

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

Dissertação de Mestrado

Deslocalização de Ondas Acústicas em
Sistemas Unidimensionais Não Periódicos

Alex Emanuel Barros Costa

**Maceió
2011**

Alex Emanuel Barros Costa

Deslocalização de Ondas Acústicas em
Sistemas Unidimensionais Não Periódicos

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

C437d Costa, Alex Emanuel Barros.
Deslocalização de ondas acústicas em sistemas unidimensionais não periódicos / Alex Emanuel Barros Costa. – 2011.
54 f. : il., grafs.

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

Bibliografia: f. 50-54.

1. Ondas Acústicas – Localização. 2. Aperiodicidade. 3. Correlação. 4. Desordem. 5. Sistemas acústicos. I. Título.

CDU: 531.771.1

Dedico esta dissertação
aos meus pais Emanuel e Marisa,
aos meus irmãos
e à minha esposa Larissa.

Agradecimentos

Após dois anos de intensa dedicação para a concretização de mais uma etapa de minha formação acadêmico/profissional, enfim, chega o momento de agradecer àqueles que contribuíram das mais diversas formas, e estiveram presentes durante esse período.

Agradeço a Deus por me conceder força e sabedoria para lidar com as adversidades que surgem, e por sempre se fazer presente nos mais diversos momentos de minha vida.

A minha esposa Larissa, por todo seu amor, carinho e alegria que tenho recebido durante todo esse tempo. Agradeço por sua paciência e apoio nos diversos momentos que tanto precisei.

Agradeço aos meus pais pelo amor, dedicação e confiança constantes, por terem incentivado e investido na minha educação. Aos meus irmãos, Lilyan, Emanuelle e Victor, pelo carinho e amizade e também aos demais familiares pelo apoio.

Ao meu orientador prof. Francisco Fidelis: pelo conhecimento compartilhado e construído durante o mestrado, pelo trabalho conjunto realizado durante esse tempo, que foi caracterizado pela seriedade e compromisso.

Ao prof. Marcelo Lyra pelas indicações de referências essenciais para a qualidade do meu trabalho, assim como por ter contribuído, revisando, os artigos que foram publicados.

Ao prof. Glauber por ter contribuído para minha formação científica durante a graduação, e por suas indicações de referências pertinentes e importantes para a melhoria da qualidade do meu trabalho.

Aos meus colegas: Filipe, Ricardo, Henrique, Fred, Neto, Lidiane, Satiko, Gabeh, Anderson, Paulo, Wandearley, Thayla, Janderson e Max.

Aos professores do IF que contribuíram para a minha formação científica.

Aos demais amigos da pós-graduação pela agradável convivência.

À CAPES por possibilitar a continuidade dos meus estudos graças ao apoio financeiro.

Resumo

Nesta dissertação de mestrado estudamos numericamente a propagação de ondas acústicas em meios não periódicos unidimensionais. Nós nos concentramos em dois tipos de meios: (1) com distribuição da elasticidade possuindo correlação de longo alcance e (2) com distribuição aperiódica pseudo-aleatória. No primeiro caso, a elasticidade da distribuição aleatória é assumida ter um espectro de potência $S(k) \sim 1/k^\alpha$. Usando o método de matriz de transferência resolvemos a versão discreta da equação da onda escalar e calculamos o comprimento de localização. Além disso, aplicamos o método de diferença finita de segunda ordem para as variáveis temporal e espacial e estudamos a natureza das ondas que se propagam na cadeia.

Nossos dados numéricos indicam a presença de ondas acústicas estendidas para alto grau de correlação. Em contraste com correlação local, demonstramos numericamente que correlações de livre-escala promovem uma fase estável com ondas acústicas livre no limite termodinâmico. No outro caso, a distribuição das constantes elásticas foram geradas usando uma função senoidal cuja fase varia como uma lei de potência, $\phi \propto n^\nu$, onde n rotula as posições ao longo da rede. Ao considerar novamente uma versão unidimensional discretizada da equação de onda e uma reformulação da matriz recursiva nós calculamos o comprimento de localização dentro da faixa de frequências permitidas. Nossos dados numéricos indicam a presença de ondas acústicas propagantes com frequência diferente de zero para um suficiente grau de aperiodicidade.

Palavras-chave: Ondas Acústicas - Localização, Aperiodicidade, Correlação, Desordem, Sistemas Acústicos.

Abstract

In this Master degree thesis we numerically study the propagation of acoustic waves in one-dimensional nonperiodic medium. We focus on two kinds of medium: (1) a media with scale-free long-range correlated elasticity distribution and (2) medium with an aperiodic pseudo-random elasticity distribution. In the first case, the random elasticity distribution is assumed to have a power spectrum $S(k) \sim 1/k^\alpha$. By using a transfer matrix method we solve the discrete version of the scalar wave equation and compute the localization length. In addition, we apply a second-order finite-difference method for both the time and spatial variables and study the nature of the waves that propagate in the chain.

Our numerical data indicate the presence of extended acoustic waves for high degree of correlations. In contrast with local correlations, we numerically demonstrated that scale-free correlations promote a stable phase of free acoustic waves in the thermodynamic limit. In the another case, elasticity distribution was generated by using a sinusoidal function whose phase varies as a power-law, $\phi \propto n^\nu$, where n labels the positions along the media. By considering again a discrete one-dimensional version of the wave equation and a matrix recursive reformulation we compute the localization length within the band of allowed frequencies. Our numerical data indicates the presence of extended acoustic waves with non-zero frequency for sufficient degree of aperiodicity.

Keywords: Acoustic Waves - Localization, Aperiodicity, Correlation, Disorder, Acoustic Systems.

Sumário

Folha de rosto	i
Dedicatória	ii
Agradecimentos	iii
Resumo	v
Abstract	vii
1 INTRODUÇÃO	3
1.1 Ondas Acústicas	4
1.2 Matriz de Transferência e comprimento de localização	6
1.3 O Modelo de Anderson	9
1.4 Teoria de Escala para a Transição de Anderson	13
1.5 Violação da Teoria de Escala	18
2 LOCALIZAÇÃO EM POTENCIAIS CORRELACIONADOS	23
2.1 Distribuição aleatória com correlação de longo alcance	24
2.2 Diferença Finita	27
2.3 Resultados	28
3 LOCALIZAÇÃO EM POTENCIAIS APERIÓDICOS	38

Sumário	2
3.1 Modelo	40
3.2 Resultados	41
4 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	49
Referências	51
A ARTIGOS PUBLICADOS	58

Capítulo 1

Introdução

No século XX, as propriedades eletrônicas motivaram o estudo da condução de elétrons em diversos sistemas, culminando com o surgimento dos transístores que revolucionaram a eletrônica e trouxeram enormes benefícios à sociedade. Anderson [1; 2], nesse mesmo século, impulsionou os estudos da localização eletrônica ao prever que todos estados em meios desordenados são localizados para sistemas de baixa dimensionalidade, independente do grau de desordem. Em busca da “violação” da Teoria de Anderson, realizada por inúmeros cientistas, pode-se afirmar, hoje, que correlação [3–5] e aperiodicidade [6–8], na desordem, são formas convenientes de tornar condutores sistemas uni e bidimensionais. Algo mais peculiar e interessante foi a observação de que o fenômeno de localização eletrônica se deve à característica ondulatória do elétron [9], o que incentivou e estimulou o estudo da localização em outras classes de sistemas.

Nas últimas duas décadas tem crescido o interesse pelo estudo de propagação de ondas clássicas em meios heterogêneos [10–14]. Nos anos 80, cresceu o interesse em controlar as propriedades óticas e acústicas dos materiais, o que possibilitou

o surgimento de novos conceitos como cristais fotônicos [15] e cristais fonônicos [16], que exploram as propriedades ondulatórias da luz e do som, para controlar a propagação nesses materiais. Nesse contexto, localização de ondas tem sido estudada no âmbito de ondas acústicas [17–20] e eletromagnéticas [21], permitindo utilizar essas ondas, ditas clássicas, para a caracterização de materiais, assim como para aplicação tecnológica. Podemos citar como exemplo a criação de dispositivos fotônicos e fonônicos que graças à propriedade da localização de ondas, descrita por Anderson, filtram certas frequências impossibilitando sua propagação.

A partir das considerações feitas acima, nosso interesse reside na investigação de duas classes de sistemas: aperiódicos e com correlação de longo alcance; ambos amplamente estudados no modelo eletrônico exibindo transição de Anderson no regime de $d \leq 2$.

Dando continuidade a esse capítulo, apresentaremos a equação acústica do nosso modelo, faremos uma revisão da teoria de Anderson e dos principais resultados da incorporação de correlação e aperiodicidade em sistemas desordenados.

1.1 Ondas Acústicas

Nessa seção formularemos o problema de propagação de ondas acústicas em sistemas elásticos unidimensionais [10–13]. É didaticamente, interessante abordar o caso da propagação de ondas em cordas esticadas antes de descrever, de forma geral, o caso acústico. Esse simples e usual exemplo, nos fornece resultados importantes para a compreensão de diversos outros sistemas como por exemplo, a propagação de ondas acústicas em sólidos e em membranas elásticas [22].

Consideremos que uma corda possui densidade constante ρ (massa/comprimento).

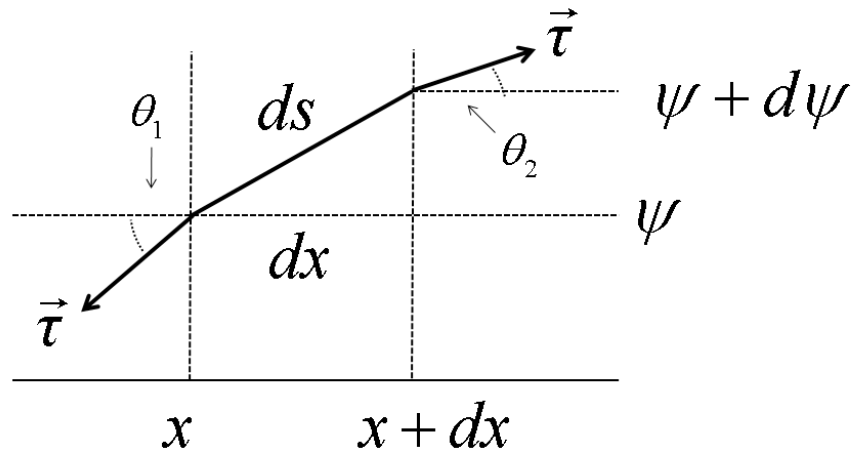


Figura 1.1: Uma porção ds de uma corda fixa em ambos os lados. O deslocamento do equilíbrio no lado esquerdo é ψ e no lado direito $\psi + d\psi$.

Seja ds um comprimento da corda descrita por $s(x,t)$. Veja a representação da corda na figura 1.1. A tensão $\vec{\tau}$ varia com a posição x . O deslocamento $\psi(x)$ é pequeno e perpendicular à direção x . A massa dm do comprimento de corda ds é ρds . As componentes horizontais das tensões são aproximadamente iguais e opostas, sendo assim, iremos negligenciar o movimento da corda na direção x . A força na direção $\psi(x)$ é:

$$\Delta F = \rho ds \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial t^2}, \quad (1.1)$$

em que ΔF representa a diferença da tensão em x e $x + dx$.

A força pode ser encontrada através do cálculo da diferença da componente y

da tensão:

$$\begin{aligned}
 (\Delta F)_y &= -\tau(x) \sin(\theta_1) + \tau(x + dx) \sin(\theta_2) \\
 &= -\tau(x) \tan(\theta_1) + \tau(x + dx) \tan(\theta_2) \\
 &= -\left(\tau(x) \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x}\right)_x + \left(\tau(x) \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x}\right)_{x+dx} \\
 &= \frac{\partial}{\partial x} \left[\tau(x) \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} \right] dx.
 \end{aligned} \tag{1.2}$$

assumindo que θ é pequeno para pequenos deslocamentos, consideramos $\sin \theta \approx \tan \theta$.

Agora igualando as equações 1.1 e 1.2, para $ds \approx dx$:

$$\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\tau(x)}{\rho} \frac{\partial \psi(x,t)}{\partial x} \right]. \tag{1.3}$$

Para o caso em que $\tau(x) = \tau$, ou seja, para cordas homogêneas temos a equação da onda comumente conhecida:

$$\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial t^2} = \frac{\tau}{\rho} \frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2}, \tag{1.4}$$

em que a velocidade da propagação da onda é $v = \sqrt{\tau/\rho}$.

1.2 Matriz de Transferência e comprimento de localização

No contexto de localização de ondas, uma maneira simples de proceder é formular o problema em termos matriciais, visando por fim calcular o comprimento de loca-

lização do sistema. Com essa finalidade, buscaremos uma representação matricial para a equação de ondas acústicas unidimensionais apresentada na seção anterior. A partir de então, consideraremos a massa de cada segmento igual a 1 e portanto $\tau(x)/\rho$ como sendo uma medida efetiva das propriedades elásticas locais do meio (constante elástica efetiva $\eta(x)$).

Vamos considerar que ψ tem dependência temporal harmônica da forma $\exp^{-i\omega t}$. Podemos, portanto, escrever $\psi(x,t) = \psi(x) \exp^{-i\omega t}$ sendo ω a frequência da onda. Assim, a equação da onda acústica em uma dimensão é escrita:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\eta(x) \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \right] + \omega^2 \psi(x) = 0. \quad (1.5)$$

Considerando uma discretização uniforme da rede com espaçamento Δx e sendo i o número do sítio ao longo da cadeia, as posições x passam a ser múltiplos de Δx , ou seja, $x = i\Delta x$ para um modelo discretizado. Usando que:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\eta(x) \frac{\partial \psi(x)}{\partial x} \right] \approx [\eta_i(\psi_{i+1} - \psi_i) - \eta_{i-1}(\psi_i - \psi_{i-1})]. \quad (1.6)$$

e seguindo a referência [10], vamos considerar $\Delta x = 1$. Assim temos:

$$\eta_i(\psi_{i+1} - \psi_i) - \eta_{i-1}(\psi_i - \psi_{i-1}) + \omega^2 \psi_i = 0. \quad (1.7)$$

Podemos rearranjar os termos e escrever na forma matricial:

$$\begin{pmatrix} \psi_{i+1} \\ \psi_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{-\omega^2 + \eta_i + \eta_{i-1}}{\eta_i} & -\frac{\eta_{i-1}}{\eta_i} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_i \\ \psi_{i-1} \end{pmatrix} = T_i \begin{pmatrix} \psi_i \\ \psi_{i-1} \end{pmatrix} \quad (1.8)$$

A matriz T_i é a matriz de transferência local que conecta a amplitude da onda

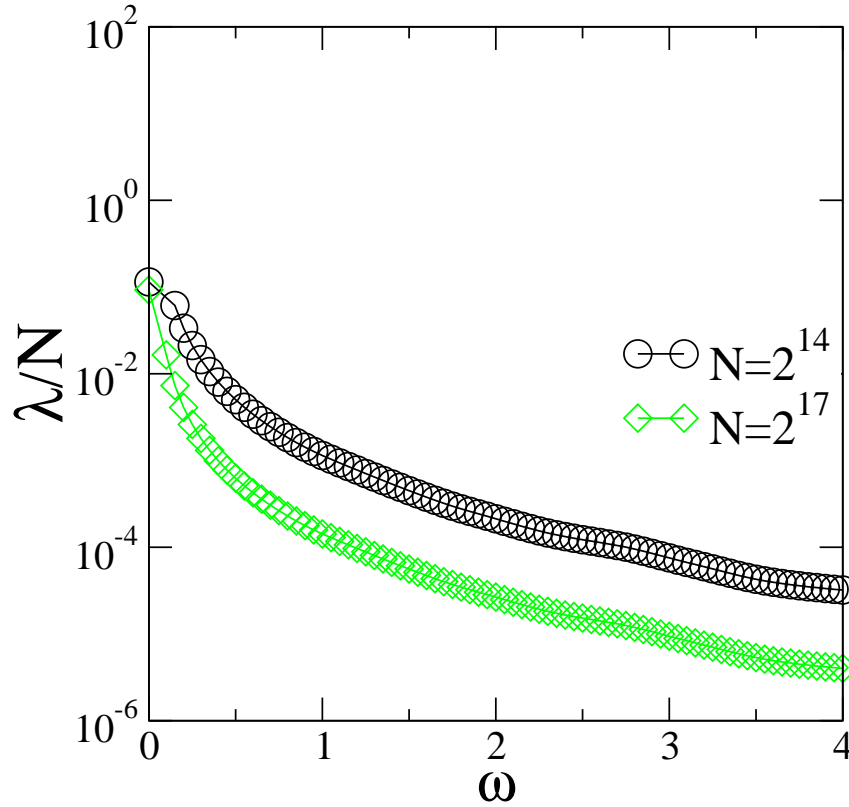


Figura 1.2: λ/N para um sistema totalmente desordenado. Observe que apenas em $\omega = 0$ há uma superposição das curvas.

no sítio $i + 1$ com os sítios i e $i - 1$. Para uma cadeia que possui N sítios, a matriz de transferência total que conecta a amplitude no fim da cadeia com as amplitudes iniciais é $Q_N = \prod_{i=1}^N T_i$. Dessa forma, dada um condição inicial $C_0 = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_0 \end{pmatrix}$, podemos encontrar $C_N = \begin{pmatrix} \psi_{N+1} \\ \psi_N \end{pmatrix}$, uma vez que $C_N = Q_N C_0$.

O expoente de Lyapunov, ou inverso do comprimento de localização λ , é definido por:

$$\gamma(\omega) = \frac{1}{\lambda} = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \frac{|Q_N C_0|}{|C_0|}. \quad (1.9)$$

Consideremos duas redes com $N = 2^{14}$ e $N = 2^{17}$ sítios que possui constantes

elásticas aleatórias, com valores igualmente distribuídos no intervalo $[1.5, 2.5]$ e vejamos o comportamento do comprimento de localização para esse sistema. A figura 1.2, mostra que apenas para $\omega = 0$ o comprimento de localização diverge no limite termodinâmico; esse resultado sugere a existência de estado deslocalizado apenas para a frequência $\omega = 0$, isso representa que para $\omega \neq 0$, todos os estados acústicos são localizados. Esse resultado simples, demonstra o efeito da desordem na propagação acústica em uma dimensão.

Como já antes tínhamos comentado, efeitos de desordem é um tópico de grande interesse na Física da Matéria Condensada, sendo bastante compreendido para sistemas eletrônicos. Por essa razão, vamos nos situar nesse contexto apresentando os principais resultados. Na próxima seção é apresentado o modelo de Anderson, que permitiu grandes descobertas na década de 60 sobre localização eletrônica.

1.3 O Modelo de Anderson

Em 1958, P. W. Anderson [1; 2] apresentou um modelo que permitiu investigar a natureza dos estados eletrônicos em sistemas desordenados. Mostrou que na presença de desordem a natureza da função de onda pode mudar de estendida, como no caso das ondas de Bloch [23], para localizada. Além disso, pela primeira vez, estimou quantitativamente a largura da desordem necessária para a ocorrência dessa transição que hoje é conhecida como Transição de Anderson. O Hamiltoniano de Anderson, na representação de segunda quantização, é expresso por:

$$\hat{H} = \sum_i E_i \hat{C}_i^\dagger \hat{C}_i + \sum_{i \neq j} T_{ij} \hat{C}_i^\dagger \hat{C}_j. \quad (1.10)$$

Nessa expressão, E_i é a energia do i -ésimo sítio, T_{ij} é a integral de transferência entre os sítios i e j (também conhecida por amplitude *hopping*) e \hat{C}^\dagger e \hat{C} são, respectivamente, os operadores de criação e destruição do elétron no sítio i . É importante destacar que, nesse Hamiltoniano as interações Coulombianas entre os elétrons são desprezadas. A desordem característica do modelo é introduzida escolhendo-se E_i para cada sítio i de forma aleatória dentro de um intervalo $[-W/2, W/2]$. O grau de desordem do sistema é controlado pelo parâmetro W , conhecido como largura da distribuição de desordem. Quando $W = 0$ é obtido um sistema ordenado, no qual todos os sítios possui a mesma energia.

O modelo tridimensional de Anderson, prevê a existência de estados estendidos, para um grau de desordem menor que o grau crítico W_c , ou seja, em que $W < W_c$. Utilizando-se desse modelo, Anderson mostrou a existência da chamada “localização da função de onda eletrônica” pela desordem.

