

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

**Cadeias com Desordem Correlacionada nas
Constantes de Força Harmônica**

MANOEL PEREIRA DA SILVA JÚNIOR

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E NATURAIS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

Cadeias com Desordem Correlacionada nas Constantes de Força Harmônica

MANOEL PEREIRA DA SILVA JÚNIOR

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado no
Departamento de Física da Universidade Federal
de Alagoas como parte dos requisitos para
obtenção do título de Bacharel em Física

Orientador: Francisco A. B. Fidelis de Moura

Maceió - Alagoas - Brasil

Março - 2006

AGRADECIMENTOS

Neste espaço tentarei demonstrar toda minha gratidão aqueles que de alguma forma contribuíram com minha formação .

Eis os nomes:

Prof. Francisco A. B. Fidelis de Moura, orientador, que além de sua total dedicação na orientação deste trabalho, se mostrou um verdadeiro amigo, ajudando e incentivando em muitas horas difíceis, agradeço por sua paciência; *Prof. Marcelo Leite Lyra*, que me deu o incentivo inicial para minha vinda a este curso (creio que nem ele sabe disso), agradeço pelas disciplinas em que fui seu aluno e pelos os anos de co-orientação; *Prof. Marcos V. D. Vermelho*, pela orientação no início da minha jornada em física e por sua amizade; *Prof. Heber Ribeiro da Cruz*, por suas aulas em todas as disciplinas em que fui seu aluno, em especial métodos computacionais; *Prof. Jenner B. B. Filho*, por sua amizade e sobretudo pelas ótimas conversas sobre filosofia da ciência; *Prof. Jandir M. Hickmann*, por suas aulas em mecânica quântica, e principalmente por seus incentivos nesta reta final; *Prof. Kleber Serra*, *Prof. M. V. Gandhi Mohan* e *Prof. Evandro Gouveia*, pessoas a quem eu admiro muito.

Agradeço a todos os outros professores do DF-UFAL.

Ednaldo Tenório Barros e *Carlos Argolo*, professores do CEFET-AL, Pelo seus incentivos, e sobretudo por suas amizades.

Aos meus **grandes AMIGOS**:

Cícero Rita da Silva; *Francisco de Assis G. M. Rego Filho*; *Caio Leite Faustino*; *Beethoven dos Santos* e meus **IRMÃOS Askery A. C. Barbosa da Silva** e **Jorge Luiz Araujo Rocha**, por suas imensas amizades durante todos esses anos.

Aos amigos:

Samuel de Albuquerque; Rafael Duarte; André de Moura; Prof. Sabino Chavez; Willamis Cristiano; Hélcio Bezerra; Ítalo Marcos; Pedro Valentim; Dário; Dainy Pacheco; Wagner; Vinícius Manzoni; Thiago Bento; Lucas Maia; Jadielson; Itamar Vidal; Marcelo Felisberto; Jobson; Agnaldo; Rodrigo Oliveira; João Francisco; Rodrigo Trindade; Geraldo; Frederico; João Bosco; Rogério; e amigas: Thaís Freitas; Taísa Bibiano; Rosa Carolina; Patricia; Lidiane; Emanuelle; E tantos outros. Pelos momentos de descontração no do dia-a-dia.

A todos os amigos, incluindo meus grandes amigos do CEFET-AL, que com muito carinho, fazem parte da minha vida, e que contribuíram diretamente ou indiretamente na realização deste trabalho.

Ao CNPq e a FAPEAL pelo apóio financeiro.

Aos meus primos, primas, tios, tias, enfim todos os meus parentes, junto com todos os meus amigos do velho e bom jacintinho, que fizeram dos fins de semanas na casa de minha avô, um bom refúgio e um ótimo lugar para retirar todo o estresse do dia-a dia.

A minha querida *Gabi*, por todo o carinho e compreensão, e também por sua enorme paciência. A você, meus agradecimentos especiais e todo o meu amor.

Aos meus pais *Manoel* e *Marineide*, e minha irmã *Manuelle*, por todo o amor e por todo o apóio dado a mim em todas as etapas da minha vida. Sou eternamente grato.

Por último Agradeço a DEUS por esta oportunidade.

RESUMO

Modos vibracionais localizados surgem em cadeias harmônicas com desordem na distribuição de massas, ou na distribuição de constantes de acoplamento. Esta localização dos estados pode ser compreendida a luz da teoria de localização de Anderson para elétrons não interagentes em sólidos amorfos. Neste trabalho analisaremos a natureza dos modos vibracionais de cadeias harmônicas com desordem correlacionada. Vamos construir uma distribuição de constantes de força que, apesar de ser aleatória, apresente uma densidade espectral tipo lei de potência $S(k) \propto 1/k^\alpha$. Sequências com este tipo de propriedade apresentam funções de correlação de longo alcance onde o parâmetro α mede o grau de correlação na desordem. Para $\alpha = 0$ recuperamos uma cadeia harmônica usual onde todos os modos vibracionais são estendidos exceto o modo uniforme $\omega = 0$. Utilizando um formalismo de diagonalização exata sobre a matriz secular deste sistema clássico calculamos os modos vibracionais e estimamos a largura espacial dos modos. Nossos resultados indicam que para fortes graus de desordem $\alpha > 2$ o sistema apresenta modos vibracionais estendidos na região de frequência baixa $\omega < \omega_c$. Existem modos vibracionais localizados com $\omega > 0$ para valores de $\alpha < 2$. Este trabalho é organizado da seguinte forma: No capítulo de introdução apresentaremos uma breve revisão de algumas propriedades de cadeias harmônicas cristalinas. Nisto veremos que a relação de dispersão de uma cadeia cristalina diatômica, apresenta duas ramificação, ramo *acústico* e ramo *ótico*, onde o ramo acústico é qualitativamente igual a curva de dispersão de uma cadeia monoatômica. Um *band gap*, surge na região de frequências entre os dois ramos. Em seguida apresentaremos uma breve revisão sobre modos vibracionais em sistemas amorfos. No capítulo 2 apresentaremos nosso estudo sobre modos vibracionais em sistemas correlacionados.

Sumário

Folha de rosto	i
Agradecimentos	ii
Resumo	iv
1 Vibrações em Cadeia Harmônica	1
1.1 Introdução	1
1.2 Aproximação Harmônica	2
1.3 Vibrações em Meios Cristalinos	5
1.3.1 Modos Vibracionais de uma Cadeia Monoatômica	5
1.3.2 Modos Vibracionais de uma Cadeia Diatômica	11
1.4 Modos Vibracionais de uma Cadeia Harmônica com Desordem	17
2 Modos vibracionais em cadeias Harmônicas com Desordem Correlacionada	19
2.1 Introdução	19
2.2 Distribuição das constantes de mola	20
2.3 Cadeia harmônica com desordem correlacionada	21
3 Conclusões	27
Referências	29

A - Apêndices	32
A.1 Algoritmo Computacional	32

Capítulo 1

Vibrações em Cadeia Harmônica

1.1 Introdução

Sólidos cristalinos ideais são vistos, como estruturas, onde seus constituintes, grupos de átomos ou moléculas, encontram-se em repouso nas posições determinadas pela rede. Contudo este conceito de imobilidade é uma representação grosseira da realidade que apresenta, entre outros, os seguintes inconvenientes:

- A temperatura de um sólido pode ser relacionada a energia cinética associada ao movimento microscópico dos átomos que o constituem. Supondo os átomos em repouso esta relação não é mais possível.
- O som consiste em ondas mecânicas, i.e, variações infinitesimais nas posições dos átomos que se transmitem aos átomos vizinhos, propagando-se desta forma nos meios materiais. Aceitando a hipótese da imobilidade dos átomos nos sólidos cristalinos, estes deveriam ser isoladores sonoros, o que claramente não se verifica.

Muitos outros argumentos poderiam ser apresentados[1]. Independente destas razões, o modelo estático dos sólidos cristalinos se torna impossível do ponto de vista quântico, por violar o princípio de incerteza de Heisenberg. Com efeito, quanto maior for a precisão na determinação das posições dos átomos do cristal, menor será a precisão com que podemos conhecer as suas quantidades de movimento, e portanto menos razoável é supô-las em repouso.

Neste capítulo, abandonaremos esta hipótese de imobilidade atômica. Apresentaremos algumas propriedades das vibrações em meios cristalinos, modelando um sólido cristalino por uma cadeia de osciladores harmônicos. Veremos que quando temos mais de um tipo de átomo na base surgem ramos, designados de ramos *acústicos* e *óticos* na relação de dispersão, além do surgimento de uma *band gap*. Por fim, veremos que em cadeias harmônicas desordenadas surgem estados localizados para frequências não nulas ($\omega > 0$).

