC Press, Universidade Complutense de Madrid, 2009.
- [34] A. Ghosh and S. N. Karmakar. Periodic features in the dynamic structure factor of the quasiperiodic period-doubling lattice. *Physical Review B*, 57(2834), 1998.
- [35] S. Das Sarma, S. He, and X. C. Xie. Mobility edge in a model one-dimensional potential. *Physical Review Letters*, 61(2144), 1988.
- [36] S. Das Sarma, S. He, and X. C. Xie. Localization, mobility edges, and metal-insulator transition in a class of one-dimensional slowly varying deterministic potentials. *Physical Review B*, 41(5544), 1990.
- [37] H. S. Eisenberg, Y. Silberberg, R. Morandotti, and A. R. Boyd. Discrete spatial optical solitons in waveguide arrays. *Physical Review Letters*, 81(3383), 1998.
- [38] S. F. Mingaleev, Y. B. Gaididei, P. L. Christiansen, and Y. S. Hivshar. Nonlinearity-induced conformational instability and dynamics of biopolymers. *Europhys. Lett.*, 59(403), 2002.
- [39] M. Peyrard. Nonlinear dynamics and statistical physics of dna. *Inst. of Phys. Publ. Nonlinearity*, 17(R1), 2004.
- [40] M. Bhatti and P. Bracken. Effects of nonlinearity in quantum mechanics: Example of bose-einstein condensation. *Adv. Studies Theor. Phys.*, 1(87), 2007.
- [41] A. S. Alexandrov. Theory of quantum magneto-oscillations in underdoped cuprate superconductors. *Journal Phys.: Condens. Matter*, 20(192204), 2008.

-
- [42] L. L. Bonilla and H. T. Ghahn. Non-linear dynamics of semiconductor superlattices. *Rep. Prog. Phys.*, 68(577), 2005.
- [43] M. A. Porter, N. J. Zabusky, B. Hu, and D. K. Campbell. Fermi, pasta, ulam and the birth of experimental mathematics. *American Scientist*, 97, 2009.
- [44] W. Galléas, L. H. Ymai, P. L. Natti, and E. R. Takano Natti. Ondas do tipo sóliton em guias dielétricos. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, 25, 2003.
- [45] P. Liu, M. Jia, and S.-Y. Lou. Lax pair and exact solutions of a discrete coupled system related to coupled kdv and coupled mkdv equations. *Physica Scripta*, 76(674), 2007.
- [46] N. J. Zabusky and M. D. Kruskal. Interaction of "solitons" in a collisionless plasma and the recurrence of initial states. *Physical Review Letters*, 15(240), 1965.
- [47] J. Li and et. al. Symbolic computation on integrable properties of a variable-coefficient korteweg-de-vries equation from arterial mechanics and bose-einstein condensates. *Physica Scripta*, 75(278), 2007.
- [48] T. Dauxois, M. Peyrard, and S. Ruffo. The fermi-pasta-ulam 'numerical experiment': History and pedagogical perspectives. *European Journal of physics*, 26(53), 2005.
- [49] M. Toda. Vibration of a chain with nonlinear interaction. *J. Phys. Soc. Japan*, 22(431), 1967.
- [50] P.G Drazin and R. S. Johnson. *Solitons: An Introduction*, volume 2nd edition. Cambridge University, 1989.
- [51] M. Janssen. Statistics and scaling in disordered mesoscopic electron systems. *Physics Reports*, 295(1), 1998.
- [52] J. J. Ludlam, S. N. Taraskin, and S. R. Elliott. Disorder-induced vibrational localization. *Physical Review B*, 67(132203), 2003.

-
- [53] F. A. B. F. Moura, L. P. Viana, and A. C. Frery. Vibrational modes in aperiodic one-dimensional harmonic chains. *Physical Review B*, 73(212302), 2006.
- [54] B. Kramer and A. Mackinnon. Localization: Theory and experiment. *Rep. Prog. Phys.*, 56(1469), 1993.
- [55] J. C. Cressoni and M. L. Lyra. Scaling behavior the localization length in random dimer harmonic chains with thermal correlations. *Physical Review B*, 53(5067), 1996.
- [56] F. A. B. F. de Moura, M. D. Coutinho-Filho, and E. P. Raposo. Delocalization in harmonic chains with long-range correlated random masses. *Physical Review B*, 68(012202), 2003.
- [57] F. A. B. F. de Moura and F. Domingues-Adame. Extended modes and energ dynamics in two-dimensional lattices with correlated disorder. *Eur. Phys. J. B*, 66(165), 2008.