Um modo simples de discutir o modelo de Anderson é escrevendo os auto-estados do Hamiltoniano \hat{H} com energia E em termos da expansão $\psi = \sum_i a_i \phi_i$ em que ϕ_i é a função de onda de um elétron localizado no sítio i . Assim temos:

$$Ea_i = E_i a_i + \sum_j T_{ij} a_j. \quad (1.11)$$

Sendo ψ um estado não estacionário, os coeficientes a_i 's dependentes do tempo, obedecerão à equação:

$$-i\hbar \frac{da_i}{dt} = E_i a_i + \sum_j T_{ij} a_j. \quad (1.12)$$

Vamos investigar o caso sem desordem, ou seja, em que $W=0$. Podemos supor que os potenciais estão distribuídos sobre uma rede regular, na qual só existem os

termos de *hopping* entre os z primeiros vizinhos para cada sítio i , sendo esses de mesma magnitude T . Dessa forma a equação 1.12 de Schödinger dependente do tempo, torna-se

$$Ea_i = E_i a_i + T \sum_{j=1}^{j=z} a_{i+j}, \quad (1.13)$$

em que T é o termo de *hopping* entre qualquer par de sítios da rede. Por simplicidade, sabendo que a energia E_i é a mesma em todos os sítios, consideremos que possui valor $E_i = 0$. Para uma cadeia unidimensional, a equação 1.13 se reduz a

$$Ea_i = T(a_{i-1} + a_{i+1}), \quad (1.14)$$

que pode ser solucionada escolhendo $a_n = a_0 \exp^{ink}$. Assim, obtemos a relação de dispersão para uma rede unidimensional:

$$E = 2T \cos k. \quad (1.15)$$

Portanto, a banda permitida é dada por: $-2T < E < 2T$, com largura de banda $B = 4T$. De maneira geral, para uma rede de dimensão d com número de primeiros vizinhos z , a largura de banda é $B = 2zT$. O caso geral, sem simplificações, em que $W \neq 0$ e $T \neq 0$, foi abordado por Anderson utilizando métodos perturbativos para W e T . Anderson demonstrou com esse modelo que se W/B for suficientemente grande, ocorre um transição metal-isolante em que todos os estados na banda são exponencialmente localizados. O critério qualitativo para existência de estados deslocalizados é dado por:

$$W > B. \quad (1.16)$$

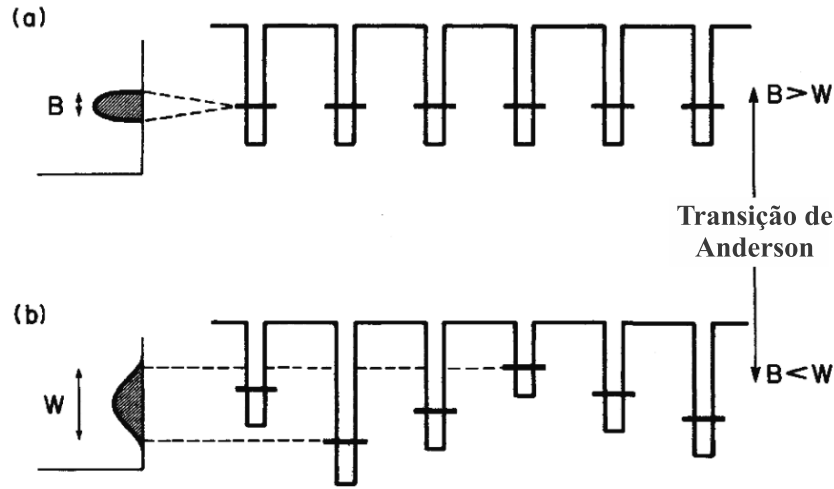


Figura 1.3: Transição de Anderson. a) Potencial periódico com largura de banda B . b) Potencial aleatório com largura de desordem W . Quando a largura de desordem W superar a largura de banda B , ocorre localização induzida por desordem.

Vamos apresentar quantitativamente a origem da localização. Consideremos o modelo de Bloch [23] com potencial periódico, por conveniência o potencial cristalino $U(r) = 0$, ou seja, uma situação de elétron livre. Caso seja introduzida uma barreira de potencial, a esse elétron, a função de onda será parcialmente transmitida e refletida; se for introduzida duas barreiras a onda eletrônica será refletida duas vezes, havendo interferência construtiva ou destrutiva, que dependerá da diferença de fase entre as ondas. O padrão de interferência pode ser bastante alterado, ao considerar várias barreiras com potenciais aleatórios ou espaçadas de forma aleatória, a onda sofrerá várias reflexões sem manter coerência de fase. Essas reflexões causam interferências destrutivas, tornando a onda exponencialmente localizada. A função de onda passa a ficar localizada em um pequena região do sólido, assumindo valores desprezíveis em qualquer outra região.

Para um grau de desordem forte, Anderson mostrou que a função de onda é

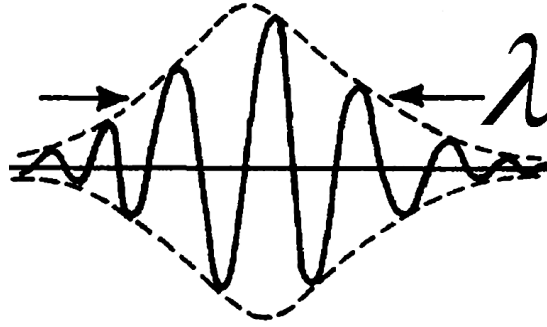


Figura 1.4: Função de onda localizada. O parâmetro λ mede a largura típica da função de onda e é também conhecido como comprimento de localização.

localizada exponencialmente em uma pequena região. A probabilidade de encontrar o elétron decai exponencialmente com a distância, ou seja, $|\psi| \sim e^{-|\vec{r}-\vec{r}_0|/\lambda}$. A quantidade λ , conhecida como comprimento de localização, pode ser usada para caracterizar um estado eletrônico como sendo localizado ou deslocalizado. Em geral, para um estado deslocalizado, no limite termodinâmico $\lambda \rightarrow \infty$.

1.4 Teoria de Escala para a Transição de Anderson

Vamos agora apresentar a teoria de escala [24] que nos permite encontrar a dependência da transição de Anderson com a dimensão. A hipótese básica dessa teoria é que uma única quantidade característica, rotulada de condutância generalizada g , controla a transição metal-isolante de Anderson para a temperatura $T = 0$. Nessa abordagem, a teoria de escala foi aplicada na reformulação do modelo de Anderson feita por Thoules [25]. Na reformulação de Thoules, as unidades fundamentais deixam de ser os sítios atômicos i , passando a ser hipercubos de volume L^d . Dessa forma, um sólido cristalino passa a ser formado por várias caixas acopladas. As energias W e T , do modelo de Anderson, agora são mapeadas res-

pectivamente no espaçamento médio entre os níveis ΔE e em δE que representa o deslocamento causado por mudanças nas condições de contorno.

Utilizando o princípio de incerteza, podemos relacionar δE com a condutividade σ no limite macroscópico. Através do princípio da incerteza temos [26]:

$$\delta E = \hbar/t_D, \quad (1.17)$$

supondo que o elétron difunde até os contornos de uma caixa de lado L descrevendo um movimento aleatório ou Browniano em um tempo t_D , temos a relação:

$$t_D = L^2/D, \quad (1.18)$$

em que D é a constante de difusão. Com o uso da relação de Einstein entre a condutividade e as propriedades de difusão:

$$\sigma = eDn(E), \quad (1.19)$$

e combinando as equações 1.17, 1.18 e 1.19 temos:

$$\delta E = \frac{\sigma \hbar}{e^2(L^2n(E))}. \quad (1.20)$$

A densidade de estados:

$$n(E) = \frac{1}{L^d \Delta E}. \quad (1.21)$$

A razão $\Delta E/\delta E$ nesse contexto é agora vista como sendo a força de desordem do sistema, análogo a razão W/B do tradicional modelo de Anderson. O parâmetro

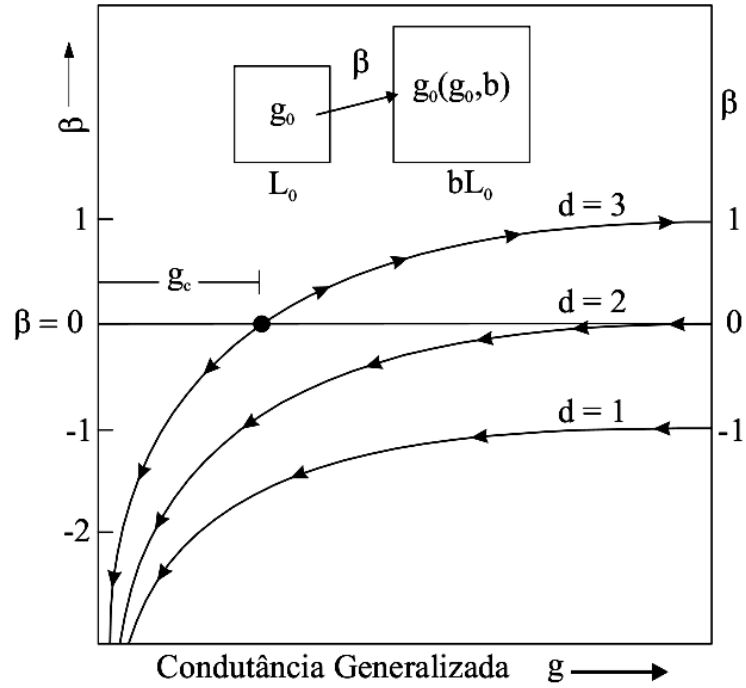


Figura 1.5: Comportamento qualitativo de $\beta(g)$ para uma, duas e três dimensões. Apresentado por Abrahams, Anderson, Licciardello e Ramakrishnam em 1979.

de desordem, denotado por g^{-1} , possui dependência com a escala e é definido por:

$$\frac{1}{g(L)} \equiv \frac{\Delta E}{\delta E}. \quad (1.22)$$

Substituindo a equação equação 1.20 e 1.21 na 1.22, obteremos a dependência do parâmetro de ordem com a escala:

$$g(L) = (\hbar/e^2)\sigma L^{d-2}. \quad (1.23)$$

A equação 1.23 é válida para o limite macroscópico, uma vez que a equação 1.17 é verdadeira nesse limite. O parâmetro g pode ser visto como uma condutância

generalizada em unidades de e^2/\hbar , tendo o termo $L^{d-2}\sigma$ definido como a condutância de um cubo d-dimensional de lado L e condutividade σ . Vamos investigar a dependência de $g(L)$ com o comprimento de escala utilizado. Com essa finalidade supondo que $g_0 = g(L_0) = \delta E(L_0)/\Delta E(L_0)$ seja a condutância generalizada para um sistema com vários hipercubos acoplados de volume L_0^d . A teoria de escala assume que, dado g_0 em uma escala com comprimento L_0 , podemos obter g em uma escala maior $L = bL_0$. Na nova escala L , o parâmetro g é completamente determinado conhecendo g_0 e o fator de escala b . Para explorar o comportamento do parâmetro g com a escala, vamos obter a derivada logarítmica de g , denotada por β e expressa por:

$$\beta(g) = \frac{d \ln g(L)}{d \ln L}. \quad (1.24)$$

A figura 1.5 representa o comportamento qualitativo da função β para uma, duas e três dimensões. Para β positivo o parâmetro g cresce com o crescimento de L e para β negativo g decresce com o crescimento de L . Vamos descrever o comportamento de β , observando o comportamento de g em seus limites assintóticos, ou seja, em $g \rightarrow \infty$ e $g \rightarrow 0$. Para o limite macroscópico, em que g é grande, podemos usar a equação 1.23 e partindo dessa relação, obtermos β em $g \rightarrow \infty$:

$$\lim_{g \rightarrow \infty} \beta(g) = d - 2, \quad (1.25)$$

ou seja,

$$\beta(\infty) = \begin{cases} +1 & \text{em } d = 3 \\ 0 & \text{em } d = 2 \\ -1 & \text{em } d = 1 \end{cases} \quad (1.26)$$

Para o caso em que $g \ll 1$, ou seja, fraco acoplamento e forte desordem, o

modelo de Anderson prevê que todos os estados são localizados e decaem exponencialmente com a distância. Nos contornos de uma caixa de dimensão linear L , a amplitude da função de onda de um elétron localizado dentro da caixa é da ordem de $e^{-\gamma L}$, em que $1/\gamma$ é o comprimento de localização. Como o acoplamento entre as caixas também possui a mesma dependência exponencial com L , a condutância generalizada g decai exponencialmente, portanto, usando a equação 1.24 temos que:

$$\lim_{g \rightarrow 0} \beta(g) = \ln(g), \quad (1.27)$$

portanto, temos o seguinte resultado que independente da dimensão,

$$\lim_{g \rightarrow 0} \beta(g) = -\infty. \quad (1.28)$$

Assumindo que a função $\beta(g)$ é monotônica entre os limites de $g \rightarrow \infty$ e $g \rightarrow 0$, podemos reproduzir facilmente a figura 1.5. Observemos atentamente o comportamento de β para $d = 3$. Podemos notar que, para essa dimensão existe um ponto fixo instável em $\beta = 0$ com $g = g_c$. Em g_c , a condutância independente da escala, caracterizando uma transição metal-isolante de Anderson. A principal conclusão da teoria de escala é que para $d < 3$, em especial em $d = 1$ e $d = 2$, não existe transição metal-isolante e todos estados são localizados, pois a condutância vai sempre a zero quando $L \rightarrow \infty$. Em analogia com as teorias de transições de fase de segunda ordem, a condutividade em corrente contínua σ_{DC} e o comprimento de localização λ , próximos da energia crítica de transição (*mobility edge*) tem um

comportamento tipo lei de potência:

$$\begin{aligned}\sigma_{DC} &\propto (E - E_c)^s \\ \lambda &\propto (E - E_c)^{-\nu}.\end{aligned}\tag{1.29}$$

Os valores dos expoentes $s = \nu = 1$ foram numericamente obtidos usando uma expansão em $d + \epsilon$ por Wegner [2] e também por técnicas de expansão diagramática por Vollhard e Wlfle [2]. Recentemente, considerações sistemáticas de variáveis irrelevantes e correções não lineares na teoria de escala têm refinado os resultados, obtendo o expoente crítico com maior precisão numérica $\nu \approx 1.57$ [2].

1.5 Violação da Teoria de Escala

Até então, vimos que a teoria de escala para o modelo de Anderson prevê que todos os estados são localizados em sistemas de baixa dimensionalidade, ou seja, em $d \leq 2$ para qualquer grau de desordem; e também, prevê a possibilidade de uma transição metal-isolante para um sistema tridimensional. Entretanto, vários trabalhos recentes têm apresentado transições metal-isolante em sistemas de baixa dimensionalidade, para sistemas com desordem correlacionada ou sistemas pseudo-aleatórios, resultados não previstos pelo modelo de Anderson original.

Em meados da década de 80, vários trabalhos envolvendo modelos *tight-binding* unidimensionais com potenciais incomensuráveis revelaram a presença de uma transição metal-isolante. Por exemplo, um potencial do tipo $\epsilon_n = V \cos k|n|^\nu$ onde $k = 2\pi\alpha$ e α é um número irracional entre 0 e 1 apresenta vários aspectos interessantes [6–8]. Para $0 < \nu < 1$ existem estados estendidos na faixa

$-2 + V < E < 2 - V$ e estados localizados nas faixas $2 - V < E < 2 + V$ e $-2 - V < E < -2 + V$ para $V < 2$, enquanto que todos os estados são localizados para $V > 2$. Para $\nu = 1$ os estados eletrônicos são localizados se $V > 2$ e estendidos se $V < 2$. Para $1 < \nu < 2$ todos os estados são localizados, mas o coeficiente de Lyapunov se aproxima de zero no centro da banda. Finalmente, para $\nu > 2$ o sistema se comporta como um modelo de Anderson unidimensional e todos os estados são exponencialmente localizados.

Em 1990, Dunlap e colaboradores [3] através do modelo de *tight-binding* unidimensional, estudaram uma cadeia composta por uma liga binária. As energias dos sítios, nesse modelo, podem assumir valores ϵ_a e ϵ_b . Os sítios de energia ϵ_a sempre aparecem em pares, tendo probabilidade p de aparecer enquanto ϵ_b probabilidade $1 - p$. O termo de *hopping* entre os primeiros vizinhos é constante e igual a t . Foi mostrado nesse trabalho que se $-2t < \epsilon_a - \epsilon_b < 2t$ o sistema apresenta uma energia ressonante em que a função de onda é deslocalizada. Uma série de trabalhos envolvendo correlações tipo dímeros surgiram desde então sempre com os mesmos resultados: divergência do comprimento de localização em algumas energias críticas [27–32]. A diferença fundamental entre o modelo de Anderson original e os modelos de dímeros é a existência de correlações nas energias dos sítios. Wu e Phillips [27] mostraram que a distribuição de desordem na polianilina é descrita exatamente por este modelo de dímeros aleatórios. A existência desses estados estendidos ressonantes foram verificadas por Bellani *et al* [33] em experimentos com super-redes de dímeros aleatórios (GaAs-AlGaAs).

Em 1998, Moura e Lyra [4] estudaram um modelo de Anderson unidimensional substituindo a desordem típica do modelo de Anderson por desordem correlacionada. Neste trabalho o potencial foi escolhido a possuir um traço característico

de um movimento Browniano fracionário, cujo a densidade espectral é dada por:

$$S(k) \propto \frac{1}{k^\alpha}, \quad (1.30)$$

em que $S(k)$ é a transformada de Fourier da função correlação entre dois pontos $\langle \epsilon_i \epsilon_j \rangle$. O parâmetro α mede o grau de correlação da sequência. Para $\alpha = 0$ recupera-se uma sequência completamente descorrelacionada. Através do formalismo de grupo de renormalização, Moura e Lyra [34], mostraram que para $\alpha > 2$ este sistema pode exibir uma fase de estados estendidos no centro da banda. Esses resultados são importantes, pois pela primeira vez foi apresentada uma verdadeira transição metal-isolante em sistemas unidimensionais. Na mesma época, em 1999, Izrailev e Krokhin [35] mostraram também a existência de transição de Anderson para sistemas unidimensionais possuindo correlação de longo alcance, através do uso da teoria de perturbação de segunda ordem. Ainda em 1999, resultados semelhantes a esses foram obtidos pelo grupo de Izrailev e Krokhin [5]. Utilizando uma teoria de perturbação de segunda ordem obtiveram uma transição metal-isolante em sistemas com desordem correlacionada. A presença de uma verdadeira fase metálica em sistemas com correlações de longo alcance na distribuição de desordem vem chamando a atenção da comunidade científica e motivando muitos estudos teóricos e experimentais. Podemos citar a observação experimental de transmissão de micro-ondas em guias retangulares com espalhadores correlacionados [36]. Nesse experimento, os espalhadores colocados no guia de ondas, são parafusos milimétricos (ver figura 1.6) cujas dimensões são correlacionadas. Eles encontraram uma faixa de frequências $[\omega_c^1, \omega_c^2]$ onde os modos são transmitidos.

No contexto de ondas clássicas, uma série de trabalhos tem sido apresentados

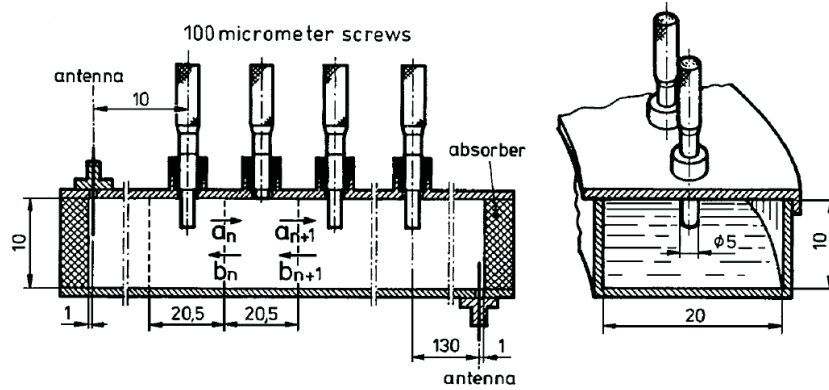


Figura 1.6: Aparato experimental do guia de onda usado na referência [36].

mostrando a presença de transição de Anderson em sistemas unidimensionais. Em 2008, Sahimi e colaboradores [10], apresentaram resultados para a propagação de ondas acústicas em sistemas unidimensionais com correlações tipo dímeros na distribuição de desordem. Através do método da matriz transferência, cálculo analítico e diferença finita, mostraram a existência de um estado estendido para uma frequência de ressonância ω_c . O valor de ω_c depende diretamente do tipo de dímero utilizado. Propagação de ondas acústicas em meios com correlações tipo lei de potência também vêm sendo estudadas através de métodos de grupo de renormalização bem como métodos numéricos [11–14]. Resultados indicam a existência de estados acústicos estendidos para quaisquer dimensões topológicas.

Considerando esse contexto, nessa dissertação, estudamos através do método da matriz transferência e diferença finita, os efeitos das distribuições de elasticidades não-periódicas nas propriedades de transmissão acústica em baixa dimensionalidade. Vamos adaptar distribuições não periódicas já estudadas previamente em sistemas quânticos eletrônicos e magnéticos [4; 37; 38] para sistemas elásticos unidimensionais. Estamos interessados em duas classes específicas: sequências com correlações de longo alcance tipo movimento Browniano fracionário e bem

como sistemas aperiódicos. No capítulo 2, vamos apresentar nossa análise sobre transporte de ondas acústicas em sistemas com correlações de longo alcance e no capítulo 3 em sistemas aperiódicos. Por fim, um breve capítulo com as conclusões e perspectivas, e um anexo contendo os artigos produzidos durante esta dissertação.

Capítulo 2

Localização de Ondas Acústicas em Potenciais com Correlação de Longo Alcance

No capítulo anterior, explanamos a importância do estudo sobre o efeito de desordem em diversos sistemas. Neste capítulo apresentaremos um estudo numérico da equação de onda acústica na presença de uma distribuição de elasticidade com correlações de longo alcance. Em nosso estudo vamos gerar a constante elástica efetiva do meio através do traço de um movimento Browniano fracionário. Basicamente vamos construir uma distribuição que possui densidade espectral $S(k) = k^{-\alpha}$, em que $k = 1/\lambda$ e λ é o comprimento de onda das modulações da distribuição. O parâmetro α mede o grau de correlação da distribuição. $S(k)$ é obtido tomando a transformada de Fourier entre dois pontos $\langle \epsilon_i \epsilon_j \rangle$. Uma das formas mais simples de gerar esse tipo de distribuição é através do movimento Browniano fracionário (MBF) que será apresentando na próxima seção. Após entender como gerar nu-

mericamente uma distribuição com correlações de longo alcance vamos introduzir a mesma, como sendo as constantes elásticas na equação de onda acústica e estudar o efeito desta correlação usando métodos numéricos usuais [10].

