

Davi de Freitas Barros

*Modos Acústicos Estendidos em Sistemas  
com Desordem Correlacionada*

Maceió

2012

Davi de Freitas Barros

*Modos Acústicos Estendidos em Sistemas  
com Desordem Correlacionada*

Trabalho de conclusão de curso apresentado como parte das atividades para obtenção do título de bacharel em Física da Universidade Federal de Alagoas - UFAL, Instituto de Física.

Orientador:

Prof. Dr. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS

Maceió

2012

Trabalho de conclusão de curso sob o título “*Modos Acústicos Estendidos em Sistemas com Desordem Correlacionada*”, defendida por Davi de Freitas Barros e aprovada em 17 de fevereiro de 2012, em Maceió, Estado de Alagoas, pela banca examinadora constituída pelos professores:

Prof. Dr. Francisco Anacleto Barros Fidelis  
de Moura  
Orientador

Prof. Dr. Wandearley da Silva Dias  
Universidade Federal de Alagoas

Prof. Dr. Elton Malta Nascimento  
Universidade Federal de Alagoas

# *Agradecimentos*

Ao término deste trabalho, deixo aqui meus sinceros agradecimentos:

- a Deus por tudo;
- ao Prof. Dr. Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura, por toda dedicação no ato de orientar, e também pelo apoio em todos os âmbitos da minha formação, que fez dele não só um exemplo para mim, como também um amigo.
- a todos os professores do Instituto de Física da UFAL, pelo precioso conhecimento que me concederam;
- aos professores Wandearley da Silva Dias e Elton Malta Nascimento pelas valiosas sugestões;
- a minha família, pelo incentivo, apoio e segurança que me passaram durante todo esse período;
- aos grandes amigos do curso de Física, a quem levarei para sempre, pelo agradável convívio e pelo alívio dos momentos de estudo;
- a todos que direta ou indiretamente contribuíram para a realização deste trabalho;
- ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo auxílio financeiro.

# *Resumo*

Neste trabalho, foi estudado a propagação de ondas acústicas em um meio unidimensional com uma distribuição de coeficientes de elasticidade desordenada com correlações de curto alcance. Para gerar as correlações locais, consideramos uma distribuição binária aleatória nas quais as constantes elásticas podem tomar apenas dois valores  $\eta_A$  e  $\eta_B$ . Adicionamos outra condição implicando que os sítios de constante  $\eta_A$  aparecem sempre em sequência de comprimento  $n$ . Esta é uma generalização do bem conhecido modelo de dímeros aleatórios. Utilizando uma técnica de matrizes de transferência e simulação direta através de um método de diferenças finitas, estudamos em detalhes as propriedades das ondas que se propagam no meio. Esta análise mostra a presença de  $n - 1$  frequências ressonantes, que permite que estes modos propagem-se livremente pelo meio desordenado. Usando técnicas analíticas sobre este sistemas, foi comprovada a existência destes  $n - 1$  modos ressonantes, e também foi encontrada uma expressão geral para o valor destas frequências. De maneira geral, este sistema tem a capacidade de permitir a transmissão de apenas algumas frequências, enquanto as outras são extintas no meio.

# *Sumário*

## **Introdução**

0.1 Sistemas Ondulatórios . . . . .

## **1 Sistemas Desordenados** p. 8

1.1 O Caso Ordenado . . . . . p. 8

1.2 Localização de Anderson . . . . . p. 11

1.2.1 Localização de Anderson em Uma Dimensão . . . . . p. 12

1.3 Modos Estendidos em Sistemas com Desordem Correlacionada . . . . . p. 13

## **2 Metodologia** p. 16

2.1 Ondas Acústicas em Meios Elásticos . . . . . p. 16

2.2 Ondas Acústicas em Meios Desordenados . . . . . p. 18

2.3 Método de Matriz de Transferência . . . . . p. 19

2.4 Correlação de Curto Alcance Através de Números . . . . . p. 19

## **3 Resultados** p. 21

3.1 Análise Numérica . . . . . p. 21

3.2 Análise Analítica . . . . . p. 24

3.2.1 Matrizes Unimodulares . . . . . p. 26

3.2.2 Redução do Sistema à uma Cadeia Uniforme . . . . . p. 27

## **4 Considerações Finais** p. 29

## **Referências** p. 31

# *Introdução*

Um grande número de sistemas físicos envolvem o transporte de partículas em sólidos. Por exemplo: a propagação de vibrações em meios elásticos através de ondas acústicas, das configurações de spin da rede, o transporte de elétrons em um condutor e também da luz como uma onda do campo eletromagnético.

Estes e outros fenômenos podem ser interpretados como excitações do material ou como transporte de partículas num meio, e podem exibir um comportamento tipicamente ondulatório. As propriedades do sistema definem o transporte dessas quantidades e dão origem a muitos dos efeitos observáveis experimentalmente.

Em sistemas perfeitamente ordenados, a periodicidade no material resulta na chamada simetria translacional da rede. Para diferentes posições regulares, o sistema reproduz as mesmas características, e portanto permitem que a excitação encontre as mesmas condições de propagação e possa mover-se livremente pelo meio. Para um elétron interagindo com um potencial periódico, obtemos funções de onda que estendem-se por toda a rede, permitindo que corrente elétrica seja transmitida neste material.

Apesar de um grande número de modelos serem explicados pela abordagem de sistemas ordenados, a restrição imposta sobre a regularidade do meio esconde diversos efeitos e reduz a capacidade de explicar o comportamento dos diversos sólidos que encontramos na natureza. A baixa condutividade de alguns materiais isolantes e as propriedades mecânicas dos vidros, por exemplo, dependem fortemente do caráter desordenado que possuem na organização microscópica.

## **0.1 Sistemas Ondulatórios**

O movimento dos elétrons em um sólido pode ser visualizado como a propagação de uma onda interferindo com uma série de potências oriundos dos sítios da rede. Numa interpretação clássica, representando os elétrons como partículas que colidem com estes obstáculos, não seria possível explicar a possibilidade da transmissão das cargas ao longo do sólido. Porém, processos de tunelamento, de caráter ondulatório, podem permitir o

transporte eletrônico. O elétron pode ser comparado a uma onda colidindo com uma série de barreiras, e o resultado das interferências entre tais processos de reflexão e transmissão, resulta no estado final da partícula. A análise desse processo pode nos responder se o elétron estará localizado em uma certa região da rede ou estendido ao longo dela. Estes estados definem as propriedades macroscópicas do material, por exemplo, a possibilidade de permitir ou não a passagem de corrente.

Em um material inhomogêneo, uma onda mecânica pode encontrar, como resultado de variações nos coeficientes de elasticidade e densidade, locais cuja velocidade de propagação sejam distintos. Este desordenamento no material produz interferências que influenciam o movimento oscilatório. O mesmo pode acontecer numa análise microscópica de um material através do modelo de massas molas, onde as ondas são caracterizadas pelo movimento conjunto das massas em relação ao seu ponto de equilíbrio. A desordem no sistema pode surgir dos diferentes valores associados às massas, ou das diferentes constantes elásticas das molas.

Apesar de alguns destes fenômenos físicos serem de natureza quanto-mecânica, a localização é um efeito que surge do caráter ondulatório da dinâmica destas excitações. Experimentos utilizando ondas transversais em fios e ondas sonoras num guia de onda, também exibiram ausência de estados estendidos sob a presença de desordem. Revelando que estados restritos espacialmente também surgem em sistemas clássicos.

Recentemente, muitos trabalhos apontam para efeitos provocados pela existência de correlações na desordem sobre o comportamento do pacote de onda. Os resultados indicam que padrões na distribuição de desordem podem modificar o processo de localização. É demonstrado que tanto as correlações de curto alcance, quanto as de longo alcance podem gerar estados espalhados em potenciais desordenados. É interesse deste trabalho estudar o efeito da correlação de curto alcance na propagação de ondas acústicas num meio desordenado unidimensional.



# 1 *Sistemas Desordenados*

## 1.1 O Caso Ordenado

Para ilustrar um exemplo de sistema ordenado, possuindo modos estendidos, exploraremos o problema da cadeia carregada. Este modelo é constituído por uma sequência de massas iguais, ligadas por meio de cordas ou molas, em intervalos regulares. A massa de cada uma das  $n$  partículas é  $m$  e o espaçamento entre elas  $d$ . Desta forma, o comprimento da cadeia será  $L = (n + 1)d$

Desejamos tratar o caso das oscilações longitudinais das partículas em torno das suas posições de equilíbrio. Inicialmente, consideraremos os deslocamentos horizontais das massas  $j - 1$ ,  $j$  e  $j + 1$ . Se os deslocamentos horizontais  $x_{j-1}$ ,  $x_j$  e  $x_{j+1}$  são pequenos, a tensão nas molas é dada pela lei de Hooke. Desta forma, a força sobre a partícula  $j$  será dada por

$$F_j = -\kappa(x_j - x_{j-1}) - \kappa(x_j - x_{j+1}). \quad (1.1)$$

Onde a força  $F_j$ , de acordo com a lei de Newton é igual a  $m\ddot{x}_j$ ; assim, reescrevemos a equação acima como

$$\ddot{x}_j = \frac{\kappa}{m}(x_{j-1} - 2x_j + x_{j+1}) \quad (1.2)$$

que é a equação de movimento da  $j$ -ésima partícula. O sistema é acoplado devido à força na  $j$ -ésima partícula depender das posições das partículas  $j - 1$  e  $j + 1$ ; este é um exemplo de interação dos vizinhos mais próximos, em que o acoplamento é somente com as partículas adjacentes.