1.2 Aproximação Harmônica

A disposição dos átomos na estrutura cristalina traduz-se numa energia potencial de configuração, que consiste na energia de interação de cada átomo com os restantes. Como sabemos, na configuração de equilíbrio, os átomos assumem posições, $\vec{r} = R_0$, que correspondem aos mínimos da energia potencial $U(\vec{r})$ do sólido. Figura (1.1).

Numa primeira aproximação, esta energia de interação pode ser aproximada por uma parábola, de forma que o movimento dos átomos seja descrito pelas mesmas relações de um oscilador harmônico. Se tomarmos pequenos deslocamentos em torno da posição de equilíbrio R_0 , ou seja, $|u| = |R - R_0| \ll R_0$, e expandindo a energia

potencial em uma série de Taylor, em torno de R_0 , temos:

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

O primeiro termo da equação (1.1), de ordem zero, é uma constante, e portanto não interfere na dinâmica do sólido. Este termo representa a contribuição dos átomos considerados para a energia de ligação do sólido. O termo de primeira ordem é proporcional ao gradiente da energia calculado na configuração de equilíbrio, onde a energia potencial apresenta um mínimo, portanto este termo é nulo. O termo de segunda ordem é proporcional ao quadrado do deslocamento em torno da posição de equilíbrio. Os termos de ordem mais alta são desprezíveis para pequenos deslocamentos. Assim, a energia de interação é dada por:

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

onde $C = \left(\frac{d^2U}{du^2}\right)_{u=0}$. A resultante das forças que atuam num átomo é dado pelo gradiente da energia potencial:

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

A eq. (1.2) corresponde à expressão da energia potencial de um oscilador harmônico em uma dimensão. Esta implica que, para pequenos deslocamentos em torno da posição de equilíbrio, os átomos se comportam como duas massas ligadas por uma mola, ou seja, numa primeira aproximação uma rede cristalina pode ser modelada por uma cadeia de osciladores harmônicos. No caso mais geral, uma rede cristalina tridimensional, é sempre possível escolher um sistema de coordenadas xyz

no qual a energia potencial toma a seguinte forma:

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

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

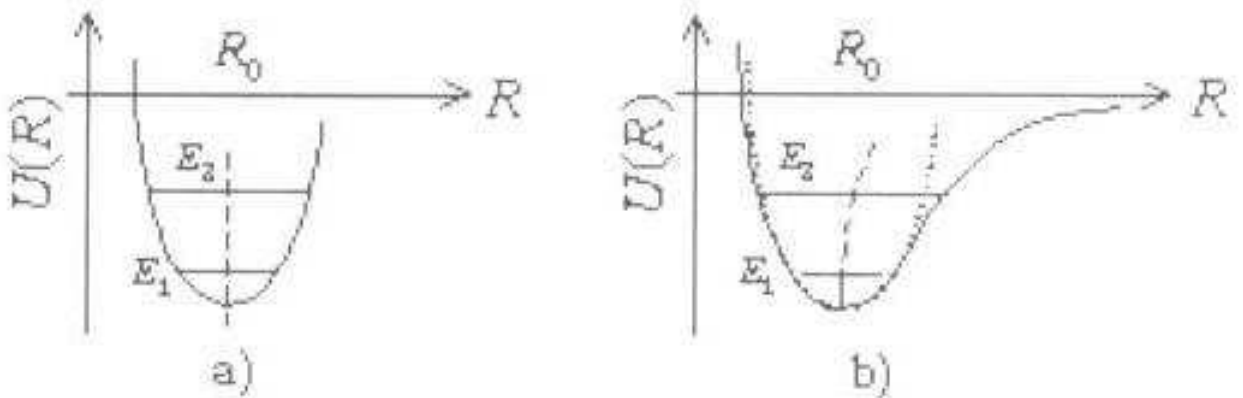


Figura 1.1: Energia potencial de um sistema de dois átomos: aproximações a) harmônica e b) anarmônica. E_1 e E_2 representam dois possíveis níveis de energia de vibração.

No caso da energia potencial ser quadrática, fig. (1.1a), e.q (1.2), a força resultante exercida entre os átomos é linear ao deslocamento, eq. (1.3). Para cada energia, as intersecções de uma linha horizontal com a curva da energia nos dá à amplitude das vibrações e o ponto médio da linha horizontal entre as intersecções nos informa a separação média entre os átomos. O aumento da temperatura, acarreta em um aumento da energia potencial, contudo este aumento de energia só leva a uma alteração da separação média entre os átomos se a energia potencial não for simétrica ao mínimo, fig. (1.1b). Uma energia potencial não quadrática, origina forças não lineares ao deslocamento. Para a maioria dos sólidos a energia de interação é não quadrática em \vec{u} .

Os termos de ordem superior à segunda, ou termos anarmônicos em \vec{u} , não presentes em (1.2), permitem explicar vários fenômenos importantes. Por exemplo, a transferência de energia entre os modos de vibração, quando existe um gradiente de temperatura ao longo do sólido, bem como a expansão térmica.

Portanto, quando limitamos o estudo das vibrações de um sólido a pequenas oscilações, $|u| = |R - R_0| \ll R_0$, Podemos tratar as interações entre os átomos como forças elásticas harmônicas, o que permite grandes simplificações. Neste trabalho utilizaremos, sempre, potenciais harmônicos.

1.3 Vibrações em Meios Cristalinos

Num meio cristalino há dois fatores que complicam o estudo de vibrações: o primeiro é que em geral um meio cristalino é composto por mais de um elemento; o segundo é a tridimensionalidade do sistema. Contudo, numa aproximação, as propriedades vibracionais de um cristal tridimensional são qualitativamente semelhantes às de um cristal unidimensional.

A abordagem unidimensional é bastante instrutiva, na medida em que permite obter, com facilidade, resultados que constituem versões simplificadas do que os de um estudo mais geral, mas que, apesar disso, ilustram igualmente os principais fenômenos físicos associados às vibrações num meio cristalino. Por esta razão, nos prenderemos aqui, a tratar apenas de redes unidimensionais.

1.3.1 Modos Vibracionais de uma Cadeia Monoatômica

Consideremos uma cadeia linear, composta de átomos idênticos, espaçados entre si por uma distância a - parâmetro da rede cristalina, fig. (1.2).

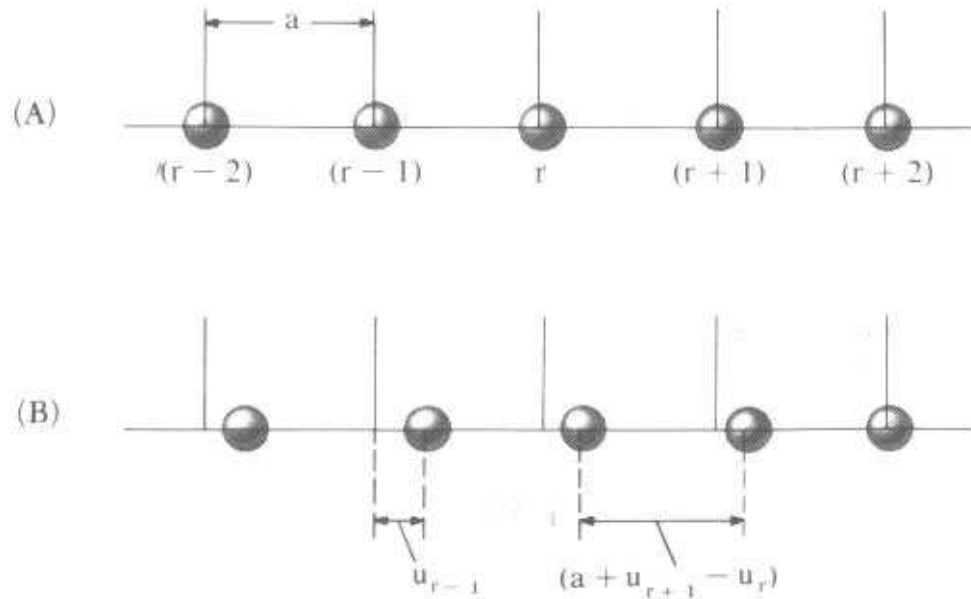


Figura 1.2: Modelo de um cristal monoatômico linear. (A) nas posições de equilíbrio, e (B) deslocados pela passagem de uma onda longitudinal.

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

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

p varia segundo números inteiros positivos e negativos e C_p é a constante da força entre os átomos p e $r+p$.

A equação de movimento do átomo r é dada por:

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

sendo m a massa de um átomo. Assumindo soluções do tipo $u_s(t) = u_0 e^{i(ska - \omega t)}$,

i.e., uma onda progressiva de frequência ω e vetor de onda \vec{k} , a eq. (1.6) se torna:

$$-m\omega^2 u_r(t) = \sum_p C_p u_r(t) [e^{ipka} - 1]. \quad (1.7)$$

Esta relação pode também ser escrita como:

$$-m\omega^2 u_r(t) = \sum_{p_+} C_{p_+} u_r(t) [e^{+ip_+ka} - 1] + \sum_{p_-} C_{p_-} u_r(t) [e^{+ip_-ka} - 1], \quad (1.8)$$

onde p_+ e p_- representam, respectivamente, os valores para p positivos e negativos.