2.1 Distribuição aleatória com correlação de longo alcance

Generalizando o conceito de função aleatória $x(t)$, Mandelbrot [39; 40] introduziu o conceito de movimento Browniano fracionário (MBF) que tem sido utilizado para gerar sequências aleatórias correlacionadas. Considerando que $B_H(t)$ representa a posição da partícula que descreve um movimento Browniano fracionário em um instante t e considerando que $B_H(t=0) = 0$, temos que a função $C(t)$ que mede a correlação entre os incrementos $(B_H(0) - B_H(-t))$ e $(B_H(t) - B_H(0))$, é relacionada com o expoente de Hurst, como a seguir:

$$C(t) = \left[\frac{\langle -B_H(-t)B_H(t) \rangle}{B_H(t)^2} \right] = (2^{2H-1} - 1). \quad (2.1)$$

Observe que $C(t) = 0$ para todo instante de tempo quando $H = 1/2$, ou seja, para o caso de um movimento Browniano simples. Para $H \neq 1/2$, os incrementos entre os eventos possui correlação diferente de zero para qualquer instante de tempo. Quando temos que $H > 1/2$ o movimento é persistente, ou seja, se a caminhada sofreu crescimento no passado então os incrementos no futuro tendem a ser positivos. Já para a situação em que $H < 1/2$, o movimento é antipersistente indicando que incrementos negativos no passado implicam em incrementos positivos no futuro e vice-versa.

Para gerar uma série temporal aleatória com espectro bem definido, vários autores [41–45] tem usado a transformada de Fourier discreta, obtendo a relação:

$$x_i = \sum_{k=1}^{N/2} (S(\omega_k) \Delta\omega)^{1/2} \cos(\omega_k t_n + \phi_k). \quad (2.2)$$

É importante salientar que o ruído na série x_i é originado ao considerar que as $N/2$ fases ϕ_k assumem valores uniformemente distribuídos de forma aleatória no intervalo $[0, 2\pi]$. As frequências ω_k , são múltiplas da frequência fundamental $\Delta\omega = 2\pi/T$, ou seja, $\omega_k = k\Delta\omega$. Considerando que a partícula seja observada no tempo $t_i = i\tau$, e que tenha N valores em um período T , assim $T = N\tau$. Assumindo que $S(\omega_k) = 1/\omega_k^\alpha$ e escolhendo por conveniência $\tau = 1$, obtemos:

$$x_i = \sum_{k=1}^{N/2} \left[k^{-\alpha} \left| \frac{2\pi}{N} \right|^{1-\alpha} \right] \cos \left(\frac{2\pi ik}{N} + \phi_k \right). \quad (2.3)$$

O parâmetro α controla o grau de correlação da distribuição e está relacionado com o expoente de Hurst da forma $\alpha = 2H + 1$. Quando temos $\alpha = 0$, a sequência é aleatória, com ruído branco, ou seja, sem correlações entre os eventos. Para o caso especial em que $\alpha = 2$ recuperamos a sequência típica de movimento Browniano simples. Para simular sistemas elásticos que possuem distribuição de elasticidade com correlações de longo alcance, vamos utilizar a sequência x_i através do uso de uma transformada hiperbólica que não altera o comportamento típico de lei de potência da densidade espectral da série. Desta forma geramos x_i restrita ao

intervalo $-1 \leq x_i \leq 1$,

$$x_i = \tanh \left[\sum_{k=1}^{N/2} \frac{1}{k^{\alpha/2}} \cos \left(\frac{2\pi i k}{N} + \phi_k \right) \right]. \quad (2.4)$$

As $N/2$ fases ϕ_k são geradas de forma uniforme em um intervalo $[0, 2\pi]$, ϕ_k é o único termo estocástico da série. É importante lembrar que o parâmetro α é o termo que controla o grau de correlação da sequência. Para obtermos uma sequência com variância independente do tamanho do sistema, as constantes elásticas η_i foram escolhidas de maneira a manter $\Delta\eta_i = \text{constante}$ e evitar valores negativos na distribuição, para os primeiros estudos, consideramos $\Delta\eta_i = 1$. Para satisfazer a essas condições, escolhemos η_i da forma:

$$\eta_i = 2 + \frac{x_i}{\Delta x}. \quad (2.5)$$

Na figura 2.1 é mostrado $\eta_i \times i$ para diferentes graus de desordem ($\alpha = 0.0, 1.0, 2.0$ e 3.0) para cadeias de tamanho $N = 2^{14}$. Após ter definido η_i vamos estudar numericamente a propagação de modos acústicos através da solução numérica da equação de onda 1.5. Vamos aplicar além do método de matriz de transferência, aplicado no capítulo anterior, um formalismo de diferença finita que permite a solução numérica direta da equação para uma condição inicial geral. O método será descrito a seguir.

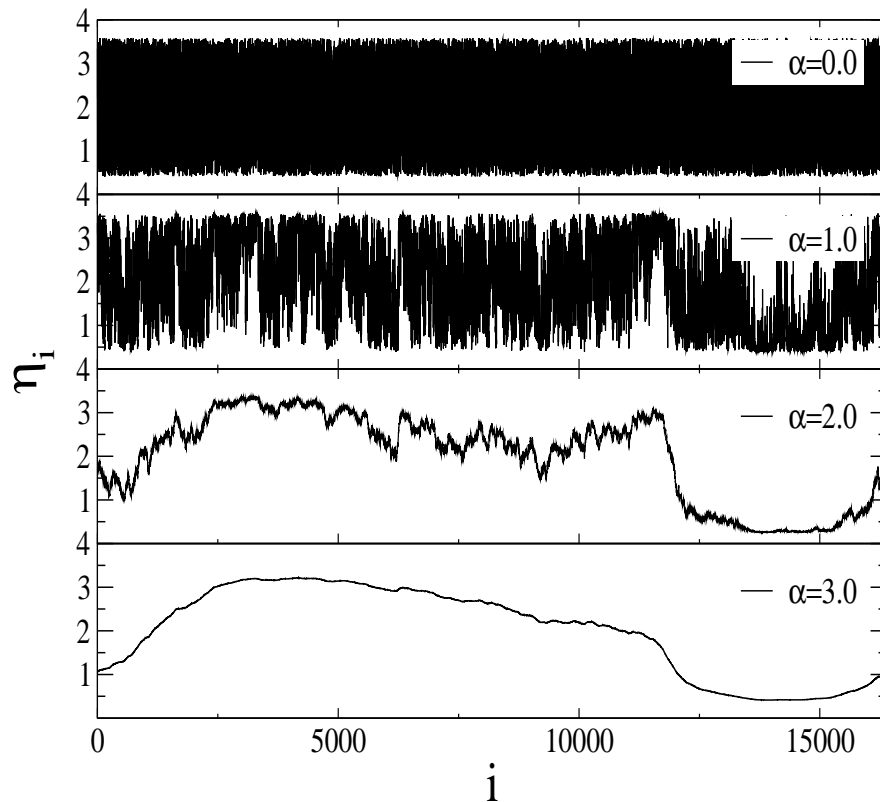


Figura 2.1: Sequências geradas pela equação 2.5 com $N = 2^{14}$ e parâmetros de correlação $\alpha = 0, 1, 2$ e 3.0 .

2.2 Diferença Finita

Uma discretização da função $\psi(x,t)$ é obtida considerando apenas os valores ψ_i^n em um finito número de pontos (x_i, t_n) em que $x = i\Delta x$ e $t = n\Delta t$, sendo Δx e Δt o espaçamento da rede no espaço da posição e no tempo, respectivamente. Para a descrição matemática de ψ no tempo e no espaço, usamos a denotação de sendo i referente ao espaço e n ao tempo.

Considerando uma expansão em série de Taylor e desprezando termos de alta ordem temos:

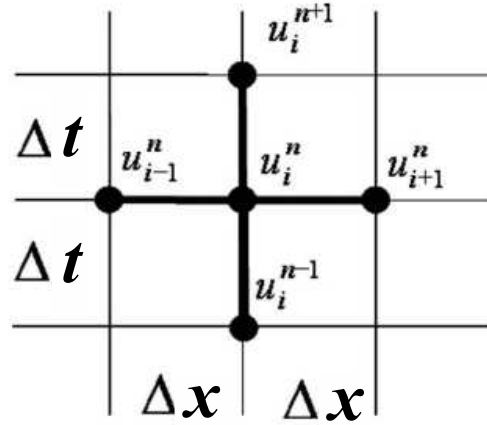


Figura 2.2: Discretização do espaço e tempo.

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(x, t) \approx \frac{\psi_i^{n+1} - 2\psi_i^n + \psi_i^{n-1}}{\Delta t^2}, \quad (2.6)$$

e para a derivada espacial,

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\eta(x) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \right] \approx \frac{1}{\Delta x^2} [\eta_i (\psi_{i+1}^n - \psi_i^n) - \eta_{i-1} (\psi_i^n - \psi_{i-1}^n)]. \quad (2.7)$$

Em nossas simulações o espaçamento entre os sítios vizinhos é $\Delta x = 1$. Para garantir estabilidade usamos $\Delta t \leq \Delta x/100$.

A figura 2.3 exibe a representação do espaço e do tempo em finita diferença.

2.3 Resultados

Nesta seção vamos apresentar nossos principais resultados a respeito do comportamento dos modos acústicos em meios que possuem correlação de longo alcance.

A fim de investigar a natureza dos estados acústicos em meios com correlação

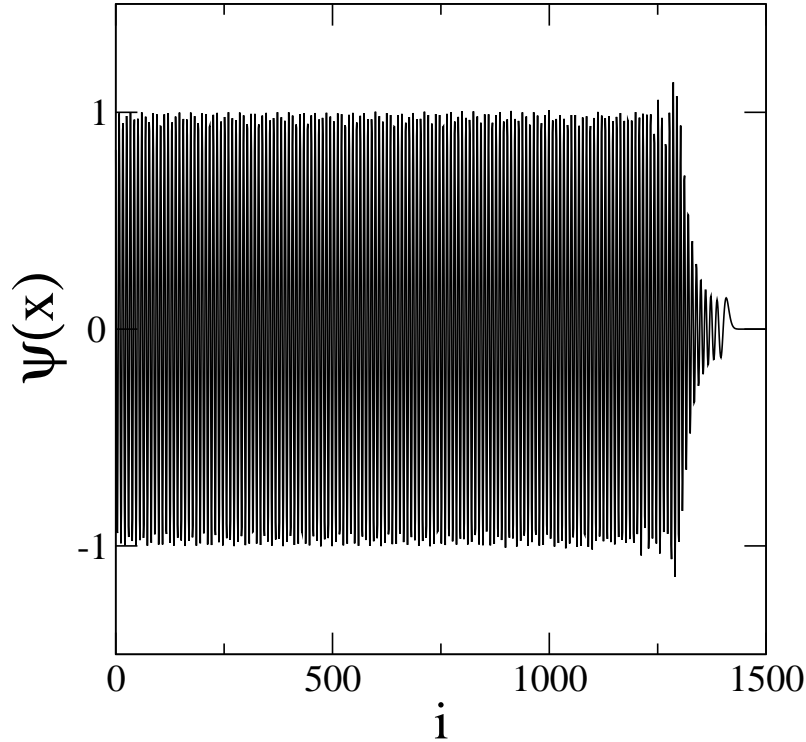


Figura 2.3: Amplitude de uma onda incidente senoidal ao longo de um meio homogêneo ($\eta_i = 2$ para qualquer valor de i) em $t = 10^5 \Delta t$.

de longo alcance, calculamos o comprimento de localização para diversos graus de correlação utilizando o método da Matriz Transferência já apresentado. Utilizamos 10^5 desordens configuracionais para obter o comprimento de localização em função da frequência, denotado por $\lambda(\omega)$.

Em geral, no contexto de localização de ondas, o cálculo do comprimento de localização tem permitido mapear regiões espectrais em que o meio se comporta de forma metálica ou isolante. Por isso, é conveniente analisarmos $\lambda(\omega)/N$.

Vejamos a figura 2.4, temos λ/N versus ω para $N = 2^{14}$ e $N = 2^{17}$ com 3 diferentes graus de correlação: $\alpha = 0.0, 1.0$ e 3.0 . Podemos notar que, em $\omega = 0$, independentemente do tamanho do sistema e do grau de correlação, nessa frequência, todos os comprimentos de localização coincidem. Com $\alpha = 0.0$ e 1.0

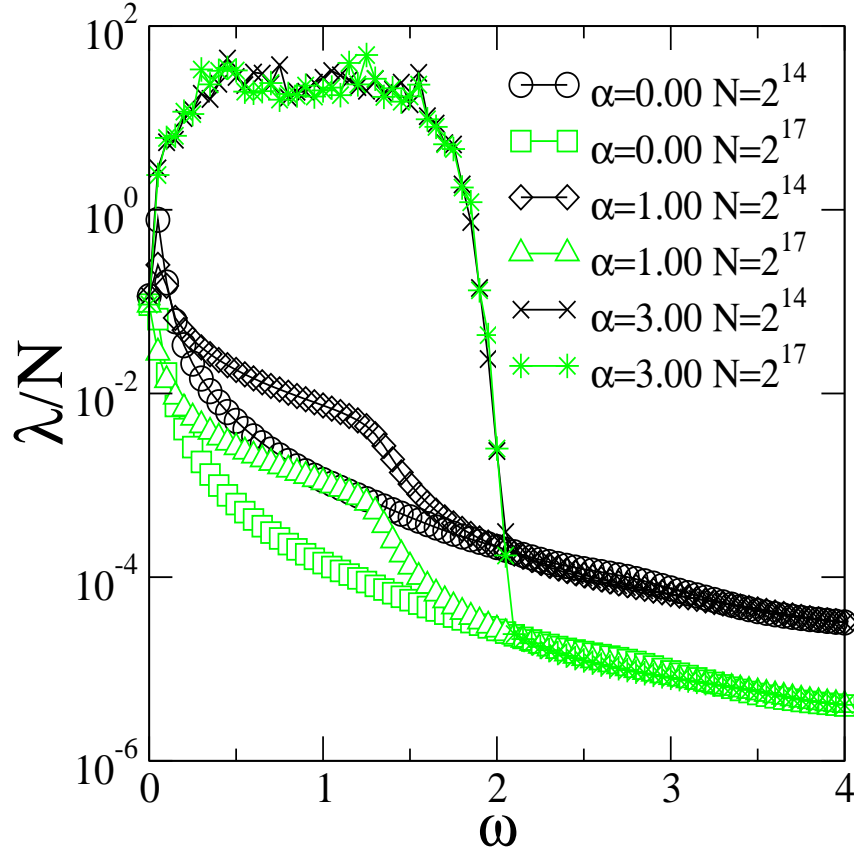


Figura 2.4: Comprimento de localização escalado λ/N versus ω para $\alpha = 0, 1$ e 3 . Os cálculos foram feitos para $N = 2^{14}$ e $N = 2^{17}$.

em $\omega \neq 0$ não notamos uma dependência de λ com N , portanto, para $\omega \neq 0$ esses graus de correlação não favorecem a existência de estados deslocalizados no sistema. Já para $\alpha = 3.0$, na faixa de $\omega < \omega_c \approx 1.6$, $\lambda \propto N$, indicando a existência de modos propagantes.

Com o objetivo de investigar em torno de qual valor do parâmetro α , surgem regiões de estados acústicos deslocalizados, calculamos o valor médio do comprimento de localização normalizado com frequência centrada em $\omega = 1$. Basicamente nos limitamos a calcular $\langle \lambda \rangle / N$ em um intervalo $[0.5, 1.5]$ de frequência. Dessa

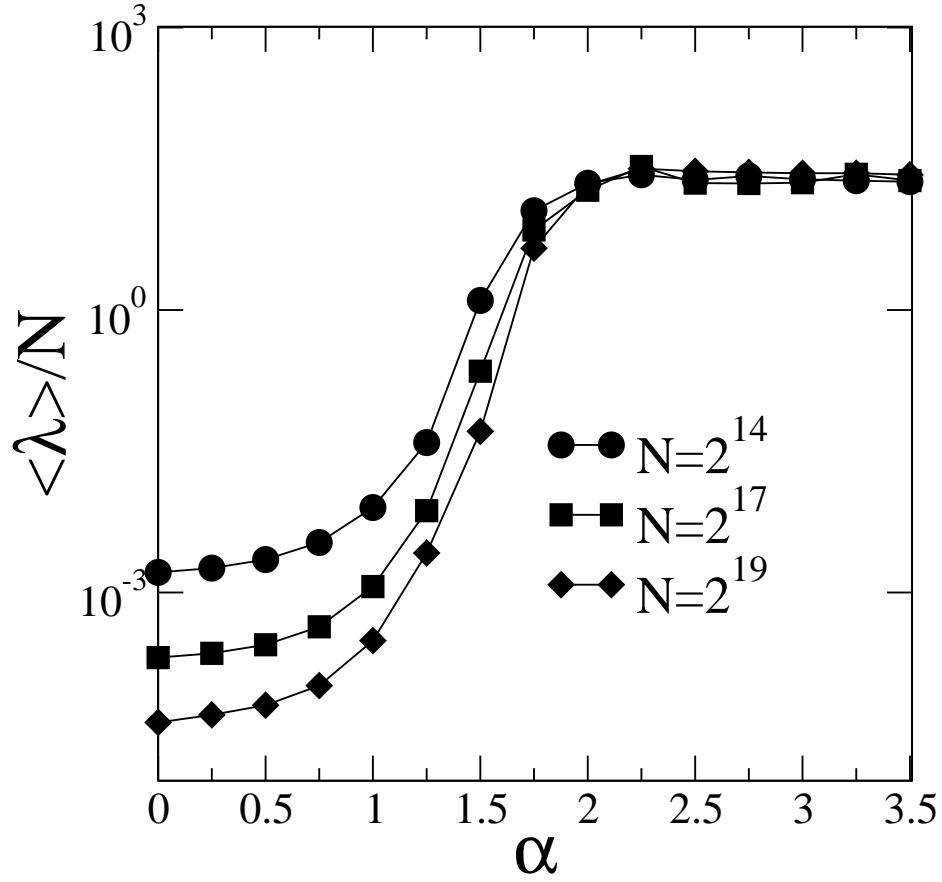


Figura 2.5: Comprimento de localização escalado médio $\langle \lambda \rangle / N$ versus ω para $\alpha = 0, 1$ e 3 .

maneira, definimos $\langle \lambda \rangle / N$ como a seguir:

$$\langle \lambda \rangle / N = \frac{1}{NN_f} \sum_{0.5}^{1.5} \lambda(\omega), \quad (2.8)$$

em que N_f é o número de estados com frequência ω dentro do intervalo de $[0.5, 1.5]$.

Usamos $N_f = 500$ e assim encontramos $\langle \lambda \rangle / N$ para diversos parâmetros de desordem α com valores entre 0 e 3 e discretização de tamanho $\Delta\alpha = 0.25$. Na figura 2.5 temos $\langle \lambda \rangle / N$ versus α para dois tamanhos de rede: $N = 2^{14}$ e $N = 2^{17}$. Claramente podemos notar que, a partir de $\alpha = \alpha_c \approx 1.75$ há

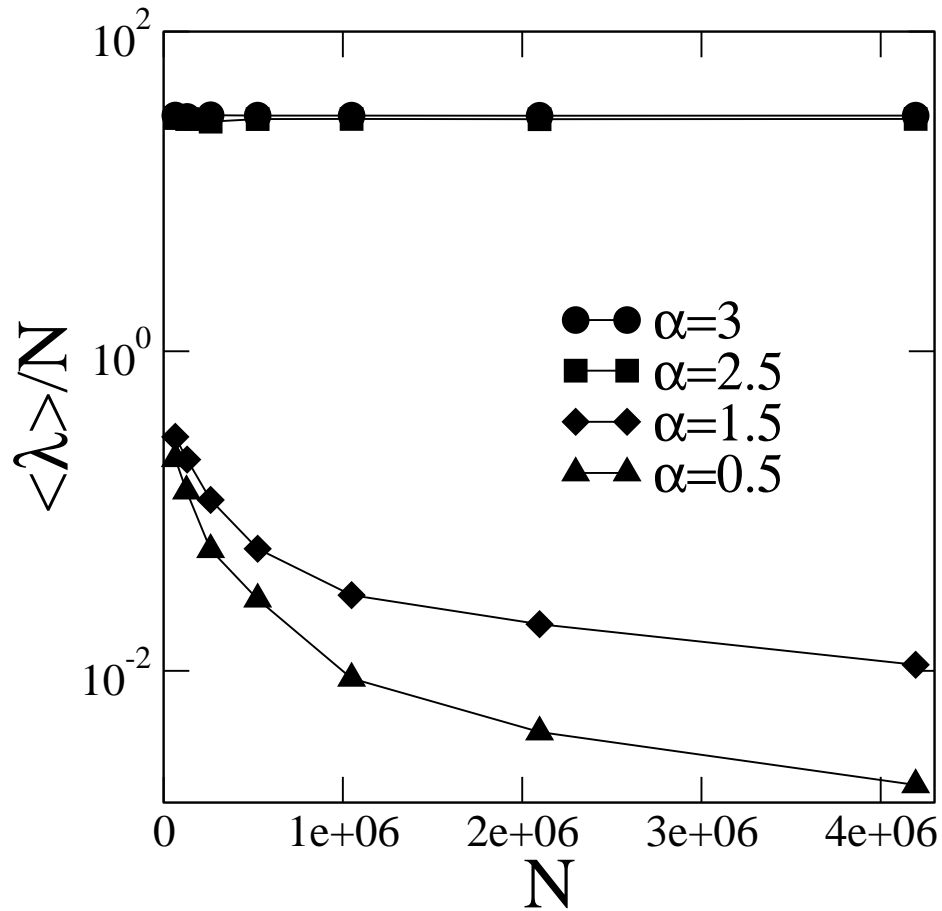


Figura 2.6: Lei de escala de $\langle \lambda \rangle / N$ para $\alpha = 0.5, 1.5, 2.5$ e 3 .

uma superposição das curvas, ou seja, $\lambda \propto N$. Essa investigação sugere que, para $N \rightarrow \infty$ o comprimento de localização normalizado $\lambda/N \rightarrow 0$, indicando a existência de estados deslocalizados para $\alpha > \alpha_c$, em que α_c é o parâmetro crítico de desordem.