Para resolver a equação de movimento, assumimos a dependência temporal na forma harmônica, ou seja, procuramos soluções tais que

$$x_j(t) = a_j e^{i\omega t} \quad (1.3)$$

onde  $a_j$  pode ser complexo. Substituindo esta expressão para  $x_j(t)$  na equação de movi-

mento, encontramos

$$\kappa a_{j-1} + (m\omega^2 - 2\kappa) a_j + \kappa a_{j+1} = 0, \quad (1.4)$$

onde  $j = 1, 2, \dots, n$ . Como os extremos da cadeia são fixos, temos  $a_0 = a_{n+1} = 0$ .

Esta equação representa uma equação de diferenças linear, e pode ser resolvida para as autofreqüências  $\omega_r$  igualando o determinante dos coeficientes a zero. Assim, obtemos o seguinte determinante secular.

$$\begin{vmatrix} 2\kappa - m\omega^2 & -\kappa & 0 & 0 & \cdots \\ -\kappa & 2\kappa - m\omega^2 & -\kappa & 0 & \cdots \\ 0 & -\kappa & 2\kappa - m\omega^2 & -\kappa & \cdots \\ 0 & 0 & -\kappa & 2\kappa - m\omega^2 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{vmatrix} = 0 \quad (1.5)$$

que exibirá as soluções para os  $n$  valores de  $\omega_r$ .

Para resolver o sistema de equações lineares e determinar os coeficientes  $a_j$ , sem calcular os determinantes, assumiremos uma solução na forma

$$a_j = ae^{i(j\gamma - \delta)} \quad (1.6)$$

onde  $a$  é real. Esta passagem é justificada se pudermos encontrar uma quantidade  $\gamma$  e uma fase  $\delta$  tais que as condições do problema sejam satisfeitas. Substituindo esta forma na equação 1.4 e cancelando o fator de fase, obtemos

$$\kappa e^{-i\gamma} + (m\omega^2 - 2\kappa) + \kappa e^{i\gamma} = 0 \quad (1.7)$$

resolvendo para  $\omega^2$

$$\omega^2 = \frac{2\kappa}{m} - \frac{\kappa}{m} (e^{i\gamma} + e^{-i\gamma}) \quad (1.8)$$

$$= \frac{2\kappa}{m} (1 - \cos \gamma) \quad (1.9)$$

$$= \frac{4\kappa}{m} \sin^2 \frac{\gamma}{2}. \quad (1.10)$$

Como sabemos através que o determinante secular é de ordem  $n$  e fornece exatamente  $n$  valores para  $\omega^2$ , podemos escrever

$$\omega_r = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}} \sin \frac{\gamma_r}{2}, \quad r = 1, 2, \dots, n. \quad (1.11)$$

As quantidades  $\gamma_r$  e  $\delta_r$  são determinadas aplicando as condições de contorno para os

extremos da corda permanecerem fixos. Assim temos

$$a_{jr} = a_r e^{i(j\gamma_r - \delta_r)}, \quad (1.12)$$

como somente a parte real possui significado físico

$$a_{jr} = a_r \cos(j\gamma_r - \delta_r) \quad (1.13)$$

e a condição de contorno é

$$a_{0r} = a_{(n-1)r} = 0. \quad (1.14)$$

Para que a condição  $a_{0r} = 0$  seja satisfeita, fica claro que  $\delta_r$  deve ser  $\pi/2$  ou qualquer múltiplo ímpar deste valor. Desta forma

$$a_{jr} = a_r \cos\left(j\gamma_r - \frac{\pi}{2}\right) \quad (1.15)$$

$$= a_r \sin j\gamma_r. \quad (1.16)$$

Para  $j = n + 1$ , temos

$$a_{(n+1)r} = 0 = \sin(n + 1)\gamma_r \quad (1.17)$$

e portanto

$$(n + 1)\gamma_r = s\pi, \quad s = 1, 2, \dots \quad (1.18)$$

ou

$$\gamma_r = \frac{s\pi}{n + 1}, \quad s = 1, 2, \dots \quad (1.19)$$

Porém, como existem apenas  $n$  valores distintos de  $\omega_r$ , isto irá requerer que existam apenas  $n$  valores distintos de  $\gamma_r$ . Podemos admitir uma correspondência entre os índices  $r$  e  $s$ , onde ambos estejam no intervalo  $1, 2, \dots, n$ .

As frequências permitidas neste sistema são então dadas por

$$\omega_r = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}} \sin\left(\frac{r\pi}{2(n + 1)}\right), \quad r = 1, 2, \dots, n \quad (1.20)$$

e as posições relativas são fornecidas por uma superposição dos modos permitidos

$$x_j = \sum_r a_r \sin\left(j\frac{r\pi}{n + 1}\right) e^{i\omega_r t} \quad (1.21)$$

que possuem a propriedade de serem estendidos por toda a rede. Ou seja, As vibrações envolvem todos os sítios presentes ao longo da cadeia. Sendo assim um exemplo de sistema ordenado e que permite a propagação das ondas que ali sejam excitadas. No limite  $N \rightarrow \infty$  o sistema tende para uma barra maciça que contém um espectro contínuo

de frequências estendidas.

## 1.2 Localização de Anderson

Em seu artigo revolucionário de 1958, Philip W. Anderson (ANDERSON, 1958) originou, descreveu e desenvolveu os princípios físicos envolvendo o fenômeno da localização de objetos quânticos devido à desordem. A citação de Anderson no Prêmio Nobel, referenciou esse artigo, que foi fundamental para vários desenvolvimentos subsequentes na física da matéria condensada e também em aplicações técnicas. Após mais de meio século, o assunto continua a ser de importância fundamental e em particular, nos últimos 25 anos, o fenômeno da localização provou ser crucial para o entendimento de vários efeitos de repercussão atual, como a localização de modos coletivos de ondas eletromagnéticas e de matéria.

O artigo original proposto por Anderson, pretendia lidar com o problema de elétrons em um meio desordenado unidimensional. Este problema sugere que o transporte no sistema não seja tratado através de partículas livres interagindo com espalhadores no meio, mas tratado como um movimento quanto-mecânico entre os sítios na qual estas entidades possam estar localizadas. Uma segunda característica deste fenômeno é a aleatoriedade, seja através de espaçamentos aleatórios entre os sítios, ou distribuição aleatória de impurezas através da rede.

O trabalho teve por objetivo, lançar os fundamentos que uma teoria de transporte quanto-mecânico como esta deveria ter. Para isto ele propôs o modelo mais simples disponível, que fornece uma análise do comportamento das partículas nesta rede com impurezas, excluindo outras formas de interação, como a entre os elétrons por exemplo, e impôs que a causa da desordem fosse independente da temperatura. Neste sistema, a rede é formada por sítios  $i$  distribuídos seja regularmente ou de forma aleatória, representando a posição dos íons no material. Assumimos então que as entidades do modelo podem ocupar estes sítios, caracterizando o acoplamento entre o elétron e os íons. Se um elétron ocupa um sítio  $i$  ele estará associando uma energia  $E_i$  à este estado, que é uma variável estocástica distribuída sobre uma banda de energias aleatória, definida por uma largura  $W$ . Assumimos também que há uma energia associada à transferência do elétron entre diferentes sítios  $V_{ij}$ , e pode ser ou não tratada também como uma variável estocástica, mas que em geral, cai muito rápido conforme se afasta do sítio  $i$ . É este termo de transferência que caracteriza os saltos quânticos à este modelo, e permite o transporte do elétron entre

os sítios da rede.

Sendo a função de onda do elétron descrita por  $\psi = \sum a_i \phi_i$ , onde  $\phi_i$  representa o orbital atômico centrado no sítio  $i$  —  $\phi_i$  é a função de onda de um elétron localizado no sítio  $i$ ; o conjunto dos  $\phi_i$ , para  $i = 1, 2, 3, \dots, N$  forma uma base adequada para expandir a função de onda  $\psi$ . A equação de Schrodinger para a dependência no tempo das amplitudes de probabilidade  $a_i$  será dada por

$$i\dot{a}_i = E_i a_i + \sum_{j \neq i} V_{ij} a_j. \quad (1.22)$$

Aqui, as energias são medidas em unidades de frequências, tal que  $\hbar = 1$ .