Dada a simetria de translação, $C_{p_+} = C_{p_-}$, e considerando $p = p_+ = -p_-$, o reagrupamento dos dois somatórios da eq. (1.8) resulta em:

$$-m\omega^2 u_r(t) = \sum_{p>0} C_p u_r(t) [e^{ipka} + e^{-ipka} - 2]. \quad (1.9)$$

Usando a identidade $2 \cos pka = e^{ipka} + e^{-ipka}$ e cancelando $u_r(t)$ de ambos os membros, temos a relação que conecta ω com \vec{k} , conhecida como relação de dispersão.

$$\omega^2 = \frac{2}{m} \sum_{p>0} C_p (1 - \cos pka) \quad (1.10)$$

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

$$\omega^2 = \frac{4}{m} \sum_{p>0} C_p \sin^2 \frac{pka}{2} \quad (1.11)$$

onde, derivando ω^2 em relação a k , temos:

$$\frac{d\omega^2}{dk} = \frac{2}{m} \sum_p pa C_p \sin pka \quad (1.12)$$

de onde se conclui que ω^2 atinge um máximo para $k = \pm\pi/a$, já que, $\sin pka =$

$\sin p\pi = 0$.

Se existem interações somente entre primeiros vizinhos, i.e., p se restringe a ± 1 , a eq. (1.11) se torna:

$$\omega^2 = \frac{4C}{m} \sin^2 \frac{ka}{2}; \quad \omega = \pm \omega_m \left| \sin \frac{ka}{2} \right|, \quad (1.13)$$

onde $\omega_m = 2\sqrt{C/m}$. O sinal \pm da eq. (1.13) indica apenas a direção de propagação da vibração. Nos calculos futuros disconsideraremos este sinal.

A figura (1.3) mostra a forma da curva de dispersão, descrita pela eq. (1.13), i.e, para primeiros interações vizinhos. Para interações entre mais vizinhos, a curva é qualitativamente semelhante à mostrada.

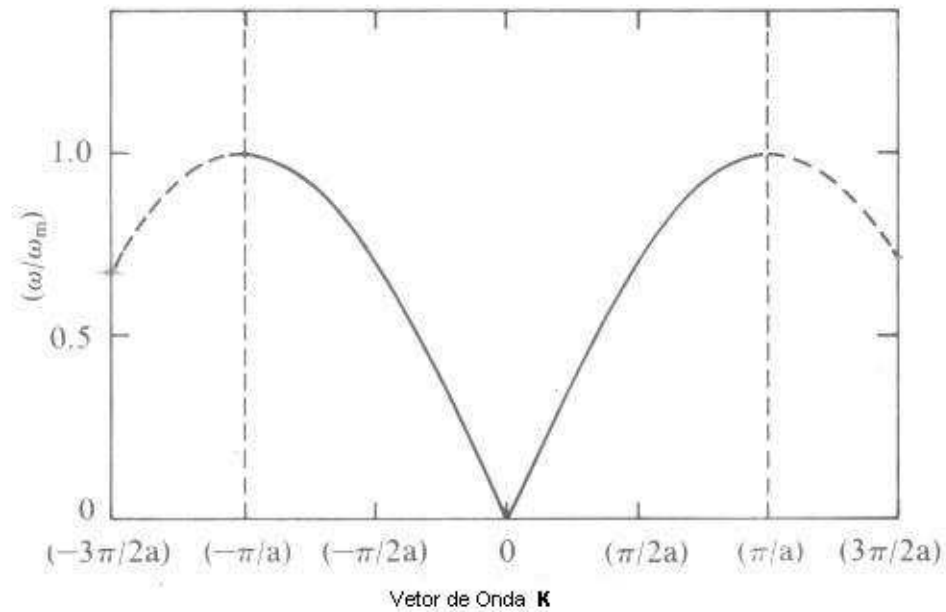


Figura 1.3: Relação de dispersão para uma rede monoatômica linear, considerando interações somente entre primeiros vizinhos, eq.(1.13). A faixa para a qual $|\vec{k}| \leq \pi/a$ é chamada de primeira zona de Brillouin.

Primeira Zona de Brillouin

Uma das principais características das Relações de dispersão em meios cristalinos unidimensionais, é o fato de ω ser uma função periódica em k , de período $2\pi/a$, ou seja,

$$\omega\left(k + \frac{2\pi}{a}\right) = \omega(k). \quad (1.14)$$

De fato, se considerarmos os deslocamentos entre dois átomos sucessivos, ou seja,

$$\frac{u_{r+1}}{u_r} = \frac{u_0 e^{i(r+1)ka}}{u_0 e^{irka}} = e^{ika}. \quad (1.15)$$

O intervalo de $-\pi$ até $+\pi$ para a fase ka cobre todos os valores independentes da exponencial. Portanto é de se esperar que seja suficiente conhecer a função $\omega(k)$ num intervalo de amplitude $2\pi/a$. Assim $\omega(k)$ é completamente definida no intervalo

$$k \in \left[-\frac{\pi}{a}, +\frac{\pi}{a}\right]. \quad (1.16)$$

Este intervalo é conhecido como primeira zona de Brillouin.

No limite da primeira zona de Brillouin, $k = \pm\pi/a$, a solução $u_r = u_0 e^{irka}$, se torna:

$$u_r = u_0 e^{\pm i\pi r} = e^{irka} = u_0 (-1)^r. \quad (1.17)$$

Esta não representa uma onda progressiva e sim uma onda estacionária. Neste caso, a onda não se propaga nem para a direita nem para a esquerda. Esta situação corresponde à reflexão de Bragg[3] dos raios X: quando a condição de Bragg é satisfeita, a onda sofre reflexões sucessivas para frente e para trás, produzindo-se uma onda estacionária. O valor de $k = \pm\pi/a$ satisfaz a condição de Bragg $2d \sin \theta = n\lambda$: temos $\theta = \pi/2$, $d = a$, $k = 2\pi/\lambda$, $n = 1$, de modo que $\lambda = 2a$.

Limite Contínuo

No Limite de grandes comprimentos de onda, ou limite contínuo, ou seja, $pka \ll 1$, visto que $k = 2\pi/\lambda$, pode-se escrever $\cos pka \cong 1 - (pka)^2/2$ ou $\sin^2 pka \cong (pka/2)^2$. Assim, a relação de dispersão se torna:

$$\omega^2 = k^2 \left(\frac{a^2}{m} \sum_{p>0} p^2 C_p \right). \quad (1.18)$$

Isto é, no limite de grandes comprimentos de onda a relação de dispersão $\omega(k)$ é, portanto linear em k , à semelhança das relações de dispersão para ondas em meio contínuo, que são dadas por $\omega = vk$. Considerando apenas as interações entre primeiros vizinhos, $p = 1$, $\omega(k)$ é dada por:

$$\omega \approx 2\sqrt{\frac{C}{m}} \left| \frac{ka}{2} \right| = a\sqrt{\frac{C}{m}} |k|. \quad (1.19)$$

Velocidade de Grupo

A velocidade de grupo $v_g = \vec{\nabla}_k \omega(k)$, i.e, velocidade de um pacote de onda[2], para a relação (1.13), ou seja, considerando apenas interações primeiro vizinhos, é dada por:

$$v_g = \vec{\nabla}_k \omega(k) = \frac{d\omega}{dk} = a\sqrt{\frac{C}{m}} \cos \frac{ka}{2} \quad (1.20)$$

Da mesma forma que para o resultado geral dado pela eq. (1.12), a velocidade de grupo se anula no limite da zona, aqui também temos $v_g = 0$ para $k = \pm\pi/a$.