A figura 2.6, exibe o resultado de $\langle \lambda \rangle / N$ versus N para $N = 2^{14}$ até $N = 2^{22}$ para diversos valores do parâmetro α . Dentro de nossa precisão numérica, encontramos $\langle \lambda \rangle \propto N^{0,98(2)}$ para forte correlação. Esse resultado indica que, no limite termodinâmico para forte correlação, existem estados estendidos.

Nem sempre a divergência do comprimento de localização garante a existência

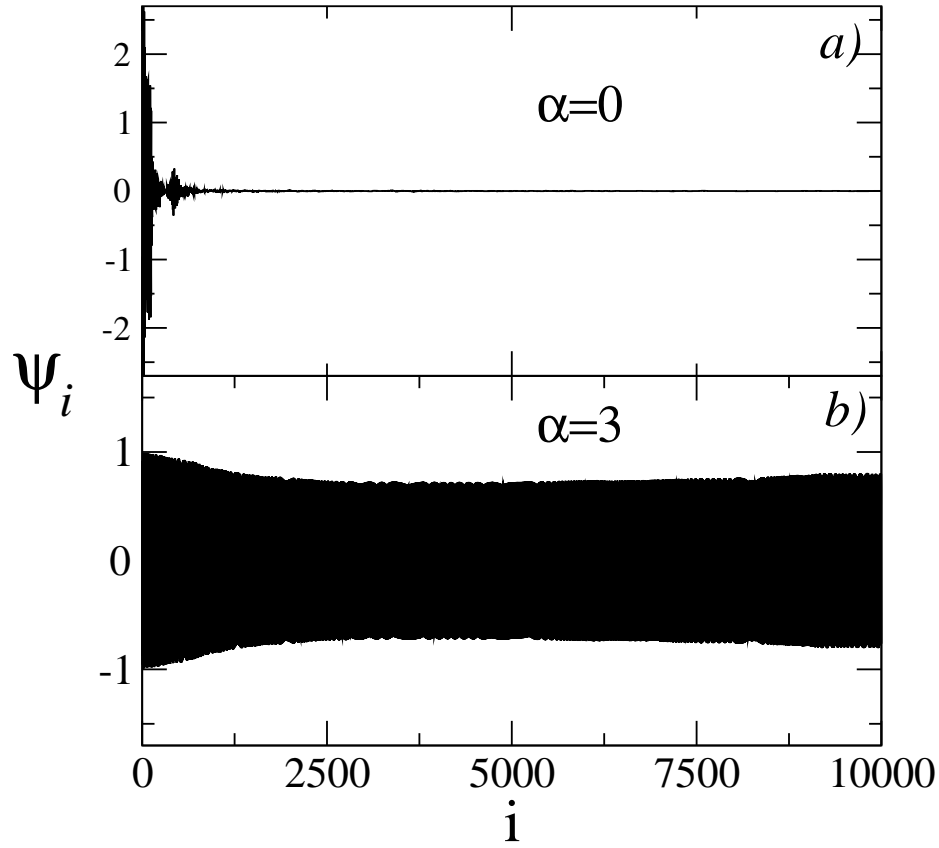


Figura 2.7: Amplitude da onda durante a propagação através do meio correlacionado para o tempo $t = 500000\Delta t$. A onda incidente é uma função seno com frequência $\omega = 1$. Em (a) consideramos o caso não correlacionado $\alpha = 0$ e (b) para o regime de forte correlação $\alpha = 3.0$.

de estados estendidos. Assim, resolvemos estudar através do método de diferença finita a dinâmica da propagação. Resolvemos numericamente a equação da onda acústica, considerando $\Delta x = 1$ e $\Delta t \leq \Delta x/100$, por questões de estabilidade numérica. Consideramos a incidência de uma onda senoidal $\psi(0,t) = \sin(\omega_0 t)$, com frequência $\omega_0 = 1$ ao longo de uma rede de tamanho $N = 2^{15}$, para dois parâmetros de desordem: $\alpha = 1.0$ e $\alpha = 3.0$. A figura 2.7 exibe o resultado de ψ no instante de tempo $t = 5000000\Delta t$ propagando em uma rede com $\alpha = 1.00$ parte a) da figura e em $\alpha = 3.0$ parte b) da figura. Claramente podemos observar

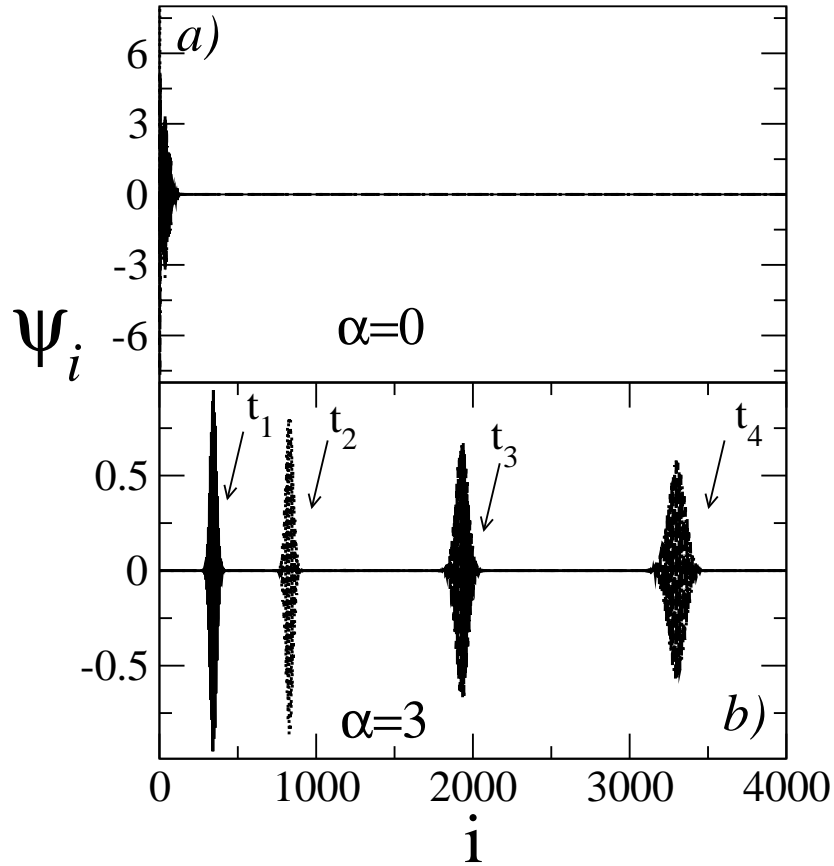


Figura 2.8: Amplitude da onda para os tempos $t_1 = 50000$, $t_2 = 100000$, $t_3 = 200000$ e $t_4 = 300000$, considerando a incidência de um pulso definido por $\Psi_0 = \exp[-(t - t_0)^2/2\sigma_t^2] \cos(\omega_0 t)$ com $\sigma_t = 20$ e frequência $\omega = 1.0$.

que, para o regime de forte correlação o meio se torna condutor, permitindo a propagação da onda acústica ao longo da cadeia, já para $\alpha = 1.0$ regime de baixa correlação, toda onda é refletida no início da rede.

Variamos também o tipo de onda incidente, consideramos a incidência de um pulso $\psi(0,t) = \exp[-(t-t_0)^2/2\sigma_t^2] \cos(\omega_0 t)$ com $\sigma_t = 1/\sigma_\omega = 20$ e $\omega = 1.0$. A figura 2.8 representa a propagação para instantes de tempo $t_1 = 50000\Delta t$, $t_2 = 100000\Delta t$, $t_3 = 200000\Delta t$ e $t_4 = 300000\Delta t$ a parte a) para um meio em que $\alpha = 0.0$ e b) para $\alpha = 3.0$. Notamos que, para $\alpha = 0.0$, situação de desordem sem correlação, não

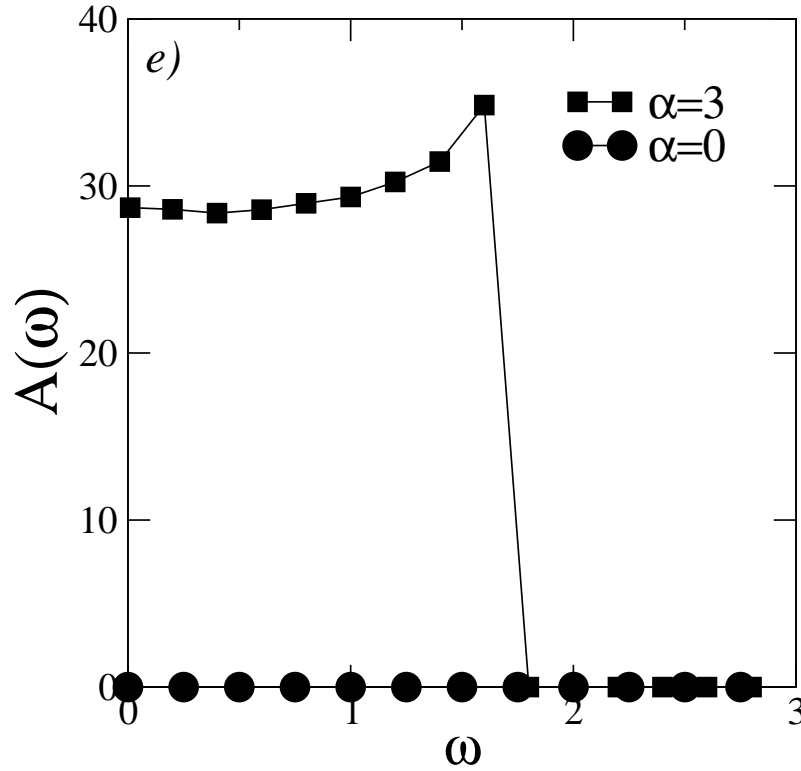


Figura 2.9: Intensidade espectral $A(\omega)$ de ψ na posição $L = 20000$ calculados usando 20 realizações de desordem.

há propagação, como já esperávamos, e para $\alpha = 3.0$ a onda acústica propaga-se no meio fortemente correlacionado, corroborando o resultado da onda incidente senoidal.

Buscando através da dinâmica do sistema, encontrar a frequência crítica ω_c que separa os modos propagantes dos localizados, calculamos a intensidade espectral $A(\omega)$ da incidência de vários pulsos de onda em uma posição fixa na rede. A função $A(\omega) = (1/2)|\psi_L(\omega)|^2$ em que $\psi(\omega)$ é obtida tomando a transformada de Fourier de $\psi(x,t)$ a uma distância $L = 20000$ em redes de tamanho $N = 2^{15}$. Consideramos 20 configurações computacionais das redes, para obter $A(\omega)$.

A figura 2.9 exhibe o resultado da intensidade A versus ω para dois graus de

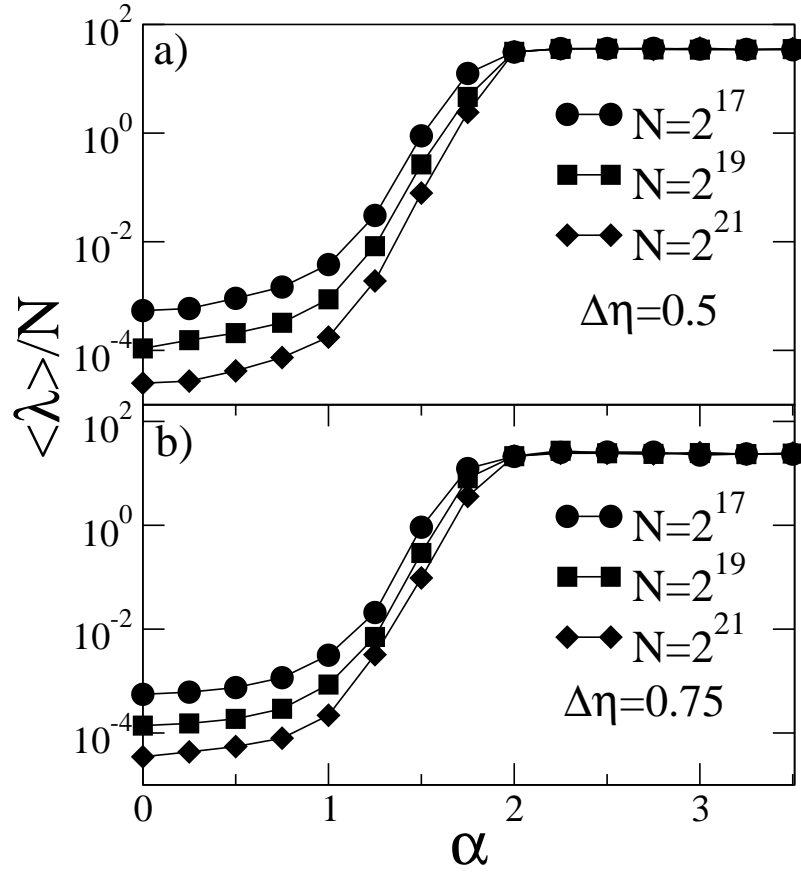


Figura 2.10: a) b) Comprimento de localização escalado médio em uma janela de frequência $[0.5, 1.5]$ versus α para $\Delta\eta = 0.5$ e $\Delta\eta = 0.75$.

desordem dos sistema, $\alpha = 0.0$ e $\alpha = 3.0$. Incidimos vários pulsos com frequências dentro do intervalo $[0, 3]$ e calculamos a intensidade espectral na posição $L = 20000$. Podemos notar que todos os modos com frequência $\omega > \omega_c$ decaem e o meio se comporta como um filtro, transmitindo apenas frequências a baixo de $\omega \approx 1.6$. Esses resultados estão em total concordância com os obtidos anteriormente, através do método do cálculo do comprimento de localização.

Para finalizar nossos estudos, consideramos o efeito da largura de desordem sobre o parâmetro crítico α_c . Na figura 2.10 temos $\langle \lambda \rangle / N$ para $N = 2^{17}$, $N = 2^{19}$ e $N = 2^{21}$ e distintas largura de desordem $\Delta\eta = 0.5$ e $\Delta\eta = 0.75$.

Encontramos novamente que $\alpha_c = 2$, mostrando que a largura da desordem não influencia no valor do parâmetro α_c , ou seja, α_c não depende de $\Delta\eta$.

Em suma, vimos que o efeito de correlação na distribuição das constantes elásticas do meio, influenciam no comportamento da propagação acústica. Considerando sistemas que possuem densidade espectral tipo lei de potência $S(k) \propto 1/k^\alpha$, nossos resultados numéricos indicam que, para forte correlação, ou seja, $\alpha > 2$ existem estados propagantes e para $\alpha < 2$ todos os estados são localizados. Nossa metodologia mostrou a existência de uma frequência crítica separando estados localizados e deslocalizados bem como mostrou que o valor crítico $\alpha_c = 2$ independe da força da desordem $\Delta\eta_i$. Os principais resultados desse capítulo foram publicados no *Journal of Physics : Condensed Matter* (ver anexo ou a referência [46]).

Capítulo 3

Localização de Ondas Acústicas em Potenciais com Modulação Aperiódica

Sequências aperiódicas (quasi-periódicas), desde a década de 80, têm despertado grande interesse na comunidade científica por apresentarem características intermediárias entre sistemas periódicos e desordenados. Em sequências quasi-periódicas, não há simetria translacional, essa característica as tornam semelhantes a sequências desordenadas. No entanto, esses sistemas são gerados seguindo regras determinísticas o que contraria o caso desordenado. As sequências Thue-Morse, Fibonacci e potenciais com modulação aperiódica, são sequências que seguem regras determinísticas.

M. A. Azbel [47], em 1979, utilizando o modelo de Kromig-Penney mostrou que potenciais incomensuráveis podem fornecer a existência de estados localizados e estendidos separados por um *mobility-edge* para sistemas unidimensionais. No

ano seguinte, J. B. Sokoloff [48], fundamentado nos trabalhos de Azbel [47] e Aubry, estudou a localização eletrônica em uma rede quasi-periódica com o uso do modelo de *tight-binding*. Assim, a equação de Scrodinger com potencial *on-site* $V_n = V_0(\cos(qn))$ em que q é escolhido como sendo um múltiplo de π , tornando o potencial incomensurável. Um trabalho posterior de Soukoulis e Economou [49], com o estudo do coeficiente de transmissão e a dependência espacial dos auto-estados, mostrou que até mesmo sistemas unidimensionais poderiam apresentar transição de Anderson tendo potencial incomensurável.

Em 1988, M. Griniasty e S. Fishman [6–8; 50] utilizaram o modelo de *tight-binding* com potencial pseudo-aleatório, para investigar a natureza da localização eletrônica em uma dimensão. No modelo de *tight-binding*, os autores consideraram o potencial *on-site* $V_n = \lambda \cos(\pi\alpha|n|^\nu)$ com α sendo um número irracional, ou seja, um potencial incomensurável, cuja fase da modulação segue uma lei de potência em n . Através de cálculos numéricos e por método perturbativo para $\lambda \ll 1$ encontraram o comprimento de localização para diferentes valores de ν .

Os resultados obtidos nessas investigações são que para $\nu \gg 2$ todos os estados são localizados e com $0 < \nu \leq 1$ existem estados estendidos. Nesse capítulo vamos estudar os efeitos de distribuições de elasticidade aperiódicas sobre as propriedades acústicas de sistemas unidimensionais. Para gerar sequências de constantes elásticas aperiódicas vamos seguir as referências [6–8; 50] e definir η_i usando uma função senoidal cuja fase varia com uma lei de potência. Após apresentar o modelo em detalhes vamos utilizar os métodos de matriz de transferência de diferença finita para estudar a propagação de modos elásticos.

3.1 Modelo

Vimos que, potenciais aperiódicos podem localizar ou deslocalizar as funções eletrônicas ao longo de cadeias unidimensionais. Efeitos semelhantes têm sido observados em sistemas óticos e cadeias vibracionais [51]. Motivados por essas observações, vamos investigar os efeitos desse potencial sobre os estados acústicos.

Para introduzir uma sequência aperiódica, assumimos que as constantes elásticas são geradas da forma a seguir:

$$\eta_i = \eta_0 + \cos(\beta\pi i^\nu). \quad (3.1)$$

Essa regra determina um potencial, cuja fase do termo cossenoidal segue uma lei de potência, ou seja, $\phi \propto i^\nu$, em que i representa a posição ao longo da cadeia. O termo ν controla o grau de aperiodicidade do sistema. Em nossos estudos, vamos considerar que $\eta_0 = 2$, evitando valores negativos e nulos na distribuição das constantes elástica do meio. Vamos denotar por α , a relação $\alpha = \beta\pi$ e consideraremos que $\alpha = 0.1$ tornando, por fim, β um número irracional. Um gráfico de η_i versus i é mostrado na figura 3.1. Para β racional e $\nu = 1$, tem-se na equação 3.1 um potencial cristalino. Podemos também observar que, para $\nu = 0$, todas as constantes elásticas do meio, assumem o mesmo valor.

Nosso interesse é verificar a existência de transição de Anderson em uma dimensão para ondas acústicas propagando-se em um potencial gerado pela equação 3.1. Com essa finalidade vamos proceder de forma semelhante ao estudo feito no capítulo anterior, no qual investigamos a natureza dos estados acústicos através

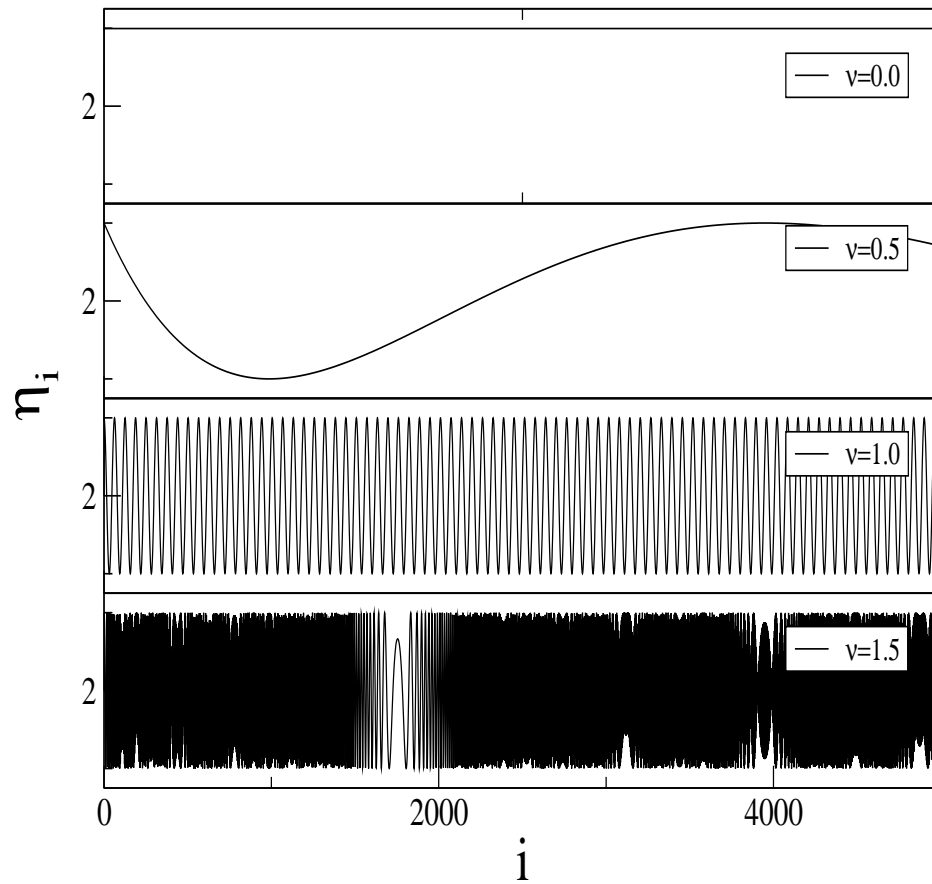


Figura 3.1: Potencial aperiódico gerado pela equação 3.1 para uma rede de tamanho $N = 2^{14}$ com $\alpha = 0.1$ e $V_0 = 2$ para $\nu = 0.0$, $\nu = 0.5$, $\nu = 1.0$ e $\nu = 1.5$.

do cálculo do comprimento de localização e da dinâmica no sistema.