A técnica então consiste em inserir um elétron num sítio  $m$  qualquer da rede, em um instante inicial  $t = 0$ , e estudar o comportamento subsequente do pacote de onda como uma função do tempo. Para isto, ele expressa a amplitude de onda no sítio inicial  $a_m(t)$  em termos dos outros sítios da rede, e através de uma teoria perturbativa, sugere que, em geral, a amplitude de probabilidade de encontrar o elétron no sítio inicial permanece finita. Neste caso, a partícula não pode propagar-se pelo meio, visto que ela mantém um vínculo com a posição inicial, e está portanto localizada em torno desta região. Porém, Anderson afirmou, que caso a desordem seja suficientemente fraca, caracterizada pela relação  $W < V$ , as energias entre os sítios vizinhos podem combinar, causando a propagação do estado ao longo da rede. Nesta situação, a partícula encontra-se estendida, e a probabilidade de encontrá-la em qualquer sítio particular é infinitesimal.

### 1.2.1 Localização de Anderson em Uma Dimensão

Investigando a fase da onda em função da posição, o trabalho de Borland (BORLAND, 1963) lidava com o problema do elétron interagindo com uma sequência estocasticamente distribuída de potenciais do tipo delta em uma dimensão. Foi mostrado que existe uma perda na correlação entre as amplitudes conforme a distância entre os sítios aumenta, e que o pacote de onda possui um decaimento exponencial em torno de um valor máximo na rede. Ele discute que este efeito surge da competição entre as fases das ondas espalhadas pelo potencial, que tendem a interferir destrutivamente, localizando a partícula. De maneira geral, diferentes abordagens sobre o problema unidimensional indicaram que todos os estados eletrônicos são localizados exponencialmente para qualquer tipo de desordem presente no sistema. Os estados são desta forma caracterizados por um comprimento de localização  $\lambda$ , ou seja  $\psi \sim e^{-(x-x_0)/\lambda}$ .

Este resultado também foi obtido de maneira geral, através de um argumento de escala apresentado por Abrahams, Anderson, Licciardello e Ramakrishnan (ABRAHAMS et al., 1979), associando o comportamento do pacote de onda com a dimensão do sistema. Neste modelo, observamos o comportamento de uma caixa de dimensão  $d$  com muitos sítios. Os sólidos são então formados por várias dessas caixas acopladas entre si. Comparando com a teoria de Anderson, a largura da desordem  $W$  é representada através do espaçamento médio entre os níveis dentro do cubo  $\delta E$ . A energia de transição  $V$  corresponderá à média das flutuações da energia provocada pelos contornos da caixa  $\Delta E$ . Definimos assim a quantidade

$$g(L) \equiv \frac{\Delta E}{\delta E} \sim \frac{V}{W} \quad (1.23)$$

que assim como no modelo de Anderson, determina a localização das partículas.

Partindo desta análise macroscópica, estas quantidades são associadas à condutividade do meio, através das propriedades difusivas que estes blocos adquirem por possuírem um grande número de sítios. A teoria de escala assume que se temos a condutância da caixa com uma determinada largura  $g(L)$ , combinando  $b^d$  caixas dessas, resulta na condutância generalizada para caixas de tamanho  $bL$ , ou seja, existe uma relação

$$g(bL) = f(b, g(L)). \quad (1.24)$$

O comportamento de escala da função  $g(L)$  pode ser obtido a partir do parâmetro  $\beta(g)$

$$\beta(g(L)) = \frac{d \ln g(L)}{d \ln L}. \quad (1.25)$$

Para  $\beta$  positivo, a condutividade generalizada  $g$  cresce com o tamanho da caixa  $L$ ; para  $\beta$  negativo,  $g$  diminui com o crescimento de  $L$ . O comportamento da função  $\beta$  pode ser obtido dos limites assintóticos da função  $g$ , e é descrito pela Figura 1. Nela podemos ver que somente para dimensão  $d > 2$  existe uma região cujo  $\beta$  positivo permite a existência de estados estendidos. Neste regime, o estado não fica restrito numa região finita, tornando-se quanto espalhado quanto for o tamanho da rede. Para sistemas unidimensionais e bidimensionais, não existe tal transição e o sistema só possui estados localizados.

### 1.3 Modos Estendidos em Sistemas com Desordem Correlacionada

Em um trabalho sobre o modelo de dímeros aleatórios (DUNLAP; WU; PHILLIPS, 1990), foi observado a existência de estados estendidos, devido à presença de correlação entre as

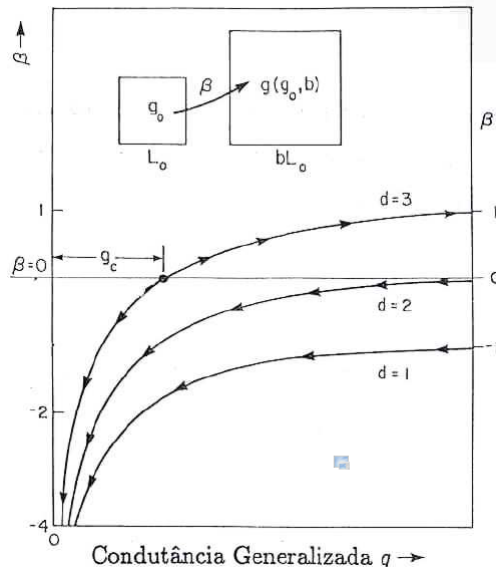


Figura 1: O comportamento qualitativo de  $\beta(g)$  para  $d = 1, 2, 3$  na teoria de escala apresentada por Abrahams, Anderson, Licciardello e Ramakrishnan, comprovando que para  $d \leq 2$  todos os estados eletrônicos são localizados

energias dos sítios da rede. O sistema é definido por dois valores distintos de energia de acoplamento  $\epsilon_A$  e  $\epsilon_B$ , em que um dos dois aparece na rede em pares repetidos. Para uma determinada frequência, tais que o coeficiente de reflexão do meio seja anulado nos sítios em pares, a onda estende-se pelo meio, pois o material deixa de permitir as interferências destrutivas que causam o comportamento localizado. E além da frequência ressonante, um número de estados proporcional a  $\sqrt{N}$  possui comprimento de onda maior que o tamanho da rede. Assim o sistema de dímeros aleatórios, pode permitir a existência de transporte eletrônico, graças a estes estados estendidos. Resultado que contraria a ideia que em sistemas unidimensionais com qualquer nível de desordem, o transporte de excitações no meio é proibido.

Este trabalho foi aplicado para explicar o comportamento de alguns polímeros condutores (PHILLIPS; WU, 1991). Nestes sistemas, as diferentes configurações numa cadeia orgânica linear, provoca a mudança em pares nas energias dos sítios e no termo de transferência. Estas mudanças são modeladas pelo sistema de dímeros aleatórios que explica a existência de uma frequência ressonante, tais que o sistema permite o transporte eletrônico. Escolhendo uma base apropriada para os elétrons da rede, obtemos num modelo mais simples possível, as seguintes equações de autovalores para as amplitudes de onda no sítio  $n$   $C_n$

$$EC_n = \epsilon_n C_n + V(C_{n+1} + C_{n-1}) \quad (1.26)$$

Obedece a equação de Schroedinger padrão para primeiros vizinhos com energia  $E$ . As  $\epsilon_n$  é a energia do elétron no sítio  $n$  e  $V$  é a integral de transferência que liga os sítios vizinhos e é responsável pelo movimento do elétron através da rede. Consideraremos uma cadeia que possui apenas um defeito dímico. Posicionamos este defeito nos sítios 0 e 1, que serão os únicos sítios a possuírem energia  $\epsilon_b$ , e calcularemos os coeficientes de reflexão e transmissão através desta impureza. As amplitudes de ondas são  $C_n = e^{ikn} + Re^{-ikn}$  para  $n \leq -1$  e  $C_n = Te^{ikn}$  para  $n \geq 1$  onde  $R$  e  $T$  são as amplitudes de reflexão e transmissão, respectivamente. A partir das equações de autovalor para os sítios  $-1$  e  $1$ , segue que  $C_0 = 1 + R = T(We^{-ik} + V)/V$  com  $W = \epsilon_a - \epsilon_b$ . A substituição deste resultado na equação de autovalor para o sítio 0 resulta na expressão

$$|R|^2 = \frac{W^2(W + 2V \cos k)^2}{W^2(W + 2V \cos k)^2 + (2V^2 \sin k)^2} \quad (1.27)$$

para a probabilidade de reflexão. O coeficiente de reflexão anula-se quando  $\epsilon_a - \epsilon_b = -2V \cos k$ , que irá ocorrer para algum valor de  $k$  se  $-2V \leq \epsilon_a - \epsilon_b \leq 2V$ . O anulamento do coeficiente de transmissão através de um único dímico em uma energia particular pode ser entendida por um efeito de ressonância. Os dímeros atuam como cavidades ressonantes, em uma energia particular, a reflexão do segundo sítio do dímico está  $180^\circ$  fora de fase com a reflexão do primeiro, e desta forma, a transmissão é unitária. A ressonância é análoga à transmissão de ressonância entre dois potenciais delta. E esta ressonância é preservada mesmo se houver uma distribuição aleatória de dímeros. Sob este contexto, o elétron sofre apenas reflexões devido á camada de coeficiente  $\epsilon_a$ , comportando-se como num meio ordenado para estas determinadas energias.