Das expressões (1.18) e (1.19) verifica-se que, no limite contínuo, a frequência angular, ω , é diretamente proporcional ao vetor de onda, k , o que é equivalente a dizer que a velocidade de propagação da vibração é independente da frequência. Neste caso as velocidades de fase, $v_f = \omega/k$, e de grupo $v_g = \frac{d\omega}{dk}$, das ondas são

iguais, podendo escrever para o limite contínuo que:

$$v_g = v_f \approx a\sqrt{\frac{C}{m}}. \quad (1.21)$$

Dedução da Constante de Força

É possível, a partir do conhecimento da relação de dispersão $\omega(k)$, estimar o alcance das forças efetivas entre os átomos. Por exemplo, nos metais as forças podem ser de muito longo alcance. Foram observados efeitos entre átomos separados até vinte vezes a distância atômica.[4]

Podemos determinar C_p multiplicando ambos os membros da eq. (1.10) por $\cos rka$, onde r é um inteiro, e, integrando sobre o intervalo de valores independentes de k :

$$m \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk \omega \cos rka = 2 \sum_{p>0} C_p \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk (1 - \cos pka) \cos rka. \quad (1.22)$$

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

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

que nos resulta em:

$$C_p = -\frac{ma}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk \omega \cos pka \quad (1.24)$$

A constante C_p corresponde à transformada de Fourier de ω^2 em função de k . Esta relação só é válida apenas para redes monoatômicas.[5, 6, 7]

1.3.2 Modos Vibracionais de uma Cadeia Diatômica

A análise que se segue é semelhante ao estudo realizado na secção anterior, embora, o comportamento das cadeias diatômicas se diferencie do das cadeias monoatômicas em alguns aspectos interessantes. Como veremos, ao contrário das cadeias monoatômicas, a relação de dispersão $\omega(k)$ para uma cadeia diatômica unidimensional possui dois ramos, designados por *ramo acústico* e *ramo óptico*. Cada um desses se decompõem em longitudinais e transversais. No final desta secção voltaremos a este assunto.

Consideremos um cristal cúbico constituído por átomos de massas m_1 situados sobre um conjunto de planos e por átomos de massa m_2 situados em planos intermediários aos planos do primeiro conjunto, fig. (1.4). Não é necessário que os átomos sejam diferentes, porém ou as constantes de força ou as massas deverão ser diferentes se os átomos da base não forem equivalentes. Assume-se que o parâmetro da rede na direção perpendicular aos planos considerados seja a . Vamos considerar ondas se propagando na direção para a qual cada plano considerado contém apenas um tipo de átomos. Estas direções são asseguradas na direção [111] para estrutura do tipo do NaCl e na direção [100] em estrutura do tipo CsCl. Assim, o problema se torna unidimensional.

Considerando apenas interações entre primeiros vizinhos, podemos escrever as equações de movimento para cada tipo de átomo, tomando como base a figura (1.4), por:

$$\begin{aligned} m_1 \frac{d^2 u_s}{dt^2} &= C(v_s + v_{s-1} - 2u_s); \\ m_2 \frac{d^2 v_s}{dt^2} &= C(u_{s+1} + u_s - 2v_s). \end{aligned} \quad (1.25)$$

Assumindo soluções sob forma de ondas progressivas, com amplitudes diferentes, u , v , para cada tipo de átomos:

$$u_s = u e^{i(ska - \omega t)}; \quad v_s = v e^{i(ska - \omega t)}. \quad (1.26)$$

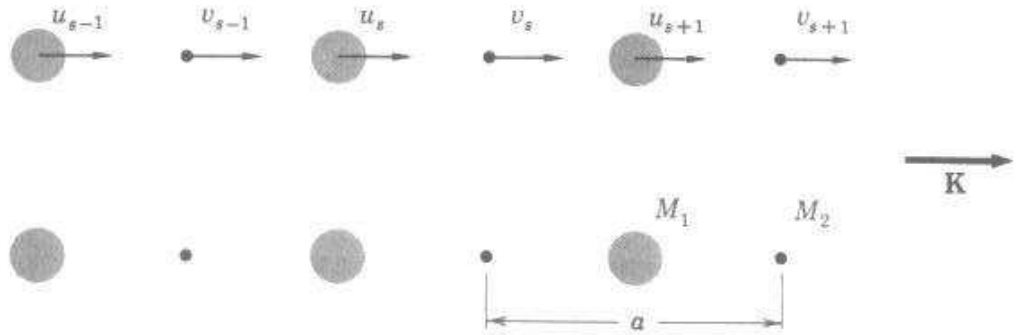


Figura 1.4: Cadeia cristalina diatômica, com massa m_1 e m_2 ligadas pela constante de força C entre os planos adjacentes. Os deslocamentos dos átomos m_1 são designados por u_{s-1} , u_s , u_{s+1} , ... e, os dos átomos m_2 por v_{s-1} , v_s , v_{s+1} , A distância entre dois planos idênticos é dada por a .

Substituindo estas soluções em (1.25) e arrumando os termos, temos:

$$\begin{aligned} (2C - m_1\omega^2)u - C(1 + e^{-ika})v &= 0; \\ -C(1 + e^{ika})u + (2C - m_2\omega^2)v &= 0. \end{aligned} \quad (1.27)$$

Estas equações lineares homogêneas possuem solução não trivial somente se o determinante formado pelos os coeficientes de u e v se anula:

$$\begin{vmatrix} 2C - m_1\omega^2 & -C(1 + e^{-ika}) \\ -C(1 + e^{ika}) & 2C - m_2\omega^2 \end{vmatrix} = 0, \quad (1.28)$$

ou

$$m_1m_2\omega^4 - 2C(m_1 + m_2)\omega^2 + 2C^2(1 - \cos ka) = 0. \quad (1.29)$$

A eq. (1.29) é de segundo grau, em ω^2 , admitindo duas soluções dada por:

$$\omega^2 = C \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \pm C \sqrt{\left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right)^2 - \frac{4}{m_1m_2} \text{sen}^2 \frac{ka}{2}} \quad (1.30)$$

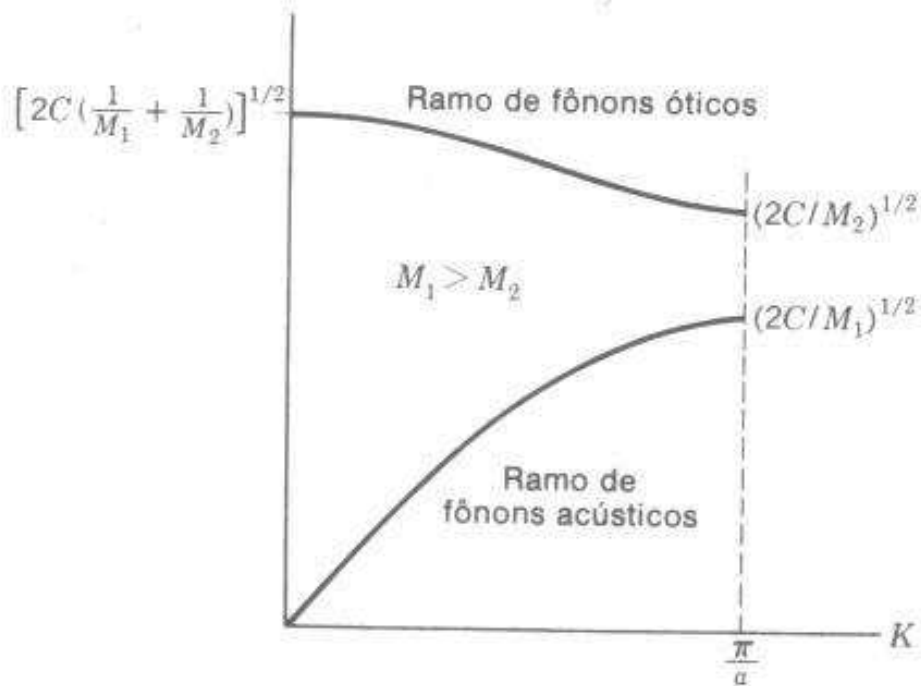


Figura 1.5: Relação de dispersão para a propagação de uma onda longitudinal em uma cadeia linear diatômica, para $m_1 > m_2$. O ramo de baixo é o ramo acústico, e o ramo superior é chamado de ramo ótico.

A curva de dispersão da rede diatômica dada pela eq. (1.30) é mostrada na figura (1.5). O ramo de baixo visto na figura, determinado pelo sinal negativo da eq. (1.30), é chamado de ramo acústico e o de cima, determinado pelo sinal positivo da equação, é conhecido por ramo ótico. Entre os dois ramos se encontra uma faixa de frequências que não tem solução para k real. Esta faixa é conhecida como *band gap*. Estudaremos cada um desses ramos separadamente.

Em geral, se existirem s átomos por células primitivas, ocorrem $3s$ ramos na relação de dispersão 3 ramos acústico e $(3s - 3)$ ramos óticos. A enumeração dos ramos é função do número de graus de liberdade dos átomos. Considerando um cristal com N células primitivas e s átomos por célula, ou seja, sN átomos no cristal,

e tendo cada átomo 3 graus de liberdade, um para cada uma das direções, temos então um total de $3sN$ graus de liberdade para o cristal. Esses graus de liberdades são ditribuido da seguinte forma:

N	modos acústicos longitudinais
$2N$	modos acústicos transversais
$(s - 1)N$	modos óticos longitudinais
$2(s - 1)N$	modos óticos transversais.