3.2 Resultados

Vimos a utilidade do cálculo do comprimento de localização em capítulos passados. Com a obtenção do comprimento de localização investigamos a natureza dos estados acústicos em meios com correlação de longo alcance, semelhantemente utilizamos os mesmos procedimentos para investigar a natureza dos estados acús-

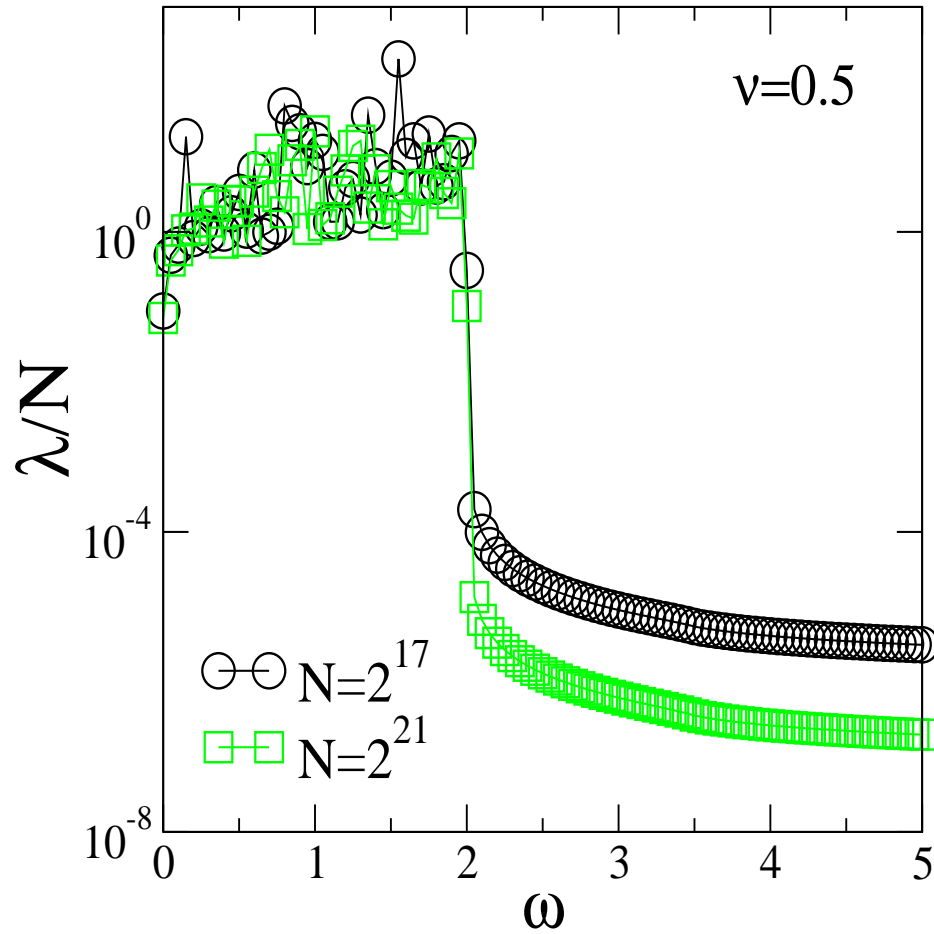


Figura 3.2: Comprimento de localização escalado λ/N versus ω para $\nu = 0.5$.

ticos em meios aperiódicos. Calculamos $\lambda(\omega)$ do sistema para diversos graus de aperiodicidade ν . A figura 3.2 mostra o comportamento de λ/N em função da frequência ω para $\nu = 0.5$ com sistemas de tamanhos: $N = 2^{17}$ e $N = 2^{21}$. Observe que existe uma mudança da relação entre as curvas de $N = 2^{17}$ e $N = 2^{21}$ para $\omega_c \approx 2$. De forma análoga, ocorre no gráfico representado pela figura 3.3 que também representa o comportamento de λ/N mas tendo $\nu = 1.0$. Em ambos regimes de aperiodicidade ν , $\nu = 0.5$ e $\nu = 1.0$, o comprimento de localização escalado independe do tamanho do sistema para frequências $\omega < 2$, ou seja, $\lambda \propto N$. Essas

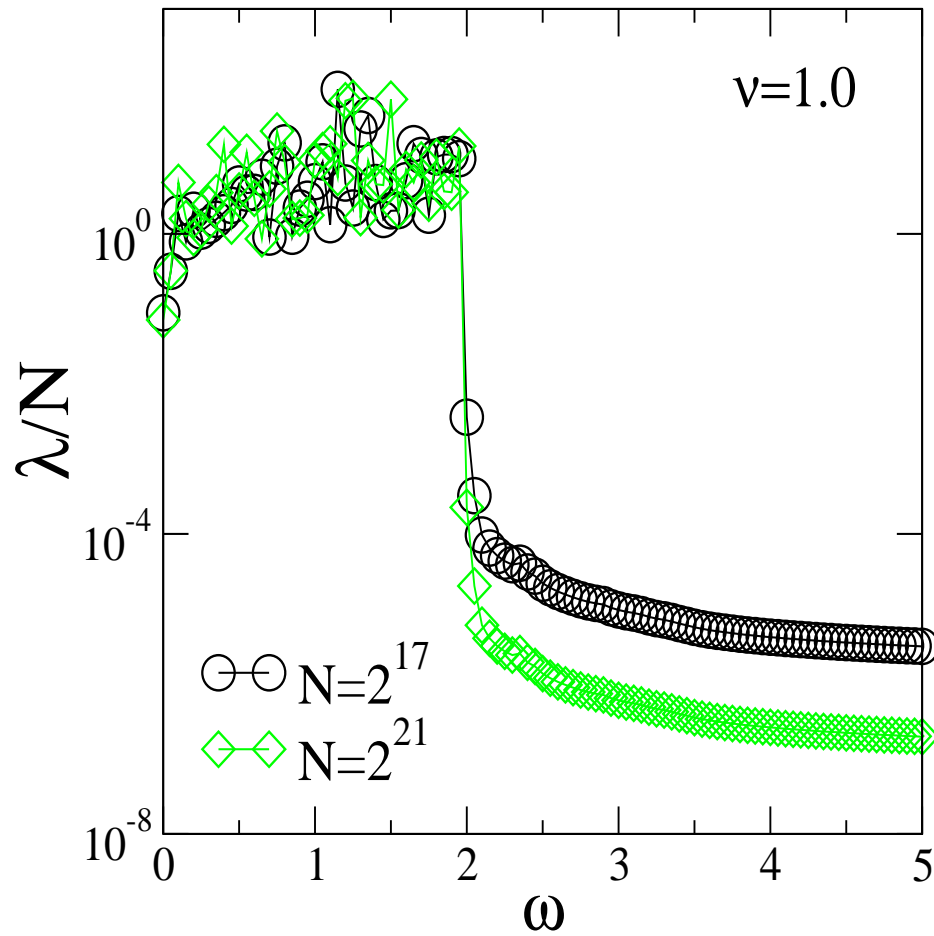


Figura 3.3: Comprimento de localização escalado λ/N versus ω para $\nu = 1.0$.

observações sugerem que, no limite termodinâmico $\lambda \rightarrow \infty$ indicando a existência de estados estendidos para $\omega < 2$.

Agora vejamos uma fato interessante dessa sequência aperiódica. Calculamos o comprimento de localização para os mesmo tamanhos de sistemas das figuras 3.2 e 3.3, mas agora consideramos $\nu > 1$. As figuras 3.4 e 3.5 representam o caso em que $\nu = 1.5$ e $\nu = 2.0$. Claramente podemos notar que algo diferente ocorre ao compararmos esses gráficos com os das figuras 3.2 e 3.3. As curvas coincidem apenas em $\omega = 0$ o que indica que no limite termodinâmico para $\omega \neq 0$ todos

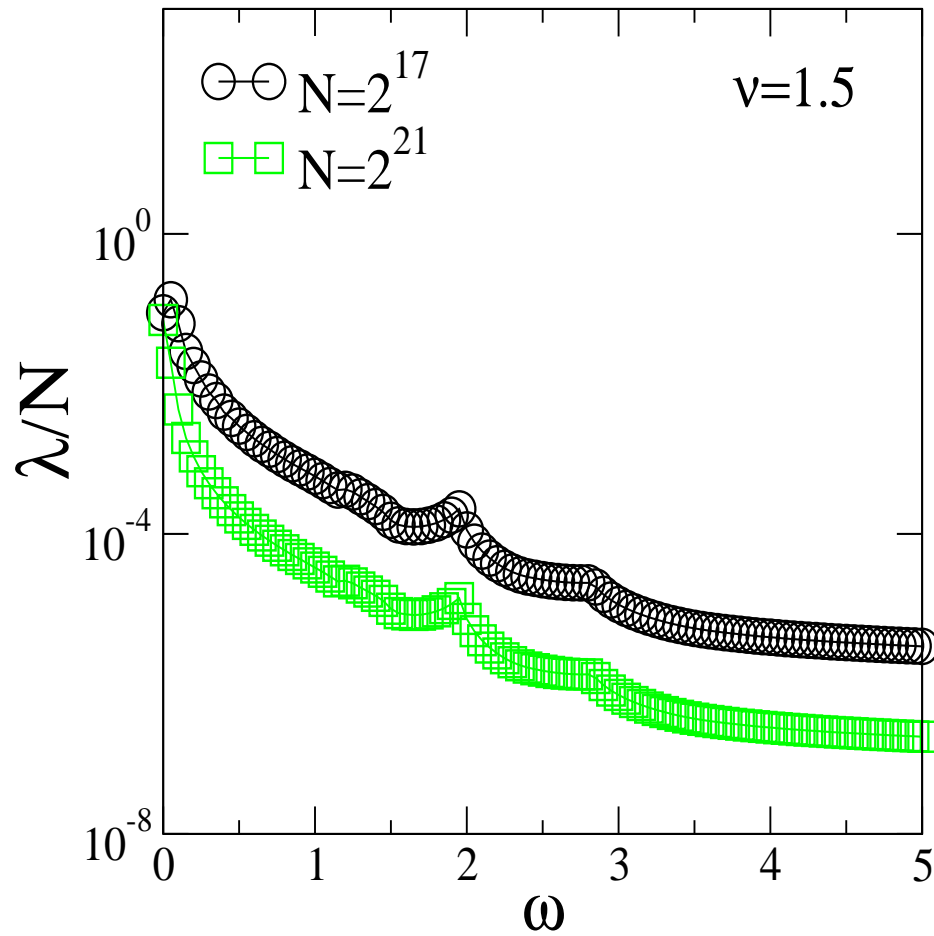


Figura 3.4: Comprimento de localização escalado λ/N versus ω para $\nu = 1.5$.

os estados são localizados, resultado completamente diferente da situação em que $\nu = 0.5$ e $\nu = 1.0$.

Já sabemos que a depender do grau de aperiodicidade, ou seja, do valor assumido por ν , existe ou não estados estendidos na rede aperiódica. O que desejamos é conhecer o valor de ν que separa esses sistemas tão diferentes. Com essa finalidade, vamos novamente recorrer ao cálculo do comprimento de localização médio normalizado, definido pela equação 3.2, para investigarmos a dependência da natureza dos estados acústicos com o grau de aperiodicidade do meio. Denotando o

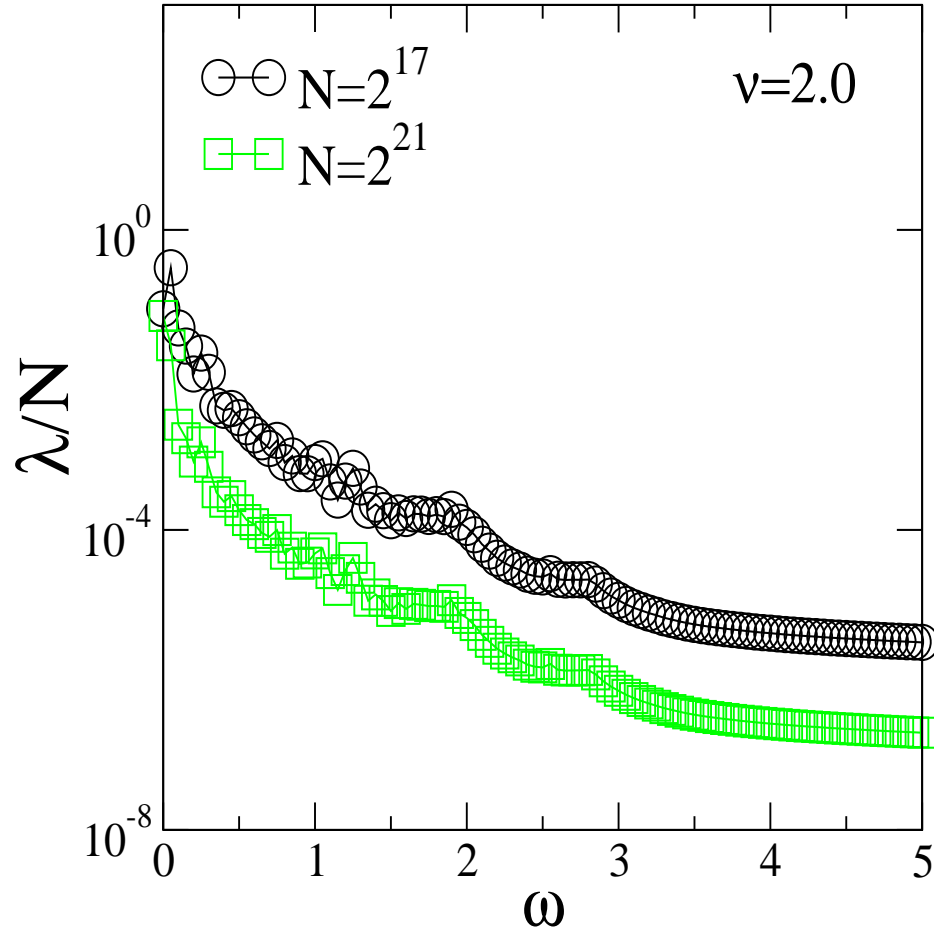


Figura 3.5: Comprimento de localização escalado λ/N versus ω para $\nu = 2.0$.

número de estados acústicos por N_f , definimos $\langle \lambda \rangle / N$:

$$\langle \lambda \rangle / N = \frac{1}{NN_f} \sum_{0.5}^{1.5} \lambda(\omega). \quad (3.2)$$

Considerando a equação 3.2 calculamos $\langle \lambda \rangle / N$ para $N = 2^{17}$ e $N = 2^{21}$ em que N representa o tamanho do sistema. O cálculo do comprimento de localização médio $\langle \lambda \rangle$, foi realizado calculando a média de $\lambda(\omega)$ computando $N_f = 500$ estados com frequência ω com valores dentro do intervalo $[0.5, 1.5]$.

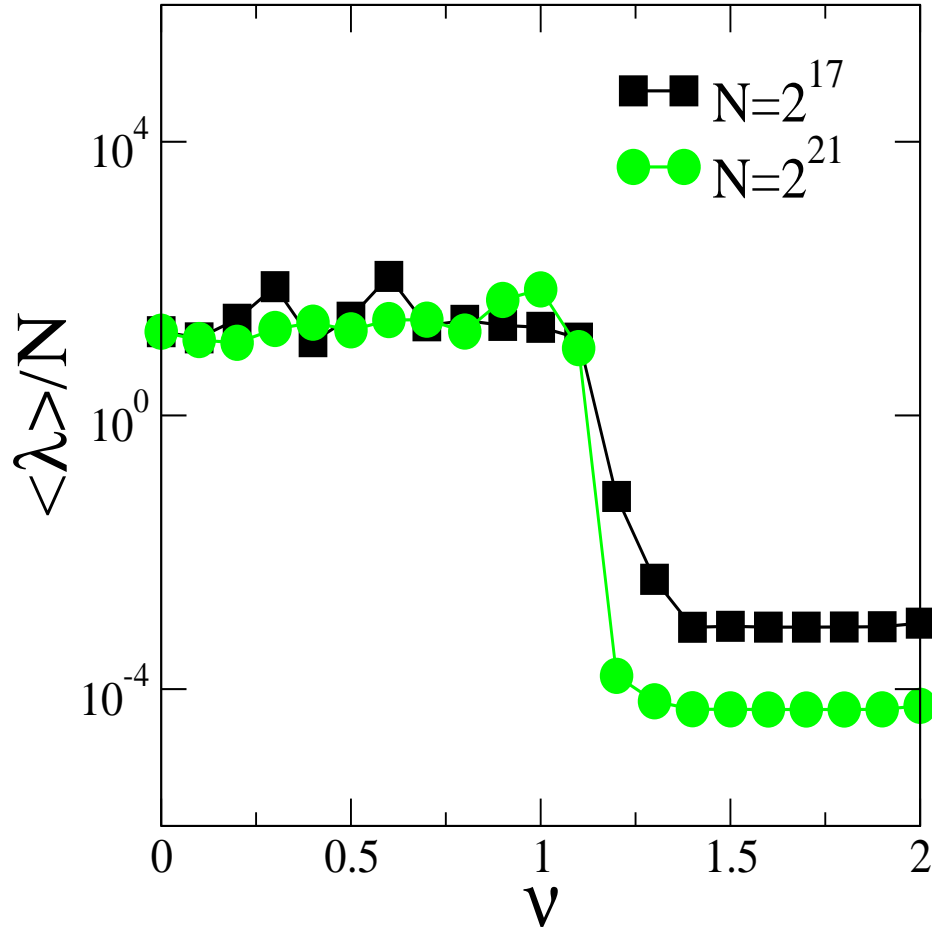


Figura 3.6: Comprimento de localização escalado médio $\langle \lambda \rangle / N$ versus ν para $N = 2^{17}$ e $N = 2^{21}$.

O gráfico 3.6 mostra a dependência de $\langle \lambda \rangle / N$ com N e com o grau de aperiodicidade do meio ν . Claramente podemos notar que para $\nu < 1$, $\langle \lambda \rangle / N$ independe do tamanho do sistema, já para $\nu > 1$ a função $\langle \lambda \rangle / N$ decresce com o aumento do tamanho do sistema, sinalizando a existência de uma transição de Anderson em $\nu = 1$. Nossos resultados sugerem que para $\nu < 1$ existem estados deslocalizados em um intervalo de frequências e para $\nu > 1$ todos os estados para $\omega \neq 0$ são localizados.

Além dessa análise através da matriz de transferência, vamos aplicar o for-

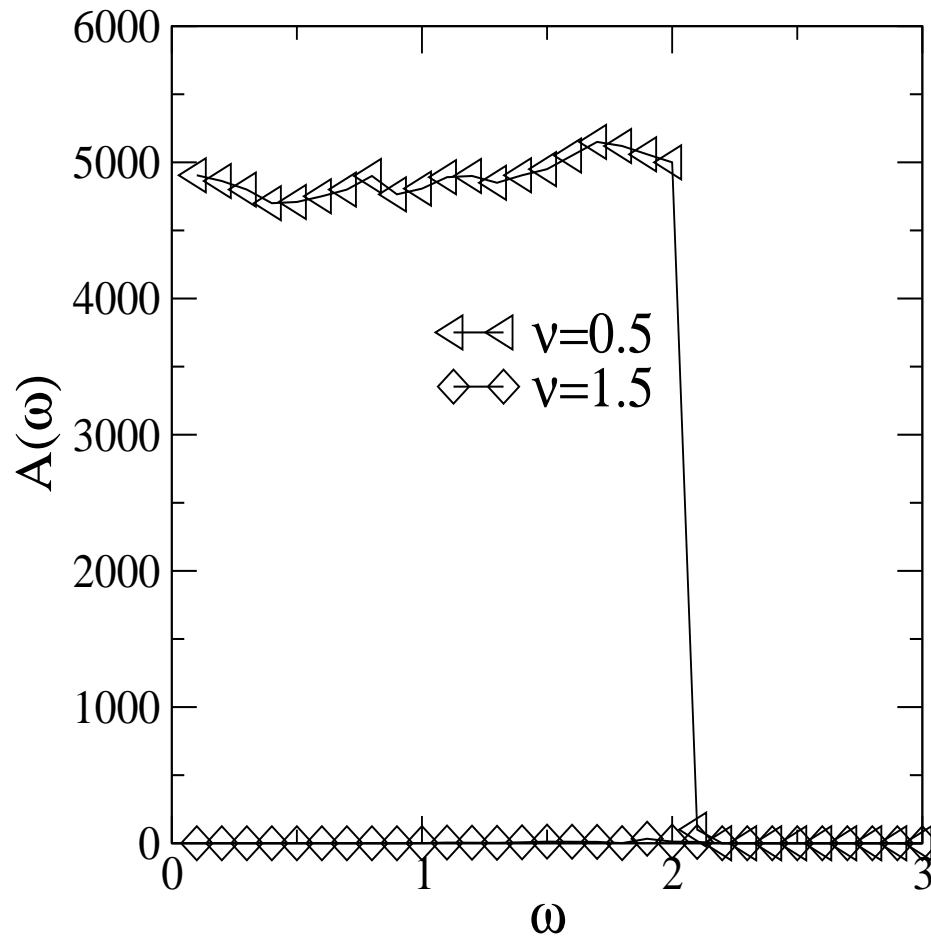


Figura 3.7: Intensidade espectral $A(\omega)$ de ψ na posição $L = 20000$.

malismo de diferença finita para estudar diretamente a propagação de um pulso inicialmente localizado no início da cadeia. O formalismo numérico é exatamente o mesmo que foi utilizado no capítulo 2. Na figura 3.7 mostramos $A(\omega) \times \omega$ para um sistema aperiódico $\nu = 0.5$. O tamanho da rede foi $N = 2^{15}$ e $\Delta t < 1/100$. O formalismo dinâmico de diferença finita fornece qualitativamente o mesmo resultado da matriz de transferência, estados acústicos estendidos para $\omega < 2$. Portanto, nosso formalismo numérico fornece forte indícios que potenciais aperiódicos podem induzir propagação livre de modos elásticos em sistemas unidimensionais. Os

principais resultados desse capítulo foram publicados no *The European Physical Journal B* (ver anexo ou a referência [\[52\]](#)).