Transporte nenhum poderia ocorrer, e da mesma forma estes polímeros não poderiam se tornar condutores, se somente um único estado eletrônico não permanecesse localizado. Para estimar o número total de estados que sobre toda a amostra, expande-se  $R$  em torno de  $k_0$ . Em menor ordem observamos que na vizinhança de  $k_0$ ,  $|R|^2 \approx (\Delta k)^2$ , com  $\Delta k = k - k_0$ . O tempo médio entre espalhamentos será então inversamente proporcional à probabilidade de reflexão, e desta maneira, dependerá de  $\Delta k$ ,  $\tau \propto 1/(\Delta k)^2$ . Resultando disto, o livre caminho médio neste sistema aleatório  $\lambda = \langle \text{velocidade} \rangle \tau \approx 1/(\Delta k)^2$  na vizinhança de  $k_0$  e sendo  $\Delta k = \Delta N/2\pi N$  o número de vetores de onda naquele intervalo. Desta forma, o número total de estados com comprimento de localização da ordem do tamanho da rede irá escalar com  $\sqrt{N}$ . São estes os estados responsáveis pelo transporte eletrônico nestes polímeros condutores, porém de maneira geral, no limite termodinâmico, estes estados não caracteriza uma verdadeira transição metal isolante no material.



## 2 Metodologia

### 2.1 Ondas Acústicas em Meios Elásticos

A física dos fenômenos das ondas sonoras envolvem 3 processos (FEYNMAN; LEIGHTON; SANDS, 1998)

- I As partículas se movem e mudam a densidade do meio.
- II A mudança na densidade corresponde à uma mudança na pressão.
- III Diferenças na pressão gera um movimento das partículas.

Vamos considerar o passo II primeiro. Para um gás líquido ou sólido, a pressão é uma função termodinâmica da densidade. Antes do som chegar, temos uma situação de equilíbrio, com uma pressão  $P_0$  e uma densidade correspondente  $\rho_0$ . A pressão é ligada à densidade por alguma relação  $P = f(\rho)$ , e em particular, a pressão de equilíbrio é dada por  $P_0 = f(\rho_0)$ . As mudanças na pressão são em geral muito pequenas comparando com a pressão ambiente. Com a passagem do som temos

$$P = P_0 + p_e, \quad \rho = \rho_0 + \rho_e \quad (2.1)$$

e admitimos o limite em que  $\rho_e \ll \rho_0$  e  $P_e \ll P_0$ . Assim, podemos estimar a pressão da seguinte maneira

$$P_0 + P_e = f(\rho_0 + \rho_e) = f(\rho_0) + \rho_e f'(\rho_0). \quad (2.2)$$

Esta aproximação de Taylor em primeira ordem só é possível pois  $\rho_e$  é muito pequeno. Lembremos que  $f(\rho_0) = P_0$ , podemos perceber que a variação na pressão é dada por uma variação na densidade e o fator de proporcionalidade  $\kappa$ :

$$P_e = \kappa \rho_e, \quad \text{onde } \kappa = f'(\rho_0) = \frac{dP}{d\rho_0}. \quad (2.3)$$

Vamos considerar agora a situação I. Devemos supor que a posição de uma porção de massa não-distorcida pela onda sonora é  $x$  e o deslocamento no tempo  $t$  é dado por  $\chi(x, t)$ , de tal forma que sua nova posição será dada por  $x + \chi(x, t)$ . Agora a posição sem distúrbio de uma próxima coluna de ar é  $x + \Delta x$  e após o distúrbio é  $x + \Delta x + \chi(x + \Delta x, t)$ . Desde que nos limitamos à ondas planas, tomamos uma unidade de área perpendicular a  $x$ , que é a direção de propagação do som. A quantidade de matéria por unidade de área é  $\rho_0 \Delta x$ . Quando o meio é distorcido pela onda, esta se encontra entre  $x + \Delta x$  e  $x + \Delta x + \chi(x + \Delta x, t)$ , porém temos a mesma quantidade de matéria antes e depois. Se  $\rho$  for a nova densidade, então

$$\rho_0 \Delta x = \rho [x + \Delta x + \chi(x + \Delta x, t) - x - \chi(x, t)], \quad (2.4)$$

como  $\Delta x$  é pequeno, expandiremos  $\chi(x + \Delta x, t) - \chi(x, t) = \frac{\partial \chi}{\partial x} \Delta x$ . Nossa equação se torna

$$\rho_0 \Delta x = \rho \left( \frac{\partial \chi}{\partial x} \Delta x + \Delta x \right) \quad (2.5)$$

ou

$$\rho_0 = (\rho_0 + \rho_e) \frac{\partial \chi}{\partial x} + \rho_0 + \rho_e \quad (2.6)$$

e chegamos à

$$\rho_e = -\rho_0 \frac{\partial \chi}{\partial x} - \rho_e \frac{\partial \chi}{\partial x}. \quad (2.7)$$

Podemos negligenciar  $\rho_e \frac{\partial \chi}{\partial x}$  comparado à  $\rho_0 \frac{\partial \chi}{\partial x}$ , chegando finalmente à relação

$$\rho_e = -\rho_0 \frac{\partial \chi}{\partial x}. \quad (2.8)$$

Este resultado é esperado fisicamente. Se o deslocamento varia com a posição, há mudanças na densidade, quanto maior o deslocamento, mais a densidade diminui, explicando o sinal da equação.

Para descrever o terceiro processo, desenvolveremos a equação de movimento provocado pela diferença de pressões. Se tomarmos uma fina fatia do material de comprimento  $\Delta x$  e área perpendicular a  $x$ , então a massa dessa fatia será  $\rho_0 \Delta x$  e possuirá aceleração  $\frac{\partial^2 \chi(x, t)}{\partial t^2}$ , assim a massa vezes a aceleração será  $\rho_0 \Delta x \frac{\partial^2 \chi(x, t)}{\partial t^2}$ . Se encontrarmos a força realizada pela pressão sob esta camada, ela será, segundo à lei de Newton, igual a este valor da massa vezes a aceleração. Temos a força na direção  $+x$  em  $x$  de valor  $P(x, t)$  vezes a unidade de área, e temos uma força na direção oposta, em  $x + \Delta x$  de intensidade  $P(x + \Delta x, t)$  vezes a unidade de área.

$$P(x, t) - P(x + \Delta x, t) = -\frac{\partial P}{\partial x} \Delta x = -\frac{\partial P_e}{\partial x} \Delta x, \quad (2.9)$$

desde que  $x$  é infinitesimal, e a única parte da pressão que varia é  $P_e$ . Assim temos

$$\rho_0 \frac{\partial^2 \chi(x, t)}{\partial t^2} = -\frac{\partial P_e}{\partial x}. \quad (2.10)$$

Agora possuímos equações suficientes para descrever  $\chi(x, t)$ . Utilizando a equação 2.3, eliminamos a dependencia com  $P_e$ , assim

$$\rho_0 \frac{\partial^2 \chi(x, t)}{\partial t^2} = -\frac{\kappa \partial \rho_e}{\partial x}, \quad (2.11)$$

em seguida, utilizamos a equação 2.8 para eliminar a densidade  $\rho_0$ , refazendo

$$\frac{\partial^2 \chi(x, t)}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial x} \frac{\kappa \partial \chi(x, t)}{\partial x}. \quad (2.12)$$

Esta é a equação que descreve o som na matéria.

## 2.2 Ondas Acústicas em Meios Desordenados

O meio que pretendemos investigar consiste de uma série de camadas de dois materiais distintos. Elas possuem um mesmo comprimento definido porém possuem coeficientes de elasticidade diferentes. A desordem é imposta pela disposição aleatória das camadas, e admitindo que um deles é restrito a aparecer sempre em uma sequencia de  $n$  camadas. Para estudar a propagação de ondas acústicas em um meio com uma distribuição aleatória de constantes elásticas, analisamos a equação de onda escalar para a dinâmica de um meio elástico unidimensional dada por (BARROS; COSTA; MOURA, 2011)

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(x, t) = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \eta(x) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \right], \quad (2.13)$$

onde  $\psi(x, t)$  é a amplitude de onda,  $t$  o tempo, e  $\eta(x) = e(x)/m$  a razão entre a  $e(x)$  elasticidade e a densidade média  $m$  do meio (utilizando um sistemas de unidade tais que  $m = 1$ ). Utilizando um método de diferenças finitas para discretizar o meio de acordo com as camadas (adotando a largura  $\Delta x = 1$ ) (ESMAILPOUR et al., 2008) (CAO et al., 2005), escrevemos a equação da onda numa forma discretizada. A amplitude de onda espacial é escrita como  $\psi_i$ , onde  $x = i\Delta x$ . A derivada espacial será descrita nesta forma por  $\partial \psi(x)/\partial x \approx (\psi_i - \psi_{i-1})/\Delta x$ . Desta forma, o lado direito da equação 2.13 pode ser escrito como:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[ \eta(x) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \right] = [\eta_i(\psi_{i+1} - \psi_i) - \eta_{i-1}(\psi_i - \psi_{i-1})]. \quad (2.14)$$

Cada valor da razão de elasticidade  $\eta(x)$  será então discretizada, correspondendo ao valor em cada camada  $\eta_i$  de um total de  $N$ . Assumindo uma amplitude de onda com uma dependência temporal na forma de harmônicos  $\psi(x, t) = \psi_i e^{-i\omega t}$ , encontramos então a equação de onda para os coeficientes de Fourier na seguinte forma

$$\eta_i(\psi_{i+1} - \psi_i) - \eta_{i-1}(\psi_i - \psi_{i-1}) + \omega^2 \psi_i = 0 \quad (2.15)$$

que é a versão discreta unidimensional da equação de onda.