Ramo Acústico

O ramo acústico de uma rede diatômica é qualitativamente igual a relação de dispersão de uma rede monoatômica. A velocidade de grupo é nula nos limites da zona e ω é linear à k para grandes comprimentos de onda. Uma diferença é que, agora, ω é totalmente definido no intervalo onde $k = \pm\pi/a$, sendo a a distância entre segundos vizinhos, i.e., entre planos de átomos indênticos e não entre primeiros vizinhos como na rede monoatômica.

Tomaremos apartir de agora que $m_1 > m_2$. Agora, consideremos a razão entre as amplitudes de vibração de átomos vizinhos, (u/v) , como função da frequência. Substituindo as exponênciais da eq. (1.27), por funções trigonométricas e arrumando os termos temos:

$$\left(\frac{u}{v}\right) = \left[\frac{2C - m_2\omega^2}{2C \cos(ka/2)} \right] = \left[\frac{2C \cos(ka/2)}{2C - m_1\omega^2} \right]. \quad (1.31)$$

Para grandes comprimentos de onda, no limite contínuo, ou seja:

$$\begin{cases} \text{vetor de onda} & k \ll (\pi/a) \\ \text{frequência angular} & \omega \ll (2C/m_1^{1/2}) \end{cases} \quad (1.32)$$

A razão (u/v) se torna unitária, que indica que todos os átomos vibram em fase e com a mesma amplitude.

Agora se analisarmos no limite da zona de Brillouin, ou seja:

$$\begin{cases} \text{vetor de onda} & k = \pm(\pi/a) \\ \text{frequência angular} & \omega = (2C/m_1)^{1/2} \\ \text{velocidade de grupo} & (d\omega/dk) = 0 \end{cases} \quad (1.33)$$

A razão $(u/v) \rightarrow +\infty$. Isto significa que v é praticamente nulo comparando com u , ou seja, no limite da zona somente os átomos de massa m_1 , os mais pesados, vibram, justificando o fato de somente m_1 aparecer na expressão da frequência no limite da banda, $\omega = (2C/m_1)^{1/2}$.

Ramo Ótico

O ramo ótico de vibração da rede é assim chamado, porque os modos deste ramo podem ser excitados, em sólidos que possuem partículas iônicas utilizando-se de luz. Por exemplo, podemos excitar modos óticos em sólidos onde os vizinhos possuem cargas elétricas de sinal opostos, utilizando-se do campo elétrico de uma luz de certa frequência. Neste caso os primeiros vizinhos oscilam fora de fase, i.e., a razão entre as amplitudes de vibração entre eles (u/v) é negativa. Veremos que isto é uma característica de todo o ramo ótico.

Voltemos a considerar a razão entre as amplitudes de vibração, (u/v) , agora no limite de grandes comprimentos de onda para os modos do ramo ótico, os quais satisfazem:

$$\begin{cases} \text{vetor de onda} & k \rightarrow 0 \\ \text{frequência angular} & \omega \rightarrow \left[2C \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2} \right) \right]^{1/2} \\ \text{velocidade de grupo} & (d\omega/dk) \rightarrow 0 \end{cases} \quad (1.34)$$

Nestas condições a eq. (1.31) se torna:

$$\left[\frac{u}{v} \right] = -\frac{m_2}{m_1}. \quad (1.35)$$

Portanto, para grandes comprimentos de onda os primeiros vizinhos vibram fora de fase, contudo os centros de massa entre cada par de vizinhos se mantêm imóvel. Perceba que a velocidade de grupo no centro da zona, $k = 0$ é nula, i.e., a onda é estacionária.

No limite da zona, $k = \pm\pi/a$, temos da eq. (1.30), que a frequência, ω , é dada por:

$$\omega = \frac{2C^2}{m_2}. \quad (1.36)$$

Como os átomos de massa m_1 não aparecem na expressão de ω , isto nos sugere que neste caso, somente os átomos de massa m_2 vibram e os de massa m_1 ficam imóveis. Se analisarmos a razão (u/v) , vemos que no limite da zona, ou seja:

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{vetor de onda} \quad k = \pm(\pi/a) \\ \text{frequência angular} \quad \omega = (2C/m_2)^{1/2} \\ \text{velocidade de grupo} \quad (d\omega/dk) = 0 \end{array} \right. \quad (1.37)$$

Temos que $(u/v) = 0$, mostrando que os átomos de massa m_1 ficam imóveis. Também temos, neste caso de limite de zona, que a velocidade de grupo é nula, ou seja, as ondas neste limite são estacionárias.

1.4 Modos Vibracionais de uma Cadeia Harmônica com Desordem

A relevância da pesquisa, tanto analítica quanto computacional, de modos vibracionais em cadeias com desordem tem origem na possibilidade de se entender os modos inelásticos que aparecem em vidros ou outras substâncias com arranjos atômicos aleatórios[22]. O estudo teórico de modos vibracionais em cadeias harmônicas desordenadas tem sido objeto de estudo durante várias décadas[23, 24, 25, 27, 28, 29, 30, 31, 32, 33, 34].

Concentraremos nossas atenções numa cadeia harmônica com N átomos. A desordem neste modelo pode ser colocada de duas formas: através de uma distribuição de massas aleatórias e constantes de forças iguais ou massas iguais e constantes de forças aleatórias[22]. A equação de movimento para as amplitudes u_n , considerando apenas interações entre primeiros vizinhos podem ser escritas por:

$$m_n \frac{d^2 u_n}{dt^2} = \beta_{n-1}(u_n - u_{n-1}) + \beta_n(u_{n+1} - u_n). \quad (1.38)$$

onde β_n é o valor da constante de força entre as massas m_n e m_{n+1} . Assumindo uma dependência temporal com uma única frequência [$u_n = u_n \exp(-i\omega t)$], podemos obter uma equação estacionária para os modos:

$$(\beta_{n-1} + \beta_n - \omega^2 m_n)u_n = \beta_{n-1}u_{n-1} + \beta_n u_{n+1}. \quad (1.39)$$

onde podemos escrever de uma forma matricial:

$$\begin{pmatrix} u_{n+1} \\ u_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 - m_n \omega^2 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_n \\ u_{n-1} \end{pmatrix}. \quad (1.40)$$

Matsuda e Ishii, utilizando-se do formalismo de matriz de transferência, mostraram que os modos vibracionais da cadeia harmônica com massas aleatórias com frequência não nula ($\omega > 0$) são localizados [25] e próximo de $\omega = 0$ existem \sqrt{N} estados estendidos pois o comprimento de localização λ dos modos diverge como $\lambda \propto 1/\omega^2$. Isto é intuitivo visto que para baixas frequências ($\omega \approx 0$) temos grandes comprimentos de onda, fazendo com que os modos vibracionais com ($\omega = 0$) tenha um comprimento de onda muito grande, não enxergado assim a aleatoriedade estrutural da cadeia. Uma fenomenologia semelhante acontece se a desordem estiver presente na distribuição de constantes de mola β_n . Modos de frequência alta são localizados e o modo uniforme ($\omega = 0$) é estendido. No próximo capítulo, vamos considerar uma cadeia harmônica com massas idênticas e constantes de mola desordenadas. Vamos investigar a natureza dos modos vibracionais na presença de correlações de longo alcance na distribuição de constantes β_n .

Capítulo 2

Modos vibracionais em cadeias Harmônicas com Desordem Correlacionada

2.1 Introdução

Até agora, consideramos apenas cadeias harmônicas que possuem invariância translacional, onde todos os pontos desta cadeia tem o mesmo comportamento. Em cadeias como estas os modos vibracionais se estendem sobre toda cadeia, ou seja, os modos vibracionais são estendidos. Contudo, como já vimos, grande parte dos sólidos naturais, e até os produzidos em laboratório, possuem defeitos, que destroem a invariância translacional. A não consideração desses defeitos em alguns modelos teóricos, resulta em previsões errôneas de algumas propriedades físicas. Um exemplo é o modelo de Block que prevê uma resistência nula para cristais perfeitos, enquanto que em cristais reais isto não é verificado. Portanto, incluir nos modelos teóricos a

presença dos defeitos se torna importante.

Uma forma de adequarmos, os modelos teóricos as situações mais próximas da realidade, é incluindo desordem. Nos últimos anos, diversos estudos foram realizados, utilizando-se modelos com desordem não correlacionada[8, 9, 10, 11, 12] e também com desordem correlacionada[13, 14, 15, 16, 17]. Como exemplo podemos citar o estudo do modelo de Anderson unidimensional com correlações de longo alcance, no qual a presença de correlações espaciais na desordem induz a existência de fases metálicas[13, 14, 15]. Outro exemplo interessante e dentro do contexto experimental e até aplicado foi o estudo sobre a transmissão de micro-ondas em guias retangulares com espalhadores correlacionados[16], e a conjectura de que as correlações de longo alcance são responsáveis pelo transporte eletrônico no DNA[17].