Capítulo 4

Conclusões e perspectivas

Nessa dissertação, estudamos os efeitos de duas classes distintas de distribuições de elasticidades não periódicas sobre as propriedades de transmissão acústica de sistemas unidimensionais. Nossa metodologia numérica baseou-se na solução numérica da equação de onda clássica através dos métodos de matriz transferência e de diferença finita. Através desses métodos tivemos a possibilidade de estudar duas grandes classes de sistemas não periódicos : sistemas desordenados e sistemas determinísticos aperiódicos. No caso desordenado, consideramos sistemas com correlações de longo alcance na distribuição de elasticidade. A constante elástica efetiva do meio foi gerada através do traço de um movimento Browniano fracionário, que possui densidade espectral $S(k) = k^{-\alpha}$. Esse tipo de sequência aleatória foi amplamente estudado em outros sistemas físicos de interesse. Foi também demonstrado numericamente que distribuições de elasticidade que seguem o traço de um movimento Browniano fracionário modificam drasticamente as propriedades de transporte elástico em baixa dimensionalidade. Em contraste com o caso não correlacionado, onde apenas o modo de frequência $\omega = 0$ é propa-

gante, encontramos fortes indícios que correlações de longo alcance podem induzir uma faixa finita de frequências propagantes. De fato nossos resultados numéricos apontam para uma verdadeira transição de estados acústicos não propagantes (localizados) para estados propagantes (estendidos). Esses resultados apresentados no capítulo 2, foram publicados no *Journal of Physics : Condensed Matter* (ver anexo ou a referência [46]).

No capítulo 3 estudamos sistemas aperiódicos, uma outra importante classe de sistema unidimensional com elasticidade não periódica. A metodologia empregada foi exatamente a mesma, solução da equação de onda elástica clássica através de matriz de transferência e diferença finita. As sequências de constantes elásticas aperiódicas foram geradas usando uma função cossenoidal cuja fase varia com uma lei de potência. Nossos resultados numéricos novamente apresentam que, dependendo do grau de aperiodicidade do meio podemos induzir estados propagantes mesmo na região de frequência alta $\omega \gg 0$.

Uma questão importante nesses temas, consiste no entendimento do papel de outros tipos de correlações na distribuição de elasticidade, bem como no papel da dimensão topológica nesse tipo de transição. Outra classe de sistemas não periódicos com correlações são os sistemas diluídos [30; 53]. Recentes estudos têm mostrado que sistemas eletrônicos com desordem diluída podem apresentar uma verdadeira transição metal-isolante em $d = 2$. Essas propriedades não usuais associadas à desordem diluída têm atraído consideravelmente o interesse da comunidade sobre esse tipo de correlação. A generalização desses estudos para $d > 1$ consiste num desafio acadêmico importante. Consideremos essas questões como perspectivas futuras

Referências

- [1] P. W. Anderson. Absence of diffusion in certain random lattices. *Phys. Rev.*, 109(5):1492–1505, Mar 1958.
- [2] B. Kramer and A. MacKinnon. Localization: theory and experiment. *Reports on Progress in Physics*, 56:1469, 1993.
- [3] David H. Dunlap, H-L. Wu, and Philip W. Phillips. Absence of localization in a random-dimer model. *Phys. Rev. Lett.*, 65(1):88–91, Jul 1990.
- [4] Francisco A. B. F. de Moura and Marcelo L. Lyra. Delocalization in the 1d anderson model with long-range correlated disorder. *Phys. Rev. Lett.*, 81(17):3735–3738, Oct 1998.
- [5] F. M. Izrailev and A. A. Krokhin. Localization and the mobility edge in one-dimensional potentials with correlated disorder. *Phys. Rev. Lett.*, 82(20):4062–4065, May 1999.
- [6] Meir Griniasty and Shmuel Fishman. Localization by pseudorandom potentials in one dimension. *Phys. Rev. Lett.*, 60(13):1334–1337, Mar 1988.
- [7] S. Das Sarma, Song He, and X. C. Xie. Mobility edge in a model one-dimensional potential. *Phys. Rev. Lett.*, 61(18):2144–2147, Oct 1988.

-
- [8] D. J. Thouless. Localization by a potential with slowly varying period. *Phys. Rev. Lett.*, 61(18):2141–2143, Oct 1988.
- [9] D. Vollhardt. Localization effects in disordered systems. *Advances in Solid State Physics*, 27:63–84, 1987.
- [10] Ayoub Esmailpour, M. Esmailpour, Ameneh Sheikhan, M. Elahi, M. Reza Rahimi Tabar, and Muhammad Sahimi. Localization properties of acoustic waves in the random-dimer media. *Phys. Rev. B*, 78(13):134206, Oct 2008.
- [11] Alireza Bahraminasab, S. Mehdi Vaez Allaei, Farhad Shahbazi, Muhammad Sahimi, M. D. Nirry, and M. Reza Rahimi Tabar. Renormalization group analysis and numerical simulation of propagation and localization of acoustic waves in heterogeneous media. *Phys. Rev. B*, 75(6):064301, Feb 2007.
- [12] Reza Sepehrinia, Alireza Bahraminasab, Muhammad Sahimi, and M. Reza Rahimi Tabar. Dynamic renormalization group analysis of propagation of elastic waves in two-dimensional heterogeneous media. *Phys. Rev. B*, 77(1):014203, Jan 2008.
- [13] F. Shahbazi, Alireza Bahraminasab, S. Mehdi Vaez Allaei, Muhammad Sahimi, and M. Reza Rahimi Tabar. Localization of elastic waves in heterogeneous media with off-diagonal disorder and long-range correlations. *Phys. Rev. Lett.*, 94(16):165505, Apr 2005.
- [14] Muhammad Sahimi S M Vaez Allaei and M Reza Rahimi Tabar. Propagation of acoustic waves as a probe for distinguishing heterogeneous media with short-range and long-range correlations. *J. Stat. Mech.*, 2008(P03016).
-

-
- [15] J. D. Joannopoulos, S. G. Johnson, R. D. Meade, and J. N. Winn. *Photonic Crystals: Molding the Flow of Light*. Princeton Univ. Press, 2nd edition, 2008.
- [16] R. C. McPhedran, B. Platts, N. V. Movchan and A. B. Movchan. Two-dimensional phononic crystals and scattering of elastic waves by an array of voids. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 58(2026), 2002.
- [17] S. M. Cohen, J. Machta, T. R. Kirkpatrick, and C. A. Condat. Crossover in the anderson transition: Acoustic localization with a flow. *Phys. Rev. Lett.*, 58(8):785–788, Feb 1987.
- [18] Varouzhan Baluni and Jorge Willemsen. Transmission of acoustic waves in a random layered medium. *Phys. Rev. A*, 31(5):3358–3363, May 1985.
- [19] D. Sornette. Anderson localization and quantum chaos in acoustics. *Physica B: Condensed Matter*, 219-220:320–323, 1996.
- [20] Shanjin He and J. D. Maynard. Detailed measurements of inelastic scattering in anderson localization. *Phys. Rev. Lett.*, 57(25):3171–3174, Dec 1986.
- [21] Sajeev John. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices. *Phys. Rev. Lett.*, 58(23):2486–2489, Jun 1987.
- [22] Stephen T. and Jerry B. Marion. *Classical Dynamics of Particles and Systems*. Brooks Cole, 2003.
- [23] Neil W. Ashcroft and N. David Mermin. *Solid State Physics*. Princeton Univ. Press, 2nd edition, 2008.
-

-
- [24] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan. Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 42(10):673–676, Mar 1979.
- [25] D. J. Thouless. Electrons in disordered systems and the theory of localization. *Physics Reports*, 13(3):93 – 142, 1974.
- [26] Richard Zallen. *The Physics of Amorphous Solids*. Wiley VCH, 1998.
- [27] H.-L. Wu and Philip Phillips. Polyaniline is a random-dimer model: A new transport mechanism for conducting polymers. *Phys. Rev. Lett.*, 66(10):1366–1369, Mar 1991.
- [28] S.N. Evangelou and D.E. Katsanos. Super-diffusion in random chains with correlated disorder. *Phys. Lett. A*, 164:456, 1992.
- [29] J C Flores and M Hilke. Absence of localization in disordered systems with local correlation. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 26:L1255, 1993.
- [30] M Hilke. Experimental evidence of delocalization in correlated disorder superlattices. *J. Phys. A: Math. Gen.*, 27:4773, 1994.
- [31] F. C. Lavarda, M. C. dos Santos, D. S. Galvão, and B. Laks. Near resonant scattering from nonsymmetric dimers: Applications to substituted polyanilines. *Phys. Rev. Lett.*, 73(9):1267–1270, Aug 1994.
- [32] J. Heinrichs. Localization, antilocalization, and delocalization in one-dimensional disordered lattices. *Phys. Rev. B*, 51(9):5699–5710, Mar 1995.
-

-
- [33] V. Bellani, E. Diez, R. Hey, L. Toni, L. Tarricone, G. B. Parravicini, F. Domínguez-Adame, and R. Gómez-Alcalá. Experimental evidence of delocalized states in random dimer superlattices. *Phys. Rev. Lett.*, 82(10):2159–2162, Mar 1999.
- [34] F. A. B. F. de Moura. Transição metal-isolante em cadeias com desordem correlacionada. *Dissertação de Mestrado Departamento de Física - UFAL.*, 1999.
- [35] F. M. Izrailev and A. A. Krokhin. Localization and the mobility edge in one-dimensional potentials with correlated disorder. *Phys. Rev. Lett.*, 82(20):4062–4065, May 1999.
- [36] U. Kuhl, F. M. Izrailev, A. A. Krokhin, and H.-J. Stöckmann. Experimental observation of the mobility edge in a waveguide with correlated disorder. *Appl. Phys. Lett.*, 77:633, 2000.
- [37] F. Domínguez-Adame, V. A. Malyshev, F. A. B. F. de Moura, and M. L. Lyra. Bloch-like oscillations in a one-dimensional lattice with long-range correlated disorder. *Phys. Rev. Lett.*, 91(19):197402, Nov 2003.
- [38] F. A. B. F. de Moura, M. D. Coutinho-Filho, E. P. Raposo, and M. L. Lyra. Delocalization and spin-wave dynamics in ferromagnetic chains with long-range correlated random exchange. *Phys. Rev. B*, 66(1):014418, Jul 2002.
- [39] Benoit B. Mandelbrot and John W. Van Ness. Fractional brownian motions, fractional noises and applications. *SIAM Review*, 10(4):pp. 422–437, 1968.
-

-
- [40] B.B. Mandelbrot. *The Fractal Geometry of Nature*. W.H. Freeman and Company, 1982.
- [41] N. P. Greis and H. S. Greenside. Implication of a power-law power-spectrum for self-affinity. *Phys. Rev. A*, 44(4):2324–2334, Aug 1991.
- [42] T. Higuchi. Approach to an irregular time series on the basis of the fractal theory. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 31(2):277 – 283, 1988.
- [43] A. R. Osborne and A. Provenzale. Finite correlation dimension for stochastic systems with power-law spectra. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 35(3):357 – 381, 1989.
- [44] T. Higuchi. Relationship between the fractal dimension and the power law index for a time series: A numerical investigation. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 46(2):254 – 264, 1990.
- [45] Christopher G. Fox. Empirically derived relationships between fractal dimension and power law form frequency spectra. *Pure and Applied Geophysics*, 131:211–239, 1989. 10.1007/BF00874488.
- [46] A E B Costa and F A B F de Moura. Absence of localized acoustic waves in a scale-free correlated random system. *J. Phys: Condens. Matter*, 23:065101, 2011.
- [47] M. Ya. Azbel. Quantum particle in one-dimensional potentials with incommensurate periods. *Phys. Rev. Lett.*, 43(26):1954–1957, Dec 1979.
- [48] J. B. Sokoloff. Electron localization in crystals with quasiperiodic lattice potentials. *Phys. Rev. B*, 22(12):5823–5828, Dec 1980.
-

-
- [49] C. M. Soukoulis and E. N. Economou. Localization in one-dimensional lattices in the presence of incommensurate potentials. *Phys. Rev. Lett.*, 48(15):1043–1046, Apr 1982.
- [50] S. Das Sarma, Song He, and X. C. Xie. Localization, mobility edges, and metal-insulator transition in a class of one-dimensional slowly varying deterministic potentials. *Phys. Rev. B*, 41(9):5544–5565, Mar 1990.
- [51] F. A. B. F. de Moura, L. P. Viana, and A. C. Frery. Vibrational modes in aperiodic one-dimensional harmonic chains. *Phys. Rev. B*, 73(21):212302, Jun 2006.
- [52] A E B Costa and F A B F de Moura. Extended acoustic waves in a one-dimensional aperiodic system. *Eur. Phys. J. B*, 79:253–256, 2011.
- [53] M. Hilke. Noninteracting electrons and the metal-insulator transition in two dimensions with correlated impurities. *Phys. Rev. Lett.*, 91:226403, 2003.
-

Apêndice A

Artigos publicados

Absence of localized acoustic waves in a scale-free correlated random system

A E B Costa and F A B F de Moura

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

Received 15 November 2010, in final form 13 December 2010

Published 20 January 2011

Online at stacks.iop.org/JPhysCM/23/065101

Abstract

We numerically study the propagation of acoustic waves in a one-dimensional medium with a scale-free long-range correlated elasticity distribution. The random elasticity distribution is assumed to have a power spectrum $S(k) \sim 1/k^\alpha$. By using a transfer-matrix method we solve the discrete version of the scalar wave equation and compute the localization length. In addition, we apply a second-order finite-difference method for both the time and spatial variables and study the nature of the waves that propagate in the chain. Our numerical data indicate the presence of extended acoustic waves for a high degree of correlations. In contrast with local correlations, we numerically demonstrate that scale-free correlations promote a stable phase of free acoustic waves in the thermodynamic limit.

1. Introduction

The absence of extended eigenstates in low-dimensional systems with uncorrelated disorder was pointed out by Anderson using perturbation theory and scaling analysis [1, 2]. Therefore, after a long time the width of the time-dependent wavepacket saturates in a finite region around the initial position. In a three-dimensional lattice, the presence of weak disorder promotes the localization of the high-energy eigenmodes [1, 2]. The low-energy states with long wavelength remain extended, although acquiring a finite coherence length. A mobility edge separates the high energy localized from the low energy extended states [1, 2]. Recently, it has been 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 distribution [3–15]. The delocalization problem in one-dimensional (1D) systems with scale-free correlated diagonal disorder has attracted much attention. It has been reported [5, 9, 10, 13] that these systems display an Anderson metal–insulator transition (MIT) with mobility edges separating localized and extended states for sufficiently strong correlations. In particular, the 1D system with nearest-neighbor interactions and a long-range correlated on-site disorder distribution with a power-like spectrum behaving as $k^{-\alpha}$ has been studied in detail in [5, 10, 13]. From the experimental point of view, these theoretical predictions were useful to explain the transport properties of semiconductor superlattices [16] and microwave transmission spectra of a single-mode waveguide with intentional correlated

disorder [17]. Moreover, it was suggested that an appropriate algorithm for generating random correlated sequences with desired mobility edges could be used in the manufacture of filters for electronic or optical signals [9].

The localization of collective excitation in random low-dimensional lattices is a quite general feature. It applies, for example, to the study of magnon localization in random ferromagnets [6], collective vibrational motion of 1D disordered harmonic chains [7, 18], and acoustic waves in disordered media [19–28]. In fact, the propagation of acoustic waves has attracted both theoretical [19–27] and experimental [28] interest. In general terms, it was shown that such waves may be localized in media with uncorrelated disorder. However, recent works point out the drastic effect of correlations within the acoustic waves context [23–27]. In [23] the propagation of acoustic waves in the random-dimer chain was studied using the transfer-matrix method, exact analytical analysis, and direct numerical simulation of the scalar wave equation. The results indicated that there exists a resonance frequency at which the localization length of the acoustic wave diverges [23]. It was also shown that only the resonance frequency can propagate through the 1D medium. Moreover, the wave propagation in a random system with a power-law correlation function was investigated by using renormalization group formalism as well as numerical methods [24–27]. Calculations indicate that there can be a disorder-induced transition from delocalized to localized states of acoustic waves in any spatial dimension.

In this work, we contribute to a further understanding of acoustic wave propagation in low-dimensional systems with

correlated disorder distribution. We follow [23] considering a discrete 1D version of the wave equation where the elasticity distribution appears as an effective spring constant. The scale-free long-range correlated elastic constant distribution was generated by using a discrete Fourier method. First, using the transfer-matrix method, we calculate the localization length of acoustic waves propagating in the medium, and show that long-range correlation induces a localization–delocalization transition. In addition, by using direct numerical simulation of the equation that governs the propagation of acoustic waves, we demonstrated the drastic effect of free scale correlations within the disorder distribution. We find that the correlated random medium can filter out all high frequencies of the wavepacket.

2. Model and formalism

We start by considering the acoustic wave equation in a random medium (see [23]):

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left[\eta(x) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \right]. \quad (1)$$

Here, $\psi(x, t)$ is the wave amplitude, t is the time, and $\eta(x) = e(x)/m$ is the ratio of the stiffness $e(x)$ and the medium's mean density m . Following [23] we will use $m = 1$ and consider a discrete 1D version of the wave equation ($\Delta x = 1$)

$$\eta_i(\psi_{i+1} - \psi_i) - \eta_{i-1}(\psi_i - \psi_{i-1}) + \omega^2 \psi_i = 0. \quad (2)$$

The elastic constants η_i will be considered as a long-range correlated random sequence. In order to generate sequences with a power-law decaying spectral density function, we firstly generate the following auxiliary sequence [5, 29]:

$$x_i = \tanh \left[\sum_{k=1}^{N/2} \frac{1}{k^{\alpha/2}} \cos \left(\frac{2\pi ik}{N} + \phi_k \right) \right] \quad (3)$$

which is restricted to the interval $-1 \leq x_i \leq 1$ and whose spectral density function decays asymptotically as $1/k^\alpha$. The hyperbolic transformation of the series brings the advantage of bounding the interval of the random variable without changing its asymptotic correlation function. Such a power-law decaying correlation function actually characterizes the absence of a typical correlation length in the disorder distribution and allows the investigation of the influence of scale-free disorder on the properties of the acoustic waves. In the above equation, k is the wavevector of the modulations on the random variable landscape, ϕ_k are $N/2$ random phases uniformly distributed in the interval $[0, 2\pi]$ and the exponent α controls the degree of correlation. The sequence of elastic constants is obtained after normalizing the auxiliary sequence to have unitary variance ($\Delta\eta = 1$) and displacing it to avoid negative constants η_i . In the following, we use $\eta_i = 2 + x_i/\Delta x$. With the above procedure, the distribution of η_i has sharp edges for any value of α , which results in long-range correlated sequences of strictly positive elastic constants even when very large chains are considered. For $\alpha = 0$, we recover an uncorrelated random sequence of elastic constants.

2.1. Localization properties

Equation (2) can be solved by using the transfer-matrix formalism (TMF) [7, 23]. The TMF is obtained from a matrix recursive reformulation of equation (2). The matricial equation is

$$\begin{pmatrix} \psi_{i+1} \\ \psi_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{-\omega^2 + \eta_i + \eta_{i-1}}{\eta_i} & -\frac{\eta_{i-1}}{\eta_i} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_i \\ \psi_{i-1} \end{pmatrix} = T_i \begin{pmatrix} \psi_i \\ \psi_{i-1} \end{pmatrix}. \quad (4)$$

The wave amplitude of the complete 1D system is given by the product of the transfer matrices $Q_N = \prod_{i=1}^N T_i$. The logarithm of the smallest eigenvalues of the limiting matrix $\Gamma = \lim_{N \rightarrow \infty} (Q_N^\dagger Q_N)^{1/2N}$ define the Lyapunov exponent γ (inverse of localization length $\lambda = 1/\gamma$). Further details about the computation of this parameter can be found in [2, 23]. Typically, by using a fast Fourier formalism to sum equation (3), we use up to $N = 2^{22}$ transfer matrices to compute the localization length. For extended states $\lambda/N \approx \text{const}$ and goes to zero for localized waves. A quantitative scaling analysis of the localization number can be derived by using the scaled average localization length $\langle \lambda \rangle / N$ defined as

$$\langle \lambda \rangle / N = \frac{1}{N N_f} \sum_{\omega=0.5}^{\omega=1.5} \lambda(\omega) \quad (5)$$

where N_f is the number of acoustic modes within the interval $[0.5, 1.5]$. To compute the scaled average localization length, the bottom of the band was avoided because the localization lengths of these low-frequency modes are large even in the absence of correlated disorder [23]. We are interested in the existence of extended states apart from the bottom of the band. Accordingly, $\langle \lambda \rangle / N$ does not depend on N for extended modes and goes to zero for localized ones.