## 2.3 Método de Matriz de Transferência

Esta equação pode então ser resolvida, através da aplicação do método de matriz de transferência (TMF). Este método consiste em uma reformulação matricial recursiva da equação 2.15. A equação na forma matricial se torna:

$$\begin{bmatrix} \phi_{i+1} \\ \phi_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{-\omega^2 + \eta_i + \eta_{i-1}}{\eta_i} & -\frac{\eta_{i-1}}{\eta_i} \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_i \\ \phi_{i-1} \end{bmatrix} = T_i \begin{bmatrix} \phi_i \\ \phi_{i-1} \end{bmatrix}. \quad (2.16)$$

A função de onda do sistema completo é obtido pelo produto das matrizes de transferência  $Q_N = \prod_{i=1}^N T_i$ , que relaciona as amplitudes de onda dos extremos da cadeia unidimensional. A partir desta quantidade, obtemos a matriz  $\Gamma = \lim_{N \rightarrow \infty} (Q_N^\dagger Q_N)^{1/2N}$  cujo logaritmo do menor autovalor desse limite, define o expoente de Lyapunov  $\gamma$  (o inverso do comprimento de localização  $\lambda = 1/\gamma$ ). Uma forma mais eficiente para obter o expoente de Lyapunov, é através da média estatística do logaritmo da matriz  $\Gamma$ , em que as próprias características do método, encarregam-se de lidar com as flutuações estatísticas. Obtemos dessa forma

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \langle \ln \|Q_N(\omega)\| \rangle. \quad (2.17)$$

## 2.4 Correlação de Curto Alcance Através de Números

Neste problema o meio é definido por uma cadeia do tipo  $n$ -ímero. Nós introduzimos uma distribuição binária e correlacionada de desordem na qual as constantes elásticas  $\eta_i$  podem tomar apenas dois valores  $\eta_A$  e  $\eta_B$ , com probabilidades  $p$  e  $1 - p$  respectivamente. Adicionamos também uma restrição adicional para os valores  $\eta_A$  aparecerem apenas em séries de camadas vizinhas de comprimento  $n$ . Esta é uma generalização de um caso particular conhecido, onde  $n = 2$  recupera o famoso sistema elástico de dímeros aleatórios.

Esta restrição envolvendo os  $n$  segmentos em série, é o que caracteriza a correlação de curto alcance do modelo.

## 3 Resultados

### 3.1 Análise Numérica

Através do cálculo do expoente de Lyapunov  $\gamma$  podemos entender o estado da onda no meio estudado. Para os estados estendidos  $\lambda/N \approx \text{const}$ , ou seja, o comprimento de localização é proporcional ao tamanho da rede, que indica um estado espalhado. Nas ondas localizadas o comprimento de localização é finito, desta forma  $\lambda/N$  tende a anular-se. Para obter esta quantidade, realizamos o produto de até  $N = 10^7$  matrizes de transferência. Para evitar erros numéricos associados com os grandes números que surgem do produto das matrizes de transferência, multiplicamos os termos da matriz por  $10^{-10}$  a cada 10 ou 20 passos. Então estes números são corrigidos para obter o valor correto do coeficiente de Lyapunov na Equação 2.17. Devido à multiplicação destas inúmeras matrizes, as flutuações estatísticas são reduzidas naturalmente nesta conta, observamos que os erros estatísticos são encontrados por volta de 5% através de iterações adjacentes. Todos os cálculos numéricos foram feitos para  $p = 0, 5$ ; porém não foi encontrada nenhuma dependência do comportamento com  $p$  dentro do intervalo  $(0, 1)$ .

Na figura 2 exibimos o gráfico do comprimento de localização em função da frequência  $\lambda \times \omega$  para um meio elástico correlacionado n-ímero unidimensional com constantes de elasticidade  $\eta_A = 8$ ,  $\eta_B = 10$  e  $n = 2-5$ . Pode-se observar a partir do gráfico, a existência de  $n - 1$  descontinuidades no comprimento de localização, como também é observado em sistemas semelhantes (CAO et al., 2005). Podemos esperar que nestas frequências ressonantes  $\omega_r$  o comprimento de localização possa divergir no limite termodinâmico. Na Figura 3 exibimos a escala do comprimento de localização para as frequências  $\omega_r$ . Calculamos os valores  $\ln \lambda(\omega = \omega_r) \times \ln N$  considerando os mesmos parâmetros da figura 2. As linhas pontilhadas representam o comportamento  $\lambda \propto N$ . Os resultados indicam que o comportamento do comprimento de localização diverge linearmente com o tamanho da rede para todas as frequências ressonantes, confirmando numericamente o caráter estendido destes modos, como suspeitado.

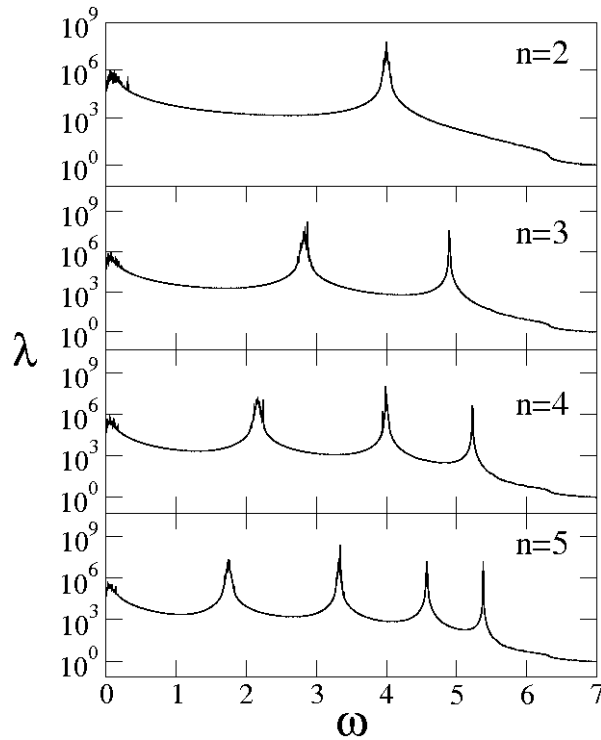


Figura 2: Obtenção numérica do comprimento de localização versus a frequência acústica. Os cálculos foram feitos para uma rede linear do tipo  $n$ -úmero muito longa  $N \approx 10^7$  com coeficientes de elasticidade  $\eta_A = 8$ ,  $\eta_B = 10$  e  $n = 2 - 5$ . Demonstramos a existência de  $n - 1$  ressonâncias.

Em torno das frequências ressonantes o comprimento de localização diverge quando se aproxima da frequência crítica na forma  $\lambda \propto |\omega - \omega_r|^{-\nu}$ . Utilizando o gráfico logarítmico de  $\lambda \times (\omega - \omega_r)$  estimamos o expoente  $\nu$ . O resultado dos cálculos são exibidos na figura 4. Para os modos ressonantes considerados ( $n = 2 - 5$ ),  $\lambda$  diverge da forma  $\lambda \propto |\omega - \omega_r|^{-2,00(5)}$ . Esta divergência é a mesma encontrada na referência (ESMAILPOUR et al., 2008) e que caracteriza a existência dos  $\sqrt{N}$  modos estendidos de acordo com (DUNLAP; WU; PHILLIPS, 1990). Este comportamento aparenta ser uma assinatura das correlações locais do tipo dímeros.