Neste capítulo analisaremos os efeitos de desordem correlacionada em uma cadeia harmônicas. Introduziremos a desordem, utilizando uma distribuição de constantes de força aleatória com correlações de longo alcance. Veremos que neste caso, para fortes funções de correlação modos vibracionais com frequência não nulas podem ser estendidos.

2.2 Distribuição das constantes de mola

Neste estudo, introduziremos as correlações de longo alcance, escolhendo constantes de mola aleatórias dadas pelo traço do movimento Browniano Fracionário[18, 19, 20]

$$\beta_n = \sum_{k=1}^{N/2} \frac{\mathcal{C}(\alpha)}{k^{-\alpha}} \cos\left(\frac{2\pi nk}{N} + \phi_k\right), \quad (2.1)$$

Onde fixamos o valor médio desta sequência em $\langle \beta_n \rangle = 5$, para evitarmos constantes de mola nulas. A sequência é normalizada, escolhendo o valor da constante $\mathcal{C}(\alpha)$ de forma que a variância $\Delta\beta_n = 1$. O parâmetro α controla a correlação desta

sequência. Quando $\alpha = 0$, temos uma uma sequência aleatória, sem correlações entre os eventos (ruído branco), quando $\alpha = 2$ recuperamos o movimento Browniano simples, sem correlações entre os incrementos.

2.3 Cadeia harmônica com desordem correlacionada

Vamos considerar uma cadeia harmônica com N massas, a equação de movimento para o deslocamento u_n da n -ésima massa é dada por:

$$(\beta_{n-1} + \beta_n - \omega^2 m_n)u_n = \beta_{n-1}u_{n-1} + \beta_n u_{n+1} \quad (2.2)$$

sendo m_n o valor da massa no n -ésimo sítio e β_n o valor da constante de força entre as massas m_n e m_{n+1} . Neste trabalho, fixaremos todas as massas iguais a unidade $m_n = 1$, e as constantes de mola são dadas pela eq. (2.1). Mapeando este problema da cadeia harmônica numa equação do tipo *tight-binding* eletrônica [21] obtemos uma matriz $A_{N \times N}$ (matriz secular dos modos) definida por:[24, 27]

$$\begin{cases} A_{i,i} = \frac{\beta_i + \beta_{i-1}}{m_i} = \beta_i + \beta_{i-1}, \\ A_{i,i+1}^2 = A_{i+1,i}^2 = \frac{\beta_i^2}{m_i m_{i+1}} = \beta_i^2, \\ A_{i,j} = 0 \quad \text{para } j \neq i + 1 \end{cases} \quad (2.3)$$

cuja diagonalização nos dá os deslocamentos u_n . Como a matriz $A_{N \times N}$ é uma matriz tridiagonal, utilizaremos o algoritmo *tqli*[26] para diagonaliza-la exatamente. O algoritmo computacional usado por nós neste trabalho se encontra no apêndice. Por causa do grande tempo computacional utilizado para diagonalizar matrizes de grandes ordem, restringimos os estudos ao máximo de 1600 massas na cadeia.

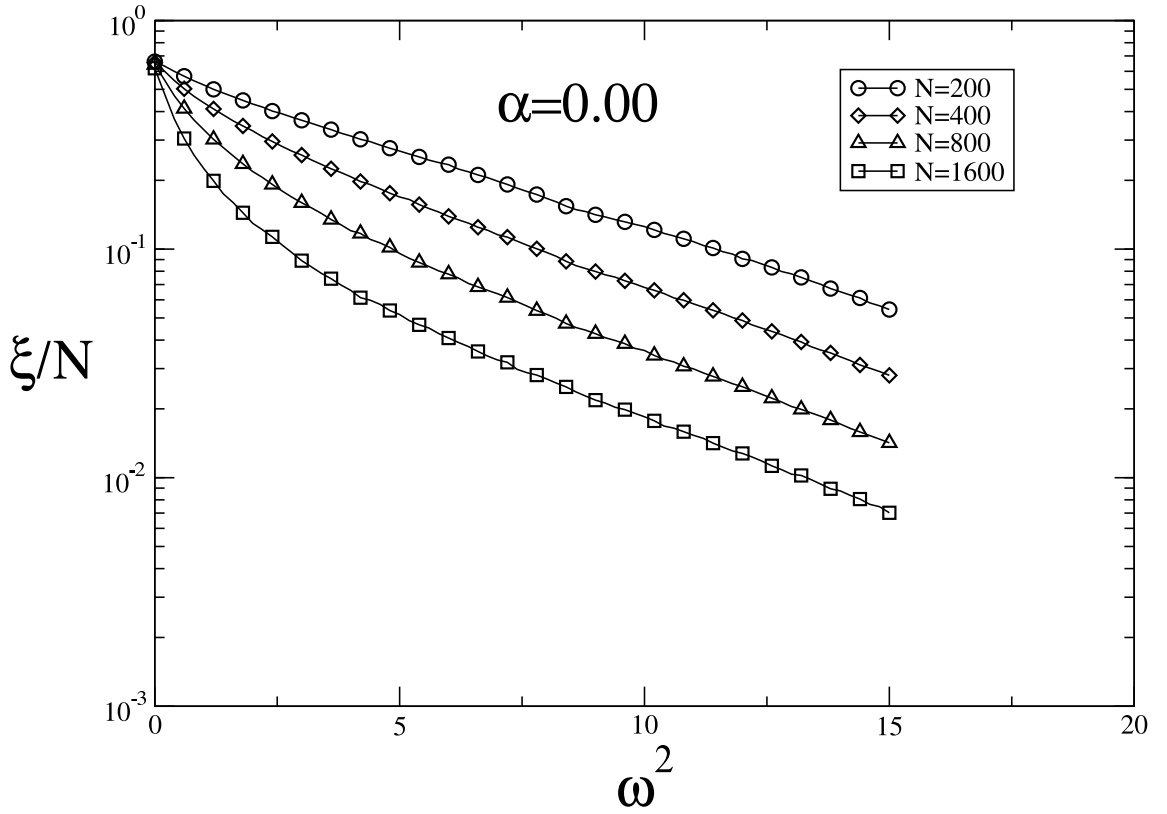


Figura 2.1: Razão participação rescalada pelo tamanho da cadeia (ξ/N) versus ω^2 para $\alpha = 0$ (massas aleatórias sem correlação), para cadeias com $N = 200, 400, 800, 1600$. Para modos vibracionais com $\omega > 0$, $\xi/N \rightarrow 0$ quando $N \rightarrow \infty$. Este resultado confirma a natureza localizada destes modos.

Investigaremos, a natureza dos modos vibracionais, analisando a função razão participação ξ , definido por[12, 28, 29]:

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

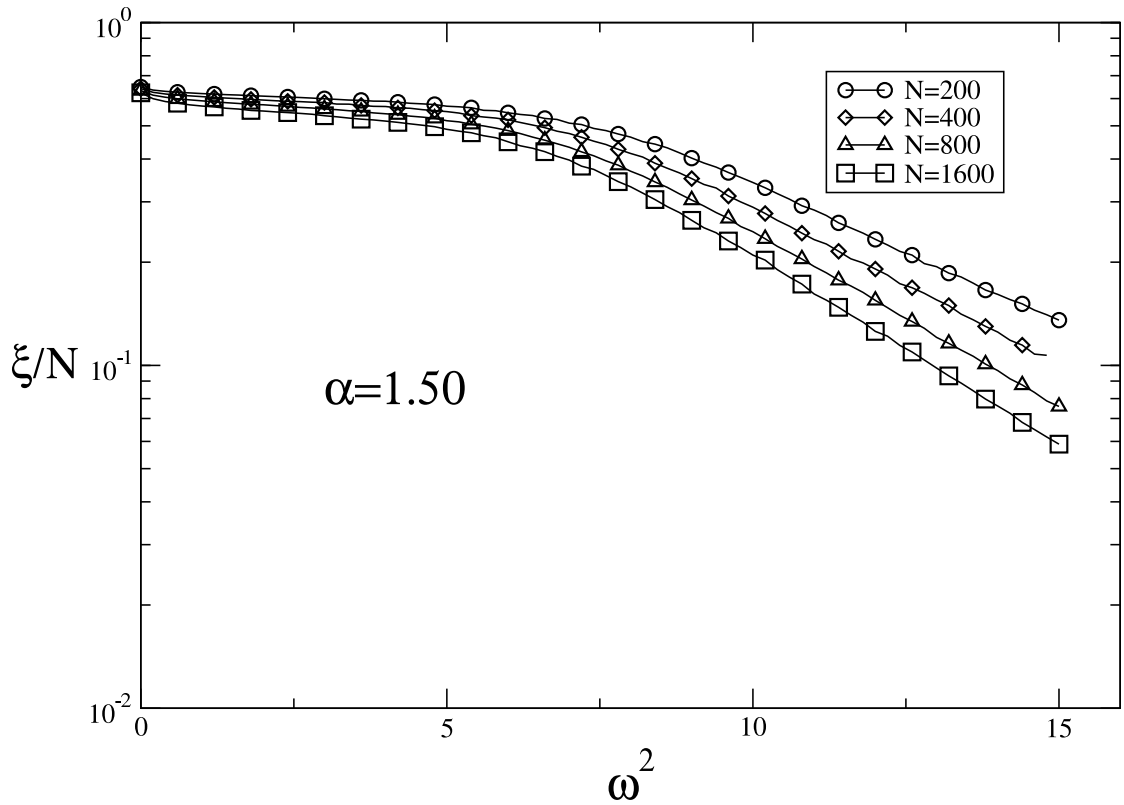


Figura 2.2: Razão participação rescalada pelo tamanho da cadeia (ξ/N) versus ω^2 para $\alpha = 1.50$, para cadeias com $N = 200, 400, 800, 1600$. Todos os modos com $\omega > 0$ são localizados pois $\xi/N \rightarrow 0$ quando $N \rightarrow \infty$.