2.2. Dynamics of acoustic waves

In addition, we apply the finite-difference method with second-order discretization for both time and spatial variables proposed in [23]. Thus, in discretized form, $\psi(x, t)$ is written as ψ_i^n , where n denotes the time step number and i is the grid point number [23]. Therefore, the second time derivative in equation (1) is given by [23]

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(x, t) \approx \frac{\psi_i^{n+1} - 2\psi_i^n + \psi_i^{n-1}}{\Delta t^2} \quad (6)$$

where Δt is the size of the time step. The spatial derivative will be written as

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\eta(x) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \right] \approx \frac{1}{\Delta x^2} \times [\eta_i(\psi_{i+1}^n - \psi_i^n) - \eta_{i-1}(\psi_i^n - \psi_{i-1}^n)]. \quad (7)$$

In our calculations the spacing Δx between two neighboring grid points was set at $\Delta x = 1$. In order to ensure the stability of the discretized equations we will use $\Delta t < \Delta x/100$. We carry out our dynamical analysis by sending a wave from one side of the chain ($L = 0$) and recording the transmitted wave close to the other side (position $L = 20000$). We calculate

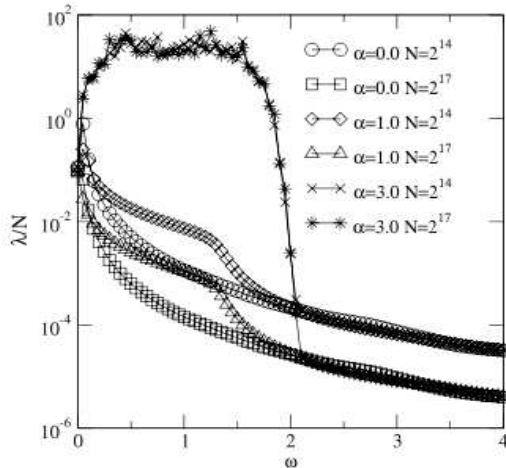


Figure 1. Scaled localization length λ/N versus ω for $\alpha = 0, 1,$ and 3 . Calculations were made considering $N = 2^{14}$ and 2^{17} points. These results indicate that, for strong correlations, there are extended acoustic waves at the low-frequency region.

the intensity spectrum of the transmitted wave at position L defined as

$$A(\omega) = (1/2)|\psi_L(\omega)|^2 \quad (8)$$

where $\psi_L(\omega)$ is the Fourier transform of the transmitted wave $\psi_L(t)$ at position $L = 20000$. For transmitted acoustic modes, $A(\omega) > 0$ and goes to zero for filtered ones. In our dynamical calculations the chain length was $N = 2^{15}$.

3. Results and discussion

Initially, we show the results about the localization properties obtained using the transfer-matrix technique. The finally obtained data have statistical errors less than 5%. We estimate and control these statistical fluctuations following the deviations of the calculated eigenvalues of two adjacent iterations [2, 23]. In figure 1 we show the scaled localization length λ/N versus ω computed for $\alpha = 0, 1, 3$, and distinct system sizes ($N = 2^{14}$ and 2^{17}). All calculations were averaged over 10^5 disorder configurations. For $\alpha = 0$ and 1 the localization length scales proportionally to the system size only for $\omega = 0$. Therefore, for $\omega > 0$ there are no truly delocalized states at this regime of weakly correlated disorder. However, for $\alpha = 3$ a well defined data collapse in a wide region of low frequencies is obtained with $\lambda \propto N$. This result suggests the possibility of a phase of low-frequency extended states for strongly correlated disorder. In figure 2(a) we collect data of the scaled average localization length $\langle \lambda \rangle / N$ versus the degree of correlations α for $N = 2^{14}, 2^{17}$ and 2^{19} . Let us stress that to compute the average localization length the bottom of the band was avoided due to the weak localization character of these low-frequency acoustic modes

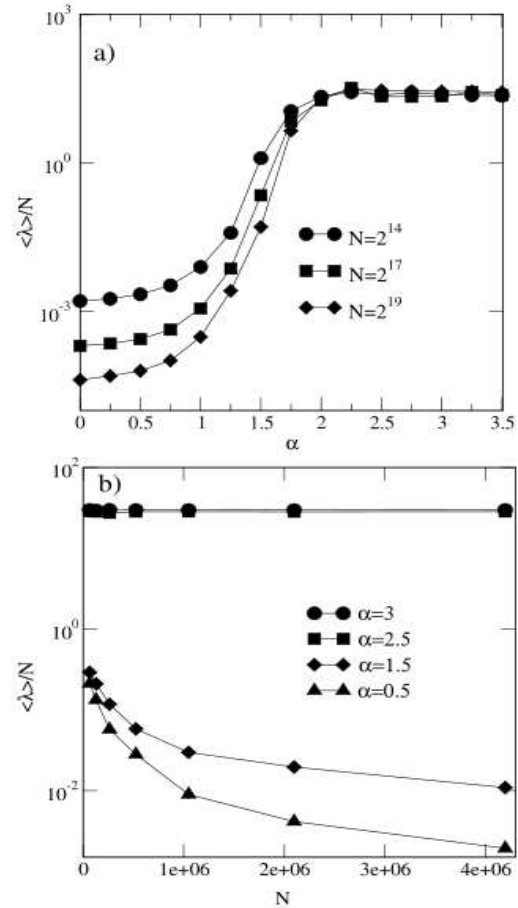


Figure 2. (a) Scaled average localization length $\langle \lambda \rangle / N$ versus the degree of correlations α . For $\alpha > 2$ there is a well defined data collapse, thus indicating a localized-delocalized transition. (b) Finite size scaling of the scaled average localization length $\langle \lambda \rangle / N$. Within our numerical precision $\langle \lambda \rangle \propto N^{0.98(2)}$ for $\alpha > 2$ thus indicating extended states.

even in the absence of correlated disorder [23]. As can be seen in figure 2(a), there is a well defined data collapse in the strongly correlated regime ($\alpha > 2$), i.e. the localization length diverges in the regime of low frequencies ($\omega < \omega_c \approx 1.6(1)$). In figure 2(b) we plot the scaled average localization length $\langle \lambda \rangle / N$ versus N for $N = 2^{14}$ up to 2^{22} and $\alpha = 0.5, 1.5, 2.5$ and 3 . Within our numerical precision $\langle \lambda \rangle \propto N^{0.98(2)}$ for $\alpha > 2$. For $\alpha < 2$ the vanishing of the scaled average localization length $\langle \lambda \rangle / N$ for large N confirms the localized nature of the eigenstates in this regime. Therefore, the finite size scaling of the scaled average localization length $\langle \lambda \rangle / N$

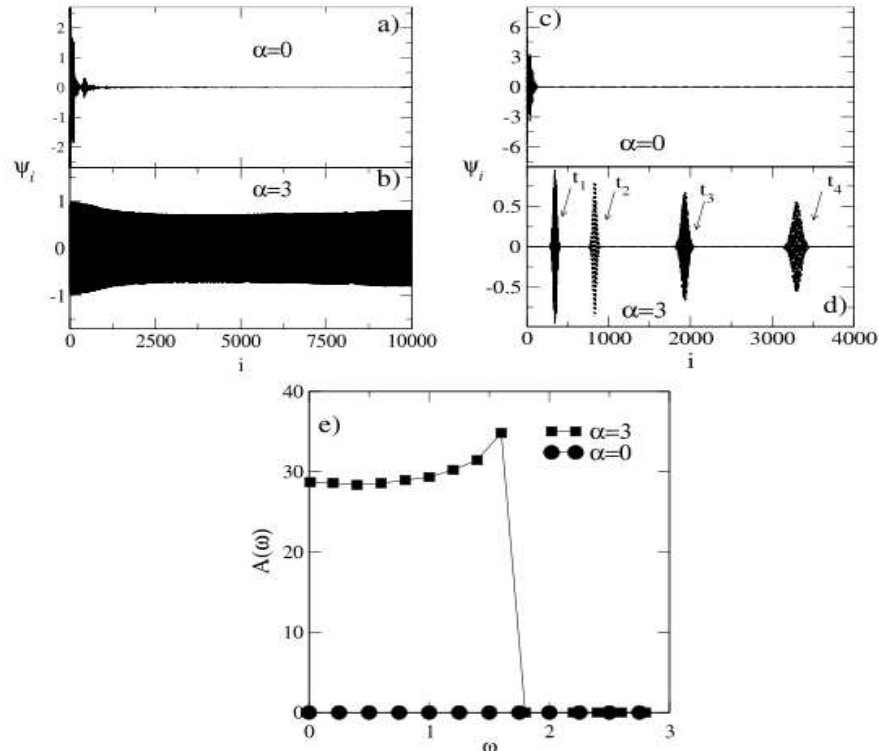


Figure 3. (a), (b) The amplitude of the wave during propagation through the scale-free correlated disordered medium for time $t = 500\,000\Delta t$. We consider in (a) the uncorrelated case ($\alpha = 0$) and (b) the strongly correlated limit ($\alpha = 3$). The incident wave is a sine wave with frequencies $\omega = 1$ (below ω_c). (c), (d) The amplitude of the wave for times $t_1 = 50\,000\Delta t$, $t_2 = 100\,000\Delta t$, $t_3 = 200\,000\Delta t$ and $t_4 = 300\,000\Delta t$, considering the incident wave as a pulse defined by $\Psi_0(t) = \exp[-(t - t_0)^2/2\sigma_t^2] \cos(\omega t)$ with $\sigma_t = (1/\sigma_\omega) = 20$ and frequency $\omega = 1$ (below ω_c). Regardless of the initial condition, the case $\alpha = 3$ allows the propagation along the 1D system. (e) The intensity spectrum $A(\omega)$ of the transmitted wave pulse at position $L = 20\,000$ computed using 20 realizations of the disorder. The incident wave was considered as a pulse defined by $\Psi_0(t) = \exp[-(t - t_0)^2/2\sigma_t^2] \cos(\omega t)$ with $\sigma_t = (1/\sigma_\omega) = 20$ and frequencies chosen within the interval $\{0, 3\}$. For sufficient degree of correlations, $A(\omega < \omega_c) > 0$, indicating that those acoustics waves with divergent localization lengths display a free propagation through the scale-free correlated disordered medium.

indicates the existence of a localized–delocalized transition for $\alpha > 2$. To conclude we will look at the evidence of the above phase transition by solving directly the scalar wave equation. By following the time propagation of an incident wave we obtain directly the degree of transmittance of a scale-free correlated disordered medium. Moreover, the divergence of the localization length itself does not guarantee the existence of extended states, as in the case of a vibrational wave envelope displaying a power-law decay [2]. In figures 3(a) and (b) we plot the wave amplitude ψ_i versus grid index i at time $t = 500\,000\Delta t$. The incident wave is a sine wave with frequency $\omega_0 < \omega_c$. We consider in (a) the uncorrelated case ($\alpha = 0$) and (b) the strong correlated limit ($\alpha = 3$). We observe that for $\alpha = 3$ the incident wave displays a free propagation through the scale-free correlated disordered medium. By

following [24, 25] we also consider the incident wave as a pulse defined by $\Psi_0(t) = \exp[-(t - t_0)^2/2\sigma_t^2] \cos(\omega t)$ with $\sigma_t = (1/\sigma_\omega) = 20$. In figures 3(c) and (d) we plot the wave amplitude ψ_i versus grid index i at times $t_1 = 50\,000\Delta t$, $t_2 = 100\,000\Delta t$, $t_3 = 200\,000\Delta t$, $t_4 = 300\,000\Delta t$ with $\sigma_t = (1/\sigma_\omega) = 20$, frequency $\omega = 1$ (below ω_c), and $\alpha = 0$ and 3 (respectively figures 3(c) and (d)). Once again, we observe that for $\alpha = 3$ the incident wave displays a free propagation through the scale-free correlated disordered medium. To complete our dynamical analysis, we solve numerically the wave equation for several pulses with distinct frequencies within the interval $\{0, 3\}$ and compute the intensity spectrum $A(\omega)$ using 20 realizations of the disorder. In figure 3(e) we present the resulting frequency dependence of the intensity spectrum $A(\omega)$ for these simulations. As

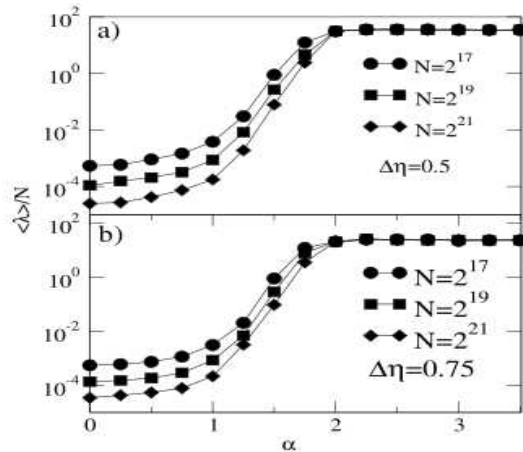


Figure 4. (a), (b) Scaled localization lengths, averaged over a frequency window [0.5, 1.5], versus α for $\Delta\eta = 0.5$ and 0.75. Similarly to the 1D Anderson model with long-range correlated diagonal disorder [13], the critical point (α_c) obtained here seems to be independent of the magnitude of disorder $\Delta\eta$.

shown in figure 3(e), all the modes with $\omega > \omega_c$ decay, and the medium behaves as a filter to transmit only the modes below frequency $\omega_c \approx 1.6$. We compute the intensity spectrum $A(\omega)$ by using another kind of incident wave (e.g. $\Psi_0(t) = \sum_{\omega_0 < \omega} \cos(\omega_0 t)$) and no qualitative change in the physical properties is found. These results confirm those obtained by the numerical analysis based on the TMF method described before. Then the numerical evidence reported here, obtained by using TMF and numerical solutions of wave equations, suggests that the low-frequency modes in a 1D medium with scale-free correlated disorder are in fact delocalized. The localization–delocalization transition found here is similar to the electronic Anderson transition induced by long-range correlations found previously in 1D random electronic systems [5]. Before finishing, we explore the possibility of the disorder strength to influence the critical value $\alpha_c = 2$. In figures 4(a) and (b) we show the scaled average localization length $\langle \lambda \rangle / N$ versus the degree of correlation α for $N = 2^{17}$, 2^{19} , and 2^{21} and distinct disorder strengths $\Delta\eta = 0.5$ and 0.75. We observe that the critical point ($\alpha_c = 2$) is independent of the magnitude of disorder $\Delta\eta$. This trend was also obtained in 1D electronic models with long-range correlated diagonal disorder [13].

4. Summary and conclusions

We studied the propagation of acoustic waves in a one-dimensional medium with scale-free long-range correlated disorder. The random distribution was assumed to have a power spectrum $S(k) \sim 1/k^\alpha$. By using a transfer-matrix method we computed the localization length of the allowed acoustic waves. Our results have shown that for

$\alpha > 2$ the localization length in the low-frequency region ($\omega < \omega_c$) scales proportionally to the system size, thus suggesting that these acoustic modes are extended. In addition, by using a dynamical method, based on directly solving the scalar wave equation for the propagation of an acoustic wavepacket, we showed that the chain indeed localizes all the frequencies except those in the frequency range below ω_c . Both formalisms provide an accurate estimate of the mobility edge ω_c . In contrast with 1D random media with local correlations, we numerically demonstrated that scale-free correlations promote a localization–delocalization transition in the thermodynamic limit. Within the context of recent studies on acoustic waves in low-dimensional media with correlated disorder [24–27], our numerical results extend some previous statements concerning the existence of an acoustic wave delocalization induced by correlated disorder. Here we showed that a true mobility edge can emerge in systems with strong long-range correlated disorder delimiting a finite range of transmitted frequencies. By following the recent literature on the self-affine long-range correlated disorder distribution, it seems that it plays a universal role in wave propagation phenomena [5, 11, 12, 14]. The critical point ($\alpha_c = 2$) is the same as that obtained in 1D models with long-range correlated on-site energies [5], hopping terms [14], and two-dimensional one-electron Hamiltonians with correlated on-site potentials [11, 12]. We expect that the present work will stimulate further theoretical and experimental investigations along these lines.

Acknowledgments

This work was partially supported by CNPq, CAPES, and FINEP (Federal Brazilian Agencies), CNPq-Rede Nanobioestruturas, as well as FAPEAL (Alagoas State Agency). The research work of A E B Costa is supported by a graduate program of CAPES. We are grateful to Professor Dr M L Lyra for useful discussions, corrections, and suggestions.

References

- [1] Abrahams E, Anderson P W, Licciardello D C and Ramakrishnan T V 1979 *Phys. Rev. Lett.* **42** 673
- [2] Kramer B and MacKinnon A 1993 *Rep. Prog. Phys.* **56** 1469
Ziman T A L 1982 *Phys. Rev. Lett.* **49** 337
For a review see, e.g. Lifshitz I M, Gredeskul S A and Pastur L A 1988 *Introduction to the Theory of Disordered Systems* (New York: Wiley)
- [3] Dunlap D H, Wu H L and Phillips P W 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 88
Wu H-L and Phillips P 1991 *Phys. Rev. Lett.* **66** 1366
- [4] Domínguez-Adame F, Maciá E and Sánchez A 1993 *Phys. Rev. B* **48** 6054
- [5] de Moura F A B F and Lyra M L 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 3735
- [6] de Moura F A B F, Coutinho-Filho M D, Raposo E P and Lyra M L 2002 *Phys. Rev. B* **66** 014418
- [7] de Moura F A B F, Coutinho-Filho M D, Raposo E P and Lyra M L 2003 *Phys. Rev. B* **68** 012202
- [8] Domínguez-Adame F, Malyshev V A, de Moura F A B F and Lyra M L 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 197402
- [9] Izrailev F M and Krokhin A A 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 4062
Izrailev F M, Krokhin A A and Ulloa S E 2001 *Phys. Rev. B* **63** 41102

- [10] Zhang G P and Xiong S-J 2002 *Eur. Phys. J. B* **29** 491
- [11] de Moura F A B F, Coutinho-Filho M D, Raposo E P and Lyra M L 2004 *Europhys. Lett.* **66** 585
- [12] dos Santos I F, de Moura F A B F, Lyra M L and Coutinho-Filho M D 2007 *J. Phys.: Condens. Matter* **19** 476213
- [13] Shima H, Nomura T and Nakayama T 2004 *Phys. Rev. B* **70** 075116
- [14] Cheraghchi H, Fazeli S M and Esfarjani K 2005 *Phys. Rev. B* **72** 174207
- [15] Schubert G, Weiße A and Fehske H 2005 *Physica B* **359–361** 801
- [16] Bellani V, Diez E, Hey R, Toni L, Tarricone L, Parravicini G B, Domínguez-Adame F and Gómez-Alcalá R 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 2159
- [17] Kuhl U, Izrailev F M, Krokhin A A and Stöckmann H-J 2000 *Appl. Phys. Lett.* **77** 633
- [18] de Moura F A B F and Domínguez-Adame F 2008 *Eur. Phys. J. B* **66** 165
- [19] Sornette D 1996 *Physica B* **219** 320
- [20] Cohen S M, Machta J, Kirkpatrick T R and Condat C A 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 785
- [21] Gupta B C and Ye Z 2003 *Phys. Rev. E* **67** 036606
- [22] Baluni V and Willemssen J 1985 *Phys. Rev. A* **31** 3358
- [23] Esmailpour A, Esmailpour M, Sheikhan A, Elahi M, Tabar M R R and Sahimi M 2008 *Phys. Rev. B* **78** 134206
- [24] Shahbazi F, Bahraminasab A, Allaei S M V, Sahimi M and Tabar M R R 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 165505
- [25] Sepehrinia R, Bahraminasab A, Sahimi M and Tabar M R R 2008 *Phys. Rev. B* **77** 014203
- [26] Bahraminasab A, Allaei S M V, Shahbazi F, Sahimi M, Niray M D and Tabar M R R 2007 *Phys. Rev. B* **75** 064301
- [27] Bahraminasab A, Esmailpour A, Allaei S M V, Shahbazi F, Sahimi M and Tabar M R R 2008 *Phys. Rev. B* **77** 216302
- [28] He S and Maynard J D 1986 *Phys. Rev. Lett.* **57** 3171
- [28] Maynard J D 2001 *Rev. Mod. Phys.* **73** 401
- [29] Dias W S, Nascimento E M, de Moura F A B F and Lyra M L 2009 *J. Magn. Magn. Mater.* **321** 2304

Extended acoustic waves in an one-dimensional aperiodic system

A.E.B. Costa and F.A.B.F. de Moura^a

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

Received 3 November 2010 / Received in final form 23 November 2010

Published online (Inserted Later) – © EDP Sciences, Società Italiana di Fisica, Springer-Verlag 2010

Abstract. We numerically study the propagation of acoustic waves in a one-dimensional system with an aperiodic pseudo-random elasticity distribution. The elasticity distribution was generated by using a sinusoidal function whose phase varies as a power-law, $\phi \propto n^\nu$, where n labels the positions along the media. By considering a discrete one-dimensional version of the wave equation and a matrix recursive reformulation we compute the localization length within the band of allowed frequencies. In addition, we apply a second-order finite-difference method for both the time and spatial variables and study the nature of the waves that propagate in the chain. Our numerical data indicates the presence of extended acoustic waves with non-zero frequency for sufficient degree of aperiodicity.

1 Introduction

In pure periodic systems, the electronic eigenstates are delocalized in the thermodynamic limit. This was one of the main conclusions obtained by Bloch [1,2]. However, disorder originating from lattice imperfections drastically modifies the nature of the one-electron eigenstates. The transport properties in nonperiodic systems was the main research focus of Anderson [3]. The well known Anderson localization theory predicts the absence of extended eigenstates on low-dimensional systems with uncorrelated disorder [3]. In a three-dimensional lattice, the presence of weak disorder promotes the localization of the high-energy eigenmodes [3–6]. The low-energy states with long wavelength remain extended, although acquiring a finite coherence length. Mobility edges separate the high energy localized from the low energy extended states.

Furthermore, it was realized that extended states may survive in 1D systems when correlated disorder [7–18] or deterministic nonperiodic potentials [19–28] are involved. In fact, Hamiltonian models with deterministic aperiodicity [19–28] depict features that are between those of the random Anderson model and the periodic Bloch model. The localized or extended nature of the eigenstates has been extensively investigated in the physics literature [19–24] and it has been related to general characteristics of the aperiodic on-site distribution. The effect of aperiodicity in a two-dimensional square lattice was investigated in reference [29]. By using a numerical formalism the one-electron Schrödinger equation in a square lattice with an aperiodic site potential was solved. It was numerically demonstrated that a phase of extended states emerges in the center of the band giving support to a macroscopic conductivity in the thermodynamic limit [29]. The role played by a specific aperiodic structure

on the localization properties and/or energy transport in harmonic chains was studied in [30,31]. Moreover, the quantum Heisenberg ferromagnet with aperiodic exchange couplings was considered in reference [32]. The aperiodic distribution of exchange couplings was generated as a sinusoidal function whose phase ϕ varies as a power-law. By using exact diagonalization, it was shown that this ferromagnetic system displays a phase of extended spin waves in the low-energy region [32]. The great importance of aperiodicity in different domains of science was reviewed by Macia in reference [33].