Aplicamos o método das diferenças finitas com discretização de segunda ordem em ambas as variáveis espaciais e temporais. Na forma discretizada,  $\psi(x, t)$  é escrito como  $\psi_i^j$ , onde  $j$  denota o número do passo temporal e  $i$  é o número do ponto na grade. Desta forma a derivada temporal na equação 2.13 é dada por

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(x, t) \approx \frac{\psi_i^{j+1} - 2\psi_i^j + \psi_i^{j-1}}{\Delta t^2}, \quad (3.1)$$

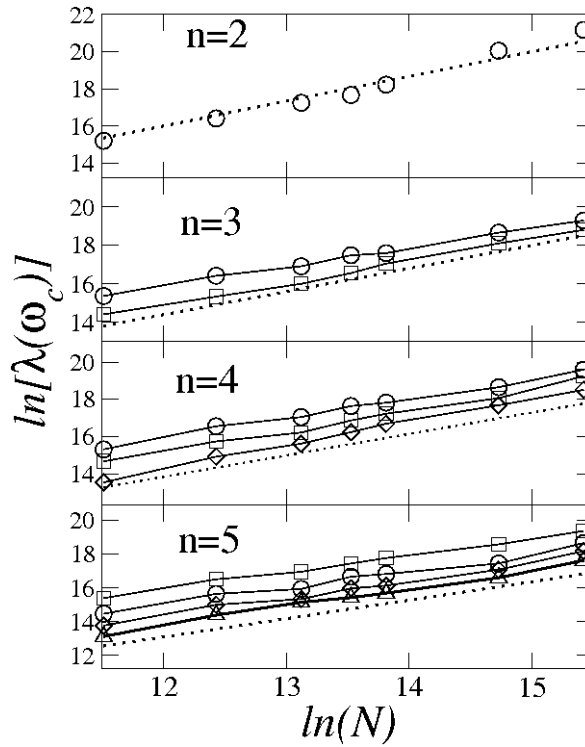


Figura 3:  $\ln \lambda(\omega = \omega_r) \times \ln N$  para um  $n$ -ímero unidimensional. As linhas tracejadas representam o comportamento estendido  $\lambda \propto N$ . Nossos cálculos revelam a natureza estendida das ressonâncias no  $n$ -ímero.

onde  $\Delta t$  é o tamanho do passo temporal. A derivada espacial pode ser escrita como

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[ \eta(x) \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} \right] \approx \frac{1}{\Delta x^2} [\eta_i (\psi_{i+1}^j - \psi_i^j) - \eta_{i-1} (\psi_i^j - \psi_{i-1}^j)]. \quad (3.2)$$

Nos cálculos realizados o espaçamento  $\Delta x$  entre dois pontos da grade foi imposto como  $\Delta x = 1$ . Para garantir a estabilidade numérica da equações discretizadas iremos usar  $\Delta t < \Delta x/20$ . A análise dinâmica foi tomada enviando uma onda de um lado da cadeia ( $L = 0$ ) e guardando a onda transmitida próxima ao outro lado da rede ( $L = 20000$ ). Calculamos a intensidade do espectro de onda transmitido na posição  $L$  definido por

$$A(\omega) = (1/2)|\psi_L(\omega)|^2 \quad (3.3)$$

onde  $\psi_L(\omega)$  é a transformada de Fourier da onda transmitida  $\psi_L(t)$  na posição  $L = 20000$ . Para modos acústicos transmitidos  $A(\omega) > 0$  e tende a zero para os modos filtrados. Nos nossos cálculos dinâmicos o comprimento da rede foi  $N = 30000$ . Na figura 5 apresentamos a dependência do espectro da onda transmitida  $A(\omega)$  com a frequência  $\omega$  para a análise dinâmica do problema. O pulso incidente que utilizamos é da forma  $\Psi_0(t) = \exp[-(t - t_0)^2/2\sigma_t^2] \cos(\omega t)$  com  $\sigma_t = 1/\sigma_\omega = 1/20$ . A média do espectro de



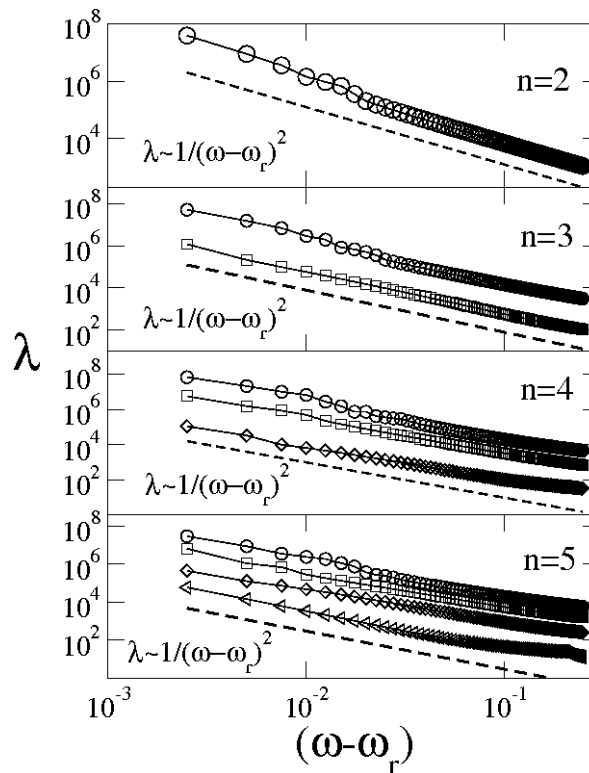


Figura 4: Gráfico logarítmico de  $\lambda \times (\omega - \omega_r)$ . Os cálculos foram feitos utilizando os mesmos parâmetros como nas figuras 2 e 3. Foi encontrado que para os modos ressonantes considerados  $\lambda$  diverge como  $\lambda \propto |\omega - \omega_r|^{-2,00(5)}$ .

intensidade foi obtido utilizando 30 realizações da desordem. Concordando com os resultados obtidos previamente, todos os modos com  $\omega \neq \omega_r$  decaem e o meio transmite somente as frequências  $\omega_r$ .

Usaremos na próxima sessão, argumentos analíticos para demonstrar a existência dessas  $n - 1$  frequências ressonantes, e desenvolver um cálculo que nos permita encontrar os valores de  $\omega_r$  para qualquer  $n$ .

## 3.2 Análise Analítica

Para calcular as frequências ressonantes, deduziremos as condições necessárias nas quais o sistema de dímeros medie a propagação da onda como um sistema ordenado. Para tal, notemos que existem apenas quatro diferentes matrizes de transferência, que são dadas por

$$T_{AA} = \begin{bmatrix} \frac{2\eta_A - \omega^2}{\eta_A} & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad T_{BA} = \begin{bmatrix} \frac{\eta_A + \eta_B - \omega^2}{\eta_B} & -\frac{\eta_A}{\eta_B} \\ 1 & 0 \end{bmatrix},$$

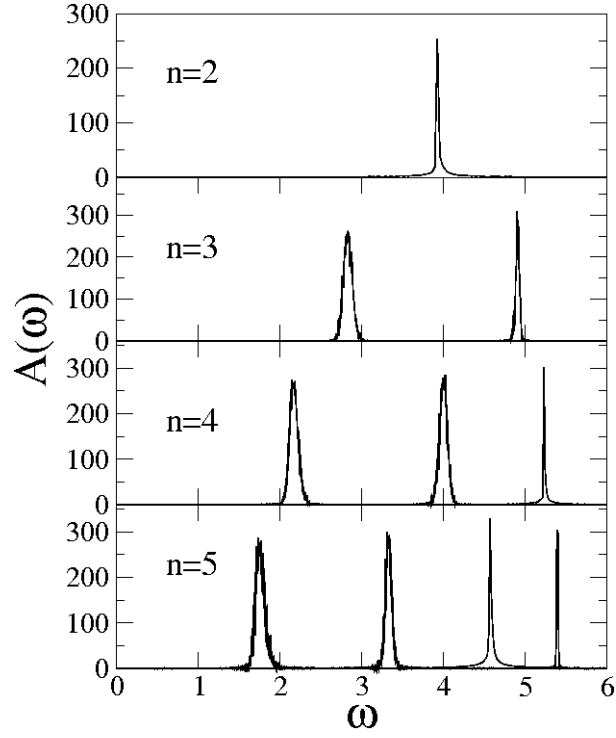


Figura 5: Espectro de intensidade do pulso de onda transmitido através do meio elástico  $n$ -ímero. De acordo com os resultados apresentados previamente, todos os modos com  $\omega \neq \omega_r$  decaem e o meio transmite apenas as frequências  $\omega_r$ .

as outras são obtidas pelas substituições  $A \rightarrow B$  e  $B \rightarrow A$ . O sistema estudado exige que o meio com a constante elástica  $\eta_A$  apareça sempre em seqüências de  $n$  repetições. A sequencia de camadas possuirá uma configuração do tipo  $\dots B^{b_m} A^{n a_m} B^{b_{m+1}} A^{n a_{m+1}} B^{b_{m+2}} \dots$ . Desta forma, podemos escrever  $Q_N$  como:

$$Q_N = \dots T_{BB}^{b_{m+2}-1} T_{BA} T_{AA}^{n a_{m+1}-1} T_{AB} T_{BB}^{b_{m+1}-1} T_{BA} T_{AA}^{n a_m-1} T_{AB} T_{BB}^{b_m-1} \dots$$

onde  $a_m$  é o número de camadas com constante elástica  $\eta_A$  e  $b_m$  o número de camadas com constante  $\eta_B$  na  $m$ -ésima aglutinação do modelo binário.