Esta função razão participação ξ representa o número de massas que participam de um dado modo vibracional de frequência ω^2 . ξ apresenta uma divergência linear com o tamanho da cadeia N quando o estado é estendido, ou seja, $\xi \sim N$ e é uma constante para os estados localizados. Calcularemos também a flutuação

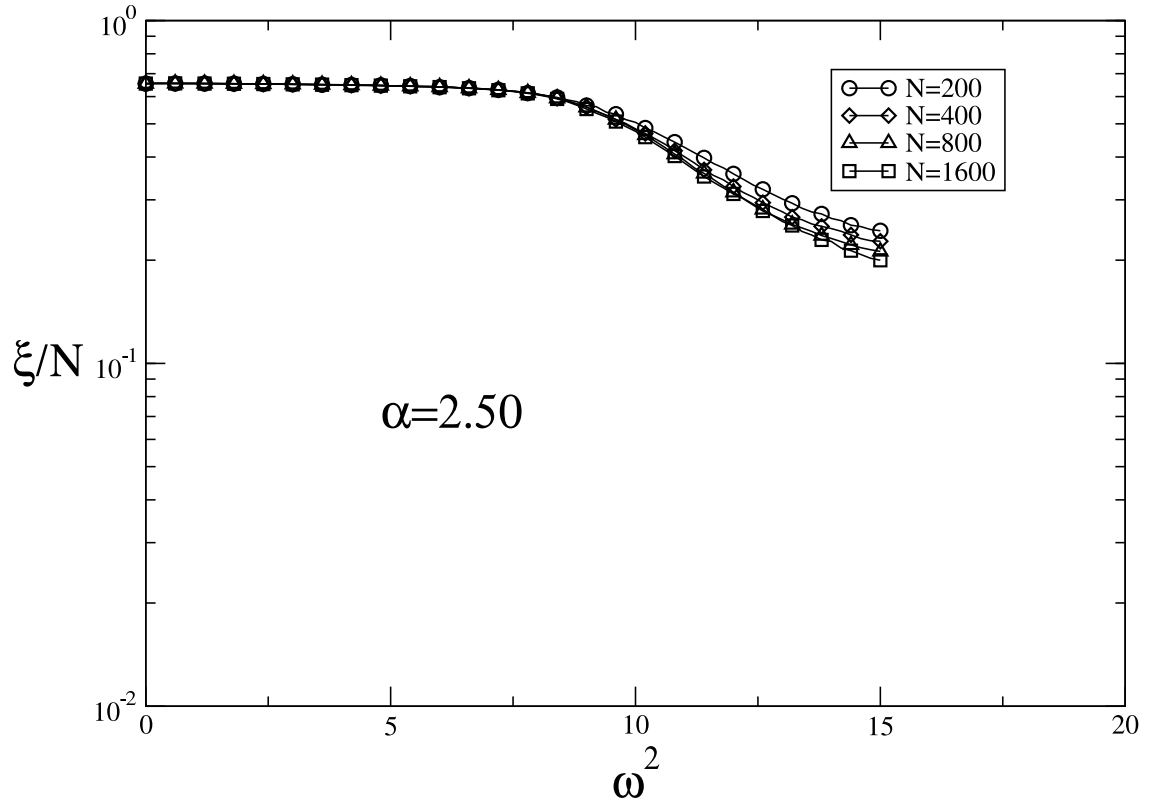


Figura 2.3: Razão participação rescalada pelo tamanho da cadeia (ξ/N) versus ω^2 para $\alpha = 2.5$, para cadeias com $N = 200, 400, 800, 1600$. Os modos vibracionais são estendidos onde a razão participação apresenta um colapso.

relativa da razão participação, definida por:

$$\Delta\xi = \frac{\sqrt{\langle \xi^2 \rangle_\omega - \langle \xi \rangle_\omega^2}}{\langle \xi \rangle} \quad (2.5)$$

A flutuação relativa da razão participação é uma função importante no estudo das propriedades de localização de um sistema físico. $\Delta\xi$ é zero para estados estendidos, devido a baixa flutuação da razão participação dentro da fase localizada e é não

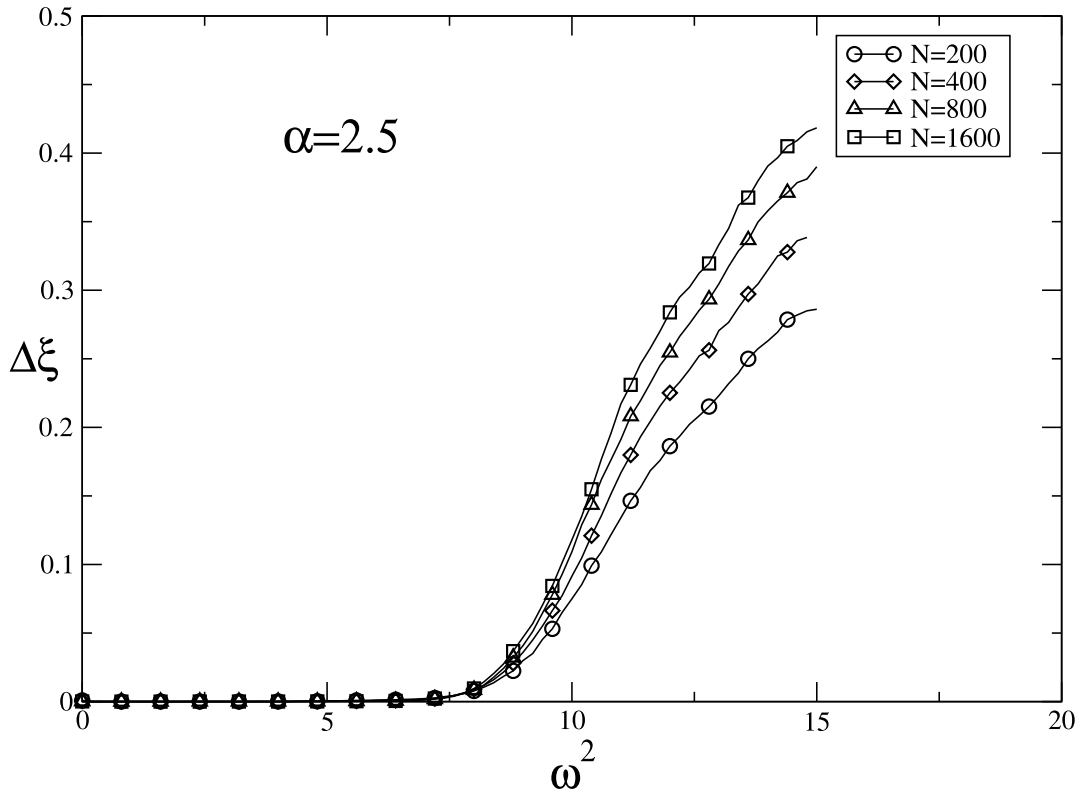


Figura 2.4: Flutuação da razão participação $\Delta\xi$ versus ω^2 para $\alpha = 2.5$, para cadeias com $N = 200, 400, 800, 1600$. Os modos vibracionais são estendidos onde a flutuação da razão participação é nula e localizados para $\Delta\xi$ finito.

nulo para estados localizados, onde a razão participação tem flutuação significativa. O estudo da localização dos modos vibracionais em cadeias harmônicas, tem sua importância, no fato de que esta localização é um dos mecanismos fundamentais que controla o transporte de energia, e portanto, a condutividade térmica na cadeia.

A figura 2.1 mostra a razão participação rescalada ξ/N versus ω para $\alpha = 0$, ou seja massas aleatórias sem correlação, e $N = 200, 400, 800, 1600$. Observe que a

razão participação rescalada para $\omega^2 = 0$ permanece finito no limite termodinâmico, entretanto, para qualquer frequência não nula os modos vibracionais se tornam localizados uma vez que $\xi/N \rightarrow 0$, quando $N \rightarrow \infty$. Este resultado reflete a localização dos autoestados de alta frequência na presença de desordem, seja ela nas massas ou nas constantes de mola, e a delocalização do modo uniforme $\omega^2 = 0$.