The phenomenology of localization is a quite general feature. It applies, for example, to the study of acoustic waves in nonperiodic media [34–44]. In fact, the propagation of acoustic waves has attracted both theoretical [34–42] and experimental [43,44] interest. In general lines, it was shown that such waves may be localized in media with uncorrelated disorder. However, recent works point out the drastic effect of correlations within the acoustic waves context [38–42]. In reference [38] the propagation of acoustic waves in the random-dimer chain was studied using the transfer-matrix method, exact analytical analysis, and direct numerical solution of the scalar wave equation. The results indicated that there exists a resonance frequency at which the localization length of the acoustic waves diverges [38]. It was also shown that only the resonance frequency can propagate through the 1d media. Moreover, the wave propagation in random system with a power-law correlation function was investigated by using renormalization group formalism as well as numerical methods [39–42]. Calculations indicate that there can be a disorder-induced transition from delocalized to localized states of acoustic waves in any spatial dimension.

In this work, we numerically study the propagation of acoustic waves in a one-dimensional system with an aperiodic pseudo-random elasticity distribution. We follow reference [38] considering a discrete one-dimensional version

^a e-mail: fidelis@if.ufal.br

1 of the wave equation. Therefore, the elasticity distribution
 2 appears as an effective spring constant. The kind of elas-
 3 ticity used here was generated by using a sinusoidal func-
 4 tion whose phase varies as a power-law, $\phi \propto n^\nu$, where
 5 n labels the positions along the media. We will solve the
 6 discrete form of the wave equation by applying a trans-
 7 fer matrix formalism and compute the localization length
 8 associated with the acoustic waves. In addition, we will
 9 apply a second-order finite-difference method for both the
 10 time and spatial variables to study the nature of the waves
 11 that propagate in the chain. Our numerical data indicates
 12 the presence of extended acoustic waves with non-zero fre-
 13 quency for sufficient degree of aperiodicity.

14 2 Model and formalism

15 We consider here the acoustic wave equation in nonperi-
 16 odic media (see. Ref. [38]):

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left[\eta(x) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \right]. \quad (1)$$

17 Here, $\psi(x, t)$ is the wave amplitude, t is the time, and
 18 $\eta(x) = e(x)/m$ is the ratio of the stiffness $e(x)$ and the
 19 medium's mean density m . Following reference [38] we will
 20 use $m = 1$ and consider a discrete one-dimensional version
 21 of the wave equation ($\Delta x = 1$)

$$\eta_i(\psi_{i+1} - \psi_i) - \eta_{i-1}(\psi_i - \psi_{i-1}) + \omega^2 \psi_i = 0. \quad (2)$$

22 The elastic constants η_i will be considered to follow a de-
 23 terministic rule given by

$$\eta_i = V_0 + [\cos(\alpha i^\nu)], \quad (3)$$

24 with α being an arbitrary rational number ($\alpha = 0.1$ here)
 25 and ν being a tunable parameter [19,20]. From this sinu-
 26 soidal form, one can control the degree of aperiodicity in
 27 the sequence of hopping couplings. In what follows, $V_0 = 2$
 28 will be taken in order to avoid negative or null elastic con-
 29 stants. The main motivation for considering the specific
 30 model we study in this manuscript is that from the sinu-
 31 soidal form we can control the degree of aperiodicity in the
 32 hopping distribution. Within the context of on-site diago-
 33 nal terms, the regime $\nu > 1$ was called "pseudorandom" at
 34 reference [22]. It was shown that one electron eigenstates
 35 become localized at the presence of an aperiodic potential
 36 at this regime.

37 Equation (2) can be solved by using the transfer ma-
 38 trix formalism (TMF) [28,38]. The TMF is obtained by
 39 using a matrix recursive reformulation of equation (2).
 40 The matricial equation is

$$\begin{pmatrix} \psi_{i+1} \\ \psi_i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{-\omega^2 + \eta_i + \eta_{i-1}}{\eta_i} & -\frac{\eta_{i-1}}{\eta_i} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_i \\ \psi_{i-1} \end{pmatrix} = T_i \begin{pmatrix} \psi_i \\ \psi_{i-1} \end{pmatrix}. \quad (4)$$

41 The wave amplitude of the complete 1D system is given
 42 by the product of the transfer matrices $Q_N = \prod_{i=1}^N T_i$.
 43 The logarithm of the smallest eigenvalue of the limiting

matrix $\Gamma = \lim_{N \rightarrow \infty} (Q_N^\dagger Q_N)^{1/2N}$ define the Lyapunov
 44 exponent γ (inverse of localization length $\lambda = 1/\gamma$). Fur-
 45 ther details about the computation of this parameter can
 46 be found in [4-6]. Typically, we use up to $N = 2^{21}$ trans-
 47 fer matrices to compute the localization length. For ex-
 48 tended states $\lambda/N \approx \text{const.}$ and goes to zero for localized
 49 waves. In our calculations we compute also the average lo-
 50 calization length defined as $\langle \lambda \rangle = \frac{1}{N_f} \sum_{\omega=0.5}^{\omega=1.5} \lambda(\omega)$ where
 51 N_f is the number of acoustic modes within the interval
 52 $[0.5, 1.5]$. In our calculations we have used $N_f = 500$. Let
 53 us stress that the bottom of the band was avoided in this
 54 sum because the localization length of a low-frequency
 55 acoustic wave is large even in the presence of strong un-
 56 correlated disorder [38]. We are interested in the existence
 57 of extended states apart the bottom of the band. There-
 58 fore, $\langle \lambda \rangle/N$ does not depend of N for extended modes and
 59 goes to zero for localized ones. In addition, we apply the
 60 finite-difference method with second-order discretization
 61 for both the time and spatial variables proposed in refer-
 62 ence [38]. Thus, in discretized form, $\psi(x, t)$ is written as
 63 ψ_i^n , where n denotes the time step number and i is the grid
 64 point number [38]. Therefore, the second time derivative in
 65 equation (1) is given by [38]
 66

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(x, t) \approx \frac{\psi_i^{n+1} - 2\psi_i^n + \psi_i^{n-1}}{\Delta t^2}, \quad (5)$$

where Δt is the size of the time step. The spatial derivative
 67 will be written as
 68

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[\eta(x) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \right] \approx \frac{1}{\Delta x^2} \left[\eta_i(\psi_{i+1}^n - \psi_i^n) - \eta_{i-1}(\psi_i^n - \psi_{i-1}^n) \right], \quad (6)$$

69 In our calculations the spacing Δx between two neigh-
 70 boring grid points was set $\Delta x = 1$. In order to en-
 71 sure the stability of the discretized equations we will use
 72 $\Delta t < \Delta x/100$. We carry our dynamical analysis by send-
 73 ing a wave from one side of the chain ($L = 0$) and record-
 74 ing the transmitted wave close to the other side (position
 75 $L = 20000$). We calculate the intensity spectrum of the
 76 transmitted wave at the end of chain defined as

$$A(\omega) = (1/2)|\psi_L(\omega)|^2 \quad (7)$$

77 where $\psi_L(\omega)$ if the Fourier transform of the transmitted
 78 wave $\psi_L(t)$ at position $L = 20000$. For transmitted acous-
 79 tic modes, $A(\omega) > 0$ and goes to zero for filtered ones. In
 80 our dynamical calculations the chain length was $N = 2^{15}$.

81 3 Results

82 The calculations of the typical localization length were
 83 done by using the transfer-matrix technique for a chain
 84 of size very large ($N \approx 2 \times 10^6$). In this method, the
 85 self-averaging effect automatically takes care of statistical
 86 fluctuations. We estimate and control these fluctuations
 87 following the deviations of the calculated eigenvalues of

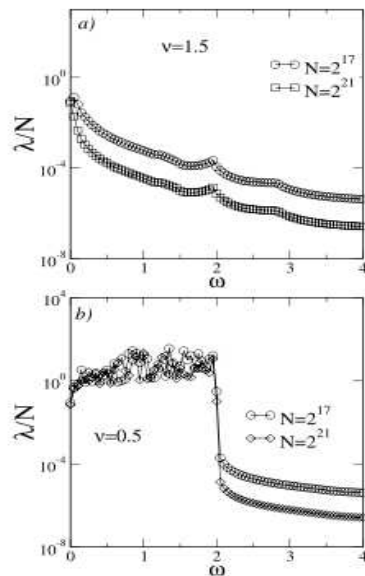


Fig. 1. The scaled localization length λ/N versus ω computed for $\alpha = 0.1$, $V_0 = 2$, distinct system size ($N = 2^{17}$ and 2^{21}), and (a) $\nu = 1.5$, (b) $\nu = 0.5$. For $\nu = 1.5$ we obtain the same physical properties of a 1D random media, only for $\omega = 0$ the localization length scales proportional to the system size. For $\nu = 0.5$ a rough data collapse in a wide region of low frequencies is obtained with $\lambda \propto N$ thus suggesting extended acoustic modes in this low-frequency region.

1 two adjacent iterations [4–6,28,38]. The finally obtained
 2 data have statistical errors less than 5%. In Figure 1 we
 3 show the scaled localization length λ/N versus ω com-
 4 puted for $\alpha = 0.1$, $V_0 = 2$, $\nu = 1.5$ (Fig. 1a), 0.5
 5 (Fig. 1b) and distinct system sizes ($N = 2^{17}$ and 2^{21}).
 6 For $\nu = 1.5$ the localization length scales proportional to
 7 the system size only for $\omega = 0$. For high-frequencies, the
 8 absence of periodicity induce the localization of acoustic
 9 waves and a nonzero Lyapunov exponent. Therefore, for
 10 $\omega > 0$ there are no truly delocalized states in this regime
 11 of aperiodicity. Within the 1d acoustic waves propagation
 12 context, the $\nu > 1$ limit showed the same physical prop-
 13 erties of a 1D random media [4–6,38]. However, for $\nu = 0.5$
 14 a rough data collapse in a wide region of low frequencies
 15 is obtained with $\lambda \propto N$. Accordingly, our results sug-
 16 gest that for this degree of aperiodicity, extended acous-
 17 tic modes appear in a finite frequency range. In Figure 2
 18 we collect data of the scaled average localization length
 19 $\langle \lambda \rangle / N$ versus the degree of aperiodicity ν . The scaled
 20 average localization length $\langle \lambda \rangle / N$ was computed within
 21 interval $[0.5, 1.5]$, i.e. avoiding the bottom of the band,
 22 because the localization length of low-frequency acoustic
 23 waves is large even in the presence of strong uncorrelated

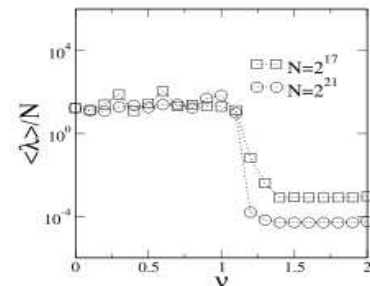


Fig. 2. Scaled average localization length $\langle \lambda \rangle / N$ versus the degree of aperiodicity ν . As it can be noticed, we obtain extended states with $\lambda \propto N$ for $\nu < 1$.

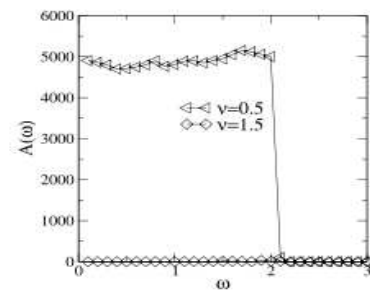


Fig. 3. The intensity spectrum $A(\omega)$ versus ω obtained from the dynamics formalism. We have used the incident wave as a superposition of harmonic waves with frequencies $\omega_n < 3$ ($\Psi_0(t) = \sum_{\omega_n < 3} \cos(\omega_n t)$). The second order finite-difference method was carried using $N = 2^{15}$ points, $\Delta t < 1/100$, $t = 5000000 \Delta t$, $\nu = 0.5$ (\triangle) and $\nu = 1.5$ (\diamond). For $\nu = 0.5$, the medium behaves as a filter to transmit only the modes below frequency $\omega_c \approx 2.0(1)$. For $\nu = 1.5$, all modes with $\omega > 0.0$ decay.

disorder [38]. As it can be noticed, there is a well defined
 24 data collapse for ($\nu < 1$). For all system sizes studied
 25 here, we obtain $\lambda \propto N$ that indicates extended modes
 26 in the thermodynamic limite. Then, our results suggest
 27 that when $\nu < 1$, extended acoustic modes in a finite
 28 frequency range. However, this behavior does not guarantee
 29 the existence of extended states, as in the case of a vibra-
 30 tional wave envelope displaying a power-law decay [4–6].
 31 Therefore we further study the dynamics of an initially
 32 localized excitation in the chain to better characterize
 33 the transport properties in this system. In Figure 3 we plot
 34 the resulting frequency dependence of the intensity spec-
 35 trum $A(\omega)$ obtained from the dynamics simulation. The
 36 incident wave was a superposition of harmonic waves with
 37 frequencies $\omega_n < 3$ ($\Psi_0(t) = \sum_{\omega_n < 3} \cos(\omega_n t)$). Calcula-
 38 tions were done using $N = 2^{15}$ points, $\nu = 0.5$ (\triangle) and
 39 $\nu = 1.5$ (\diamond). As shown in Figure 3 for $\nu = 0.5$, all modes
 40 with $\omega > 2.0$ decay, and the medium behaves as a filter
 41

1 to transmit only the modes below frequency $\omega_c \approx 2.0(1)$.
 2 For the pseudo-random limit ($\nu = 1.5$), all the modes with
 3 $\omega > 0.0$ decay. We observe that for $\nu = 0.5$ the incident
 4 wave displays a free propagation through the aperiodic
 5 media. These results confirm those obtained by the numerical
 6 analysis based on the TMF method described before.
 7 Furthermore, we observe that both formalisms are in good
 8 agreement about the mobility edge position ($\omega_c = 2.0(1)$).
 9 Therefore the numerical evidences reported here shows
 10 that the low-frequencies modes in a 1d aperiodic media
 11 are in fact delocalized.

12 4 Summary and conclusions

13 In this work we studied the propagation of acoustic waves
 14 in 1d media with an aperiodic pseudo-random elasticity
 15 distribution. By using a discretized form of the acoustic
 16 wave equation the ratio of the stiffness $e(x)$ and the
 17 medium's mean density m behaves as an elastic constant.
 18 To produce an aperiodic distribution of elastic constants,
 19 we used a sinusoidal function whose phase varies as a
 20 power-law, $\phi \propto n^\nu$, where n labels the grid positions along
 21 the 1d media. Using a transfer matrix formalism we computed
 22 the localization length of acoustic modes within
 23 the band of allowed frequencies. We observed that, for
 24 $\nu < 1$, the localization length diverges with N in the low-
 25 frequency region ($\omega < \omega_c$). Therefore there is a new phase
 26 of extended acoustic waves in these aperiodic media. In addition
 27 we showed that the presence of these non-scattered
 28 acoustic modes can modify the propagation of an incident
 29 wave. We solved directly the scalar wave equation and
 30 showed that the chain filters all frequencies except those
 31 in the frequency range below ω_c . Within our numerical
 32 precision, both formalisms provide the critical frequency
 33 $\omega_c = 2$. Therefore, we numerically reported the existence
 34 of extended acoustic modes with frequency $\omega > 0$ in a 1d
 35 model with an aperiodic defect distribution. We expect
 36 that the present work will stimulate further theoretical
 37 and experimental investigations along this line.

38 This work was partially financed by the Brazilian Research
 39 Agencies CNPq, CAPES, FINEP, Rede Nanobioestruturas,
 40 INCT as well as by the Alagoas State research agency FA-
 41 PEAL. We are grateful to Professor M.L. Lyra for useful dis-
 42 cussions, corrections and suggestions.

43 References

44 1. F. Bloch, Z. Phys. **52**, 555 (1927)
 45 2. N.W. Ashcroft, N.D. Mermin, *Solid State Physics*
 46 (Saunders Colege Publishers, New York, 1976), p. 213
 47 3. E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello, T.V.
 48 Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979)
 49 4. B. Kramer, A. MacKinnon, Rep. Prog. Phys. **56**, 1469
 50 (1993)
 51 5. T.A.L. Ziman, Phys. Rev. Lett. **49**, 337 (1982)
 52 6. I.M. Lifshitz, S.A. Gredeskul, L.A. Pastur, *Introduction to*
 53 *the Theory of Disordered Systems* (Wiley, New York, 1988)

7. J.C. Flores, J. Phys.: Condens. Matter **1**, 8471 (1989) 54
 8. D.H. Dunlap, H.-L. Wu, P.W. Phillips, Phys. Rev. Lett. 55
65, 88 (1990) 56
 9. P.W. Phillips, H.-L. Wu, Science **252**, 1805 (1991) 57
 10. A. Sánchez, F. Domínguez-Adame, J. Phys A: Math. Gen. 58
27, 3725 (1994) 59
 11. A. Sánchez, E. Maciá, F. Domínguez-Adame, Phys. Rev. 60
B 49, 147 (1994) 61
 12. E. Diez, A. Sánchez, F. Domínguez-Adame, Phys. Rev. B 62
50, 14359 (1994) 63
 13. F. Domínguez-Adame, E. Diez, A. Sánchez, Phys. Rev. B 64
51, 8115 (1995) 65
 14. V. Bellani, E. Diez, R. Hey, L. Toni, L. Tarricone,
 G.B. Parravicini, F. Domínguez-Adame, R. Gómez-Alcalá,
 Phys. Rev. Lett. **82**, 2159 (1999) 66
 15. F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, Phys. Rev. Lett. **81**, 3735
 (1998) 69
 16. F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, Physica A **266**, 465 (1999) 71
 17. F.M. Izrailev, A.A. Krokhin, Phys. Rev. Lett. **82**, 4062
 (1999) 72
 18. U. Kuhl, F.M. Izrailev, A.A. Krokhin, H.-J. Stöckmann,
 Appl. Phys. Lett. **77**, 633 (2000) 75
 19. S. Das Sarma, S. He, X.C. Xie, Phys. Rev. Lett. **61**, 2144
 (1988) 76
 20. S. Das Sarma, S. He, X.C. Xie, Phys. Rev. B **41**, 5544
 (1990) 78
 21. D.R. Grempel, S. Fishman, R.E. Prange, Phys. Rev. Lett. 80
49, 833 (1982) 81
 22. M. Griniasty, S. Fishman, Phys. Rev. Lett. **60**, 1334 (1988) 82
 23. D.J. Thouless, Phys. Rev. Lett. **61**, 2141 (1988) 83
 24. H. Yamada, Phys. Rev. B **69**, 014205 (2004) 84
 25. R. Riklund, M. Severin, J. Phys. C **21**, L965 (1988) 85
 26. F.A.B.F. de Moura, F. Domínguez-Adame, V.A. Malyshev,
 M.L. Lyra, Phys. Rev. B - Solid State **71**, 104303 (2005) 87
 27. F.A.B.F. de Moura, Eur. Phys. J. B **58**, 389 (2007) 88
 28. F.A.B.F. de Moura, J. Phys.: Condens. Matter **22**, 435401
 (2010) 89
 29. F.A.B.F. de Moura, L.P. Viana, M.L. Lyra, V.A.
 Malyshev, F. Domínguez-Adame, Phys. Lett. A **372**, 6694
 (2008) 92
 30. Y. Zhang, H. Zhao, Phys. Rev. E **66**, 026106 (2002) 94
 31. F.A.B.F. de Moura, L.P. Viana, A.C. Frery, Phys. Rev. B 95
73, 212302 (2006) 96
 32. F.A.B.F. de Moura, Eur. Phys. J. B **58**, 389 (2007) 97
 33. E. Maciá, Rep. Prog. Phys. **69**, 397 (2006) 98
 34. D. Sornette, Phys. B **219**, 320 (1996) 99
 35. S.M. Cohen, J. Machta, T.R. Kirkpatrick, C.A. Condat,
 Phys. Rev. Lett. **58**, 785 (1987) 100
 36. B.C. Gupta, Z. Ye, Phys. Rev. E **67**, 036606 (2003) 102
 37. V. Baluni, J. Willenssen, Phys. Rev. A **31**, 3358 (1985) 103
 38. A. Esmailpour, M. Esmailpour, A. Sheikhan, M. Elahi,
 M.R. Rahimi Tabar, M. Sahimi, Phys. Rev. B **78**, 134206
 (2008) 105
 39. F. Shahbazi, A. Bahraminasab, S.M. Vaez Allaei, M.
 Sahimi, M.R. Rahimi Tabar, Phys. Rev. Lett. **94**, 165505
 (2005) 108
 40. R. Sepehrinia, A. Bahraminasab, M. Sahimi, M.R.R.
 Tabar, Phys. Rev. B **77**, 014203 (2008) 111
 41. A. Bahraminasab, S.M.V. Allaei, F. Shahbazi, M. Sahimi,
 M.D. Niry, M.R.R. Tabar, Phys. Rev. B **75**, 064301 (2007) 112
 42. A. Bahraminasab, A. Esmailpour, S.M.V. Allaei, F.
 Shahbazi, M. Sahimi, M.R.R. Tabar, Phys. Rev. B **77**,
 216302 (2008) 115
 43. S. He, J.D. Maynard, Phys. Rev. Lett. **57**, 3171 (1986) 117
 44. J.D. Maynard, Rev. Mod. Phys. **73**, 401 (2001) 118