As matrizes de transferência descritas neste modelo apresentam uma característica importante para o nosso argumento. O cálculo de  $T_{BA} T_{AA}^{-1}$  nos leva a:

$$\begin{aligned} T_{BA} T_{AA}^{-1} &= \begin{bmatrix} \frac{\eta_A + \eta_B - \omega^2}{\eta_B} & -\frac{\eta_A}{\eta_B} \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & \frac{2\eta_A - \omega^2}{\eta_A} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \frac{\eta_A}{\eta_B} & 1 - \frac{\eta_A}{\eta_B} \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

e esta matriz apresenta uma importante propriedade

$$\begin{bmatrix} \frac{\eta_A}{\eta_B} & 1 - \frac{\eta_A}{\eta_B} \\ 0 & 1 \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{\eta_B}{\eta_A} & 1 - \frac{\eta_B}{\eta_A} \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (3.4)$$

ou seja, substituindo  $A \rightarrow B$  e  $B \rightarrow A$ , obtemos a inversa da matriz, ao mesmo tempo que esta substituição corresponde às matrizes  $T_{BB}$  e  $T_{AB}$ , disso chegamos à relação:

$$T_{BA}T_{AA}^{-1} = (T_{AB}T_{BB}^{-1})^{-1} \quad (3.5)$$

que tem por consequência

$$T_{BA}T_{AA}^{-1}T_{AB} = T_{BB}. \quad (3.6)$$

Devido à esta propriedade, podendo-se encontrar uma condição garantindo a eliminação das matrizes  $T_{AA}^n$ . A matriz  $Q_N$  pode ser simplificada num produto de matrizes  $T_{BB}$ , respondendo à vibração como um sistema ordenado. As frequências ressonantes serão aquelas que façam  $T_{AA}$  comutar com as outras, e para isto  $T_{AA}^n = k\mathbb{E}$ , um múltiplo da matriz identidade.

### 3.2.1 Matrizes Unimodulares

A matriz de transferência  $T_{AA}$  possui determinante unitário, desta forma é uma matriz  $2 \times 2$  Unimodular. Elas são descritas da seguinte maneira:

$$T = \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$$

e o determinante  $ad - bc = 1$  fornece  $cd = ad - 1$ . Em seguida temos

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}^2 &= \begin{bmatrix} a^2 + bc & ab + bd \\ ca + dc & cb + d^2 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} a^2 + ad - 1 & b(a + d) \\ c(a + d) & ad - 1 + d^2 \end{bmatrix} \\ &= (a + d) \begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix} - 1 \end{aligned}$$

e chamando  $x = \frac{a+d}{2}$ , vemos que a matriz unimodular apresenta a propriedade:

$$T^2 = 2xT - 1 \quad (3.7)$$

e que

$$T^n = T^2 T^{n-2} = 2xT^{n-1} - T^{n-2}. \quad (3.8)$$

Através de recorrência, representamos a matriz  $T^n$  em termos de  $T$  e da unidade.

$$\begin{aligned} T^n &= p_{n-1}(x)T + q_{n-1}(x) \\ &= p_{n-2}(x)T^2 + q_{n-2}(x)T \\ &= (2xp_{n-2}(x) + q_{n-2}(x))T - p_{n-2}(x) \end{aligned}$$

onde a função  $p_n(x)$  é definida por equações de recorrência, sendo  $q_n(x) = -p_{n-1}(x)$

$$p_0(x) = 1, \quad p_1(x) = 2x \quad (3.9)$$

$$p_{n+1}(x) = 2xp_n(x) - p_{n-1}(x). \quad (3.10)$$

Esses são os polinômios de Chebyshev, e sua forma analítica geral pode ser obtida verificando-se uma propriedade das funções trigonométricas

$$\sin(n+1)\theta = \sin n\theta \cos \theta + \cos n\theta \sin \theta$$

$$\sin(n-1)\theta = \sin n\theta \cos \theta - \cos n\theta \sin \theta$$

assumindo  $x = \cos \theta$  e satisfazendo  $p_0(x) = 1$ , deduzimos a forma trigonométrica dos polinômios de Chebyshev

$$p_n(x) = \frac{\sin(n+1)\theta}{\sin \theta}. \quad (3.11)$$

E, conforme esta forma trigonométrica, vemos que os polinômios de Chebyshev apresentam  $n$  raízes dadas por

$$x_c = \cos\left(\frac{m}{n+1}\pi\right), \quad m = 1, \dots, n \quad (3.12)$$

observando também que

$$p_{n-1}(x_c) = -(-1)^m. \quad (3.13)$$

### 3.2.2 Redução do Sistema à uma Cadeia Uniforme

Considerando as propriedades descritas acima, temos que  $T^n = p_{n-1}(x)T - p_{n-2}(x)\mathbb{E}$ . As frequências ressonantes devem ser aquelas tais que  $T^n = k\mathbb{E}$  em que desta forma a

matriz  $Q_N$  é transcrita como

$$\begin{aligned}
Q_N &= Q_N = T_{BB}^{b_{m+2}-1} T_{BA} T_{AA}^{na_{m+1}-1} T_{AB} T_{BB}^{b_{m+1}-1} T_{BA} T_{AA}^{na_m-1} T_{AB} T_{BB}^{b_m-1} \dots \\
&= \pm Q_N = T_{BB}^{b_{m+2}-1} T_{BA} T_{AA}^{-1} T_{AB} T_{BB}^{b_{m+1}-1} T_{BA} T_{AA}^{-1} T_{AB} T_{BB}^{b_m-1} \dots \\
&= \pm Q_N = T_{BB}^{b_{m+2}-1} T_{BB} T_{BB}^{b_{m+1}-1} T_{BB} T_{BB}^{b_m-1} \dots \\
&= \pm T_{BB}^{b_1+b_2+b_3+\dots+b_m+b_{m+1}+b_{m+2}-1}
\end{aligned}$$

Que recupera a simetria translacional de um sistema ordenado, portanto, permitindo a propagação da onda com a frequência ressonante.

As frequências permitidas no sistema são fornecidas assumindo  $x = 1 - \frac{\omega^2}{2\eta_A}$ . Buscando as soluções de  $p_{n-1}(x_m) = 0$  tais que  $T^n = (-1)^m$ , as frequências ressonantes serão dadas por:

$$\omega_m^2 = 2\eta_A (1 - x_m) \quad (3.14)$$

e utilizando 3.12, obtemos

$$\omega_m = 2 \sin\left(\frac{m\pi}{2n}\right) \sqrt{\eta_A}. \quad (3.15)$$

Podemos comparar estes valores com os gráficos obtidos pela análise numérica, e obter uma correspondência entre os valores numéricos e analíticos.

Comparando este resultado com o sistema da cadeia carregada, encontramos uma semelhança entre as fórmulas das frequências permitidas naquele sistema, e as frequências ressonantes do problema do  $n$ -ímero. Esta analogia nos ajuda a entender que os modos permitidos neste modelo, só são assim permitidos, pois não provocam mudança efetiva na fase da onda ao atravessar esta série de  $n$  camadas. Assim como na cadeia carregada, os modos possíveis são aqueles que se adequam às condições de contornos que impõem  $a_0 = a_{N+1} = 0$ , a fase de entrada nas camadas precisam ser a mesma fase de saída, a menos de um sinal. Através desta condição, a onda para tais frequências sofrerá interferência apenas com os sítios de constante elástica  $\eta_B$ . Consistindo assim de um meio ordenado, que, assim como a cadeia carregada de  $N$  elementos permite  $N$  frequências, permite a existência de  $n - 1$  modos ressonantes que transmitem as ondas através do meio.

## 4 *Considerações Finais*

Neste trabalho foi considerado a propagação de ondas acústicas num meio unidimensional com desordem correlacionada de curto alcance. A distribuição de elasticidade considerada foi a de  $n$ -ímeros aleatórios, que possuem constantes elásticas  $\eta_A$  e  $\eta_B$  com os valores  $\eta_A$  aparecendo sempre em segmentos finitos de comprimento  $n$ . Aplicamos análises numérica e simulações para mostrar a existência de modos normais que se propagam ao longo do meio devido às correlações. A análise numérica do coeficiente de Lyapunov através do método das matrizes de transferência evidenciou os modos ressonantes e a dependência destas frequências às quais ocorrem a transmissão, com o coeficiente de elasticidade dos sítios repetidos. Os resultados então indicam a presença de  $n - 1$  estados estendidos com comprimento de localização proporcional ao tamanho da rede  $\lambda(\omega_r) \propto N$ . Foi mostrado também que o comprimento de localização para as frequências próximas às de ressonância decaem de forma quadrática  $\lambda(\omega) \propto |\omega - \omega_r|^2$ . Isto indica que este decaimento quadrático que permite a existência de até  $\sqrt{N}$  estados estendidos na rede seja uma característica universal associada com correlações locais do tipo  $n$ -ímero.

Além disto, realizando uma simulação direta resolvendo a equação de onda escalar, mostramos que a cadeia localiza todas as frequências contidas no pulso de onda, exceto para as frequências ressonantes. Esta propriedade pode ser vista como possível utilização em sistemas físicos ondulatórios em geral, para a obtenção de filtros de onda, que permitem a passagem de apenas alguns comprimentos de onda selecionados.

Por último, uma análise analítica nos permitiu encontrar tais frequências ressonantes, e mostrar que existem apenas  $n - 1$  delas. Utilizou-se a analogia com o sistema homogêneo da cadeia carregada, e o método das matrizes de transferência, para encontrar as frequências ressonantes que permitem a onda atravessar as  $n$  camadas sem sofrer reflexões que poderiam causar a localização devido à desordem.

De acordo com o contexto de trabalhos recentes sobre ondas acústicas em meios de baixa dimensionalidade com desordem correlacionada, estes resultados estenderam algu-

mas afirmações anteriores acerca da existência de modos ressonantes em meios elásticos  $1D$  com desordem correlacionada. Mostramos a existência de uma estrutura de múltiplas ressonâncias neste meio que tem especificidades similares as encontradas no modelo de dímeros aleatórios com desordem correlacionada.

## *Referências*

- ABRAHAMAS, E. et al. Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 42, p. 673–676, Mar 1979. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.42.673>>.
- ANDERSON, P. W. Absence of diffusion in certain random lattices. *Phys. Rev.*, American Physical Society, v. 109, p. 1492–1505, Mar 1958. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.109.1492>>.
- BALUNI, V.; WILLEMSSEN, J. Transmission of acoustic waves in a random layered medium. *Phys. Rev. A*, American Physical Society, v. 31, p. 3358–3363, May 1985. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.31.3358>>.
- BARROS, D. F.; COSTA, A. E. B.; MOURA, F. A. B. F. de. Extended acoustic modes in random systems with  $n$ -mer short range correlations. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 23, n. 34, p. 345404, 2011. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0953-8984/23/i=34/a=345404>>.
- BORLAND, R. E. The nature of the electronic states in disordered one-dimensional systems. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, v. 274, n. 1359, p. 529–545, 1963. Disponível em: <<http://rspa.royalsocietypublishing.org/content/274/1359/529.abstract>>.
- CAO, L. S. et al. Delocalization of phonons and quantized thermal conductance in a random  $n$ -mer system. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 72, p. 214301, Dec 2005. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.72.214301>>.
- CHERAGHCHI, H.; FAZELI, S. M.; ESFARJANI, K. Localization-delocalization transition in a one one-dimensional system with long-range correlated off-diagonal disorder. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 72, p. 174207, Nov 2005. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.72.174207>>.
- COSTA, A. E.; MOURA, F. A. de. Extended acoustic waves in a one-dimensional aperiodic system. *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*, Springer Berlin / Heidelberg, v. 79, p. 253–256, 2011. ISSN 1434-6028. 10.1140/epjb/e2010-10840-2. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2010-10840-2>>.
- COSTA, A. E.; MOURA, F. de. Extended acoustic waves in diluted random systems. *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*, Springer Berlin / Heidelberg, v. 80, p. 59–63, 2011. ISSN 1434-6028. 10.1140/epjb/e2011-20016-3. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2011-20016-3>>.



- COSTA, A. E. B.; MOURA, F. A. B. F. de. Absence of localized acoustic waves in a scale-free correlated random system. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 23, n. 6, p. 065101, 2011. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0953-8984/23/i=6/a=065101>>.
- DEAN, P. Vibrations of glass-like disordered chains. *Proceedings of the Physical Society*, v. 84, n. 5, p. 727, 1964. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0370-1328/84/i=5/a=310>>.
- DOMÍNGUEZ-ADAME, F.; MACIÁ, E.; SÁNCHEZ, A. Delocalized vibrations in classical random chains. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 48, p. 6054–6057, Sep 1993. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.48.6054>>.
- DOMÍNGUEZ-ADAME, F. et al. Bloch-like oscillations in a one-dimensional lattice with long-range correlated disorder. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 91, p. 197402, Nov 2003. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.91.197402>>.
- DUNLAP, D. H.; WU, H.-L.; PHILLIPS, P. W. Absence of localization in a random-dimer model. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 65, p. 88–91, Jul 1990. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.65.88>>.
- ESMAILPOUR, A. et al. Localization properties of acoustic waves in the random-dimer media. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 78, p. 134206, Oct 2008. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.78.134206>>.
- FEYNMAN, R. P.; LEIGHTON, R. B.; SANDS, M. *The Feynman Lectures on Physics*. [S.l.]: Addison-Wesley Publishing Co., 1998.
- FLORES, J. C. Transport in models with correlated diagonal and off-diagonal disorder. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 1, n. 44, p. 8471, 1989. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0953-8984/1/i=44/a=017>>.
- HE, S.; MAYNARD, J. D. Detailed measurements of inelastic scattering in anderson localization. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 57, p. 3171–3174, Dec 1986. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.57.3171>>.
- IZRAILEV, F. M.; KROKHIN, A. A. Localization and the mobility edge in one-dimensional potentials with correlated disorder. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 82, p. 4062–4065, May 1999. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.82.4062>>.
- KUHL F. M. IZRAILEV, A. A. K. U.; STÖCKMANN, H.-J. Experimental observation of the mobility edge in a waveguide with correlated disorder. *Appl. Phys. Lett.*, American Institute of Physics, v. 77, p. 633–635, Apr 2000. Disponível em: <[http://apl.aip.org/resource/1/applab/v77/i5/p633\\_s1](http://apl.aip.org/resource/1/applab/v77/i5/p633_s1)>.
- LEI, X.-Y. et al. Novel application of a perturbed photonic crystal: High-quality filter. *Applied Physics Letters*, AIP, v. 71, n. 20, p. 2889–2891, 1997. Disponível em: <<http://link.aip.org/link/?APL/71/2889/1>>.
- MAYNARD, J. D. Acoustical analogs of condensed-matter problems. *Rev. Mod. Phys.*, American Physical Society, v. 73, p. 401–417, May 2001. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.73.401>>.

MOURA, F. A. B. F. de et al. Delocalization and ballistic dynamics in the two-dimensional anderson model with long-range correlated disorder. *EPL (Europhysics Letters)*, v. 66, n. 4, p. 585, 2004. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0295-5075/66/i=4/a=585>>.

MOURA, F. A. B. F. de; LYRA, M. L. Delocalization in the 1d anderson model with long-range correlated disorder. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 81, p. 3735–3738, Oct 1998. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.81.3735>>.

MOURA, F. de; DOMÍNGUEZ-ADAME, F. Extended modes and energy dynamics in two-dimensional lattices with correlated disorder. *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*, Springer Berlin / Heidelberg, v. 66, p. 165–169, 2008. ISSN 1434-6028. 10.1140/epjb/e2008-00393-4. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2008-00393-4>>.

OKBANI, Z.; OUSTI, R.; ZEKRI, N. Nature of the extended states in one-dimensional random trimers. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, v. 234, n. 1–2, p. 38 – 52, 1996. ISSN 0378-4371. Disponível em: <<http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0378437196003226>>.

PHILLIPS, P.; WU, H.-L. Localization and its absence: A new metallic state for conducting polymers. *Science*, v. 252, n. 5014, p. 1805–1812, 1991. Disponível em: <<http://www.sciencemag.org/content/252/5014/1805.abstract>>.

SANTOS, I. F. dos et al. Critical behavior of the two-dimensional anderson model with long-range correlated disorder. *Journal of Physics: Condensed Matter*, v. 19, n. 47, p. 476213, 2007. Disponível em: <<http://stacks.iop.org/0953-8984/19/i=47/a=476213>>.

WU, H.-L.; GOFF, W.; PHILLIPS, P. Insulator-metal transitions in random lattices containing symmetrical defects. *Phys. Rev. B*, American Physical Society, v. 45, p. 1623–1628, Jan 1992. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.45.1623>>.

WU, H.-L.; PHILLIPS, P. Polyaniline is a random-dimer model: A new transport mechanism for conducting polymers. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 66, p. 1366–1369, Mar 1991. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.66.1366>>.

ZHANG, G.-P.; XIONG, S.-J. Localization-delocalization transition in one-dimensional system with long-range correlated diagonal disorder. *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*, Springer Berlin / Heidelberg, v. 29, p. 491–495, 2002. ISSN 1434-6028. 10.1140/epjb/e2002-00330-7. Disponível em: <<http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2002-00330-7>>.

ZIMAN, T. A. L. Localization and spectral singularities in random chains. *Phys. Rev. Lett.*, American Physical Society, v. 49, p. 337–340, Aug 1982. Disponível em: <<http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.49.337>>.