Com o intuito de investigar os efeitos de correlações de longo alcance na desordem calculamos a razão participação para $\alpha > 0$. A figura 2.2 mostra a razão participação (ξ/N) versus ω^2 para $\alpha = 1.50$ e $N = 200, 400, 800, 1600$. Vemos que a razão participação rescalada se anula para $\omega^2 > 0$ e N grande. Portanto, todos os modos com frequência não nula permanecem localizados. Novamente apenas o modo uniforme $\omega^2 = 0$ permanece estendido no limite termodinâmico. Este resultado se repete para todos os valores do parâmetro de correlação $\alpha < 2$.

Quando o parâmetro de correlação passa a ser maior que 2, $\alpha \geq 2$, as propriedades dos modos muda drasticamente. A razão participação rescalada (ξ/N) para $\alpha = 2.5$, fig.(2.3), apresenta um colapso bem definido na região de baixa frequência, indicando que o sistema apresenta uma fase de modos vibracionais estendidos. A flutuação da participação é uma grandeza significativamente alterada na presença de uma fase de modos vibracionais estendidos. Se esta fase encontrada para fortes correlações $\alpha \geq 2$ for estável no limite termodinâmico a flutuação da participação deve se anular neste limite. Na figura (2.4), mostramos dados para a flutuação relativa da razão participação $\Delta\xi$ versus frequência ω^2 . Nossos resultados Vemos que para baixas frequências $\Delta\xi \rightarrow 0$. Isto indica que nesta região os modos são de fato estendidos. Esta faixa de frequências corresponde a faixa onde existe um colapso na participação, fig(2.3). Para frequências acima disto, temos um valor finito para $\Delta\xi$, indicando que estes modos são localizados.

Capítulo 3

Conclusões

Neste trabalho de conclusão de curso estudamos modos vibracionais em cadeias harmônicas com desordem correlacionada. Após uma revisão da literatura de estado sólido sobre modos vibracionais em cadeias cristalinas monoatômicas e diatômicas consideramos uma cadeia de massas constantes com desordem correlacionada na distribuição de constantes de força harmônicas. Construímos uma distribuição de constantes de força com uma densidade espectral tipo lei de potência $S(k) \propto 1/k^\alpha$, onde o parâmetro α mede o grau de correlação na desordem. Recentes trabalhos na literatura tem conjecturado que correlações de longo alcance na distribuição de desordem podem induzir delocalização de excitações elementares em baixa dimensionalidade[13, 14, 15, 17]. Dentre deste contexto, utilizando um formalismo numérico de diagonalização exata sobre cadeias finitas e calculamos a razão participação para os modos vibracionais. A razão participação mede o grau de localização dos autoestados. Nossos resultados indicam que para correlações fracas $\alpha < 2$ o sistema apresenta estados localizados em frequência alta e apenas o modo uniforme de frequência nula é estendido. Este resultado é o mesmo encontrado em cadeias harmônicas com desordem não correlacionada. Para $\alpha > 2$ nossos resultados indicam a presença de modos vibracionais estendidos na região de frequência não

nula($\omega > 0$). Este resultado indica a presença de modos vibracionais que não são espalhados pela desordem estrutural da cadeia. Este é um resultados interessante dentro do contexto de transporte térmico em baixa dimensionalidade uma vez que os modos vibracionais são fundamentais para o transporte de calor. Como perspectiva de nosso estudo pretendemos investigar, através de da resolução numérica das equações de Hamilton, a dinânica de um pulso energético inicialmente localizado bem com o fluxo de calor através deste tipo de cadeia quando a mesma está ligada a dois banhos térmicos.

Referências Bibliográficas

- [1] N. W. Ashcroft e N. D. Mermin, *Solid State Physics* (Wiston, Philadelphia 1976). cap. 21.
- [2] Frank S. Crawford Jr., *Waves*(Vol. 3 of Berkeley Physics Course). MacGraw-Hill (1968), 268-279
- [3] J. S. Blakemore, *Solid State Physics*, (Cambridge University Press). pag. 55-56.
- [4] J. M. Rowe, B. N. Brockhouse e E. C. Svensson, *Phys. Rev. Letters* **14**, 554 (1965).
- [5] A. J. E. Foreman e W. M. Lomer, *Proc. Phys.* **B70**, 1143 (1957).
- [6] W. A. Harrison, *Phys. Rev.* **12**, 2512 (1963).
- [7] S. H. Koenig, *Phys. Rev.* **135**, A1693 (1964).
- [8] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958).
- [9] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. G. Licciardello e T. V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 673 (1979).
- [10] R. Zallen, *The Physics of Amorphous Solids* (Wiley, New York 1983).

- [11] I. M. Lifshitz, S. A. Gredeskul e L. A. Pastur, *Introduction to the Theory of Disordered Systems* (Wiley, New York 1988).
- [12] B. Kramer e A. MacKinmon, Rep. Prog. Phys. **56**, 1469 (1993).
- [13] F. A. B. F. de moura e M. L. Lyra, Phys. Rev. Lett. **81**, 3735 (1998); *ibid.* **84**, 199 (2000).
- [14] F. A. B. F. de moura e M. L. Lyra, Physica A **266**,465 (1999).
- [15] F. M. IZrailev e A. A. Krokhin, Phys. Rev. Lett. **82**, 4062 (1999); F. M. IZrailev, A. A. Krokhin e S. E. Ulloa, Phys. Rev. B **63**, 41102 (2001).
- [16] U. Kuhl, F. M. Izrailev, A. Krokhin e H. J. Stöckmann, Appl. Phys. Lett. **77**, 663 (2000).
- [17] P. Carpena, P. Bernaola-Galán, P. Ch. Ivanov e H. E. Stanley, Nature **418**, 955 (2002).
- [18] J. Feder, *Fractals* (Plenum Press, New York 1988); A. Tsonis, *Chaos: from theory to applications* (Plenum Press, New York 1992).
- [19] N. P. Greis e H. S. Greenside, Phys. Rev. A **44**, 2324 (1991).
- [20] T. Higuchi, Physica D **31**, 277 (1988).
- [21] P. Dean, Rev. Mod. Phys. **44**, 127 (1972).
- [22] D. c. Mattis, 1993, *The Many-Body Problem*, (World Scientific Publishing).
pág. 112-124.
- [23] F. J. Dyson, Phys. Rev. **92**, 1331 (1952).
- [24] P. Dean, Proc. Phys. Soc. **84**, 727 (1964).

- [25] H. Matsuda e K. ishii, Prog. Theor. Phys. Suppl. **45**, 56 (1970); K. ishii, Prog. Theor. Phys. Suppl. **53**, 77 (1973).
- [26] *Numerical Recipes in Fortran 77: The Art of Scientific Computing*, (Cambridge University Press). Capítulo 11
- [27] P. K. Datta e K. Kundu, J. Phys.: Condens. Matter **6**, 4465 (1994).
- [28] F. Domingues-Adame, E. Macià e A. Sánchez, Phys. Rev. B **48**, 6054 (1993).
- [29] J. C. Cressoni e M. L. Lyra, Phys. Rev. B **53** 5067 (1996).
- [30] P. K. Datta e K. K. Kundu, Phys. Rev. B **51**, 6287 (1995).
- [31] S. N. Evangelou e E. N. Economou, J. Phys. A: Math. Gen. **26**, 2803 (1993).
- [32] M. Wagner, G. Zart, J. Vazquez-Marquez, G. Viliani, W. Frizzera, O. Pilla e M. Montagna, Philos. Mag. B **65**, 273 (1992).
- [33] M. J. Oliveira e A. Petri, Int. J. Mod. Phys. B, **11** 2195 (1997).
- [34] B. Li, H. Zhao e B. Hu, Phys. Rev Lett. **86**, 63 (2001); A. Dhar, Phys. Rev. Lett. **86**, 5882 (2001).

Apêndice A

A.1 Algoritmo Computacional

```
PROGRAM partflut
  PARAMETER(NP=4000,NPTMAX=4000,NP1=4000)
  real*8 A(NP,NP),PI
  PARAMETER(PI=3.14159265359)
  character*20 X1,X2,X3,X4,X5,X6,X7,X8
  COMMON /RES/ XEN(NPTMAX),IDOS(NPTMAX),YP(NPTMAX),YP2(NPTMAX)
  real*8 WK(NP),IWK(NP),alpha,beta(NP),phik(NP)
  real*8 mean1,mean2,AUX,AUX2
  integer u2,u4,u1,t10,t11,time
  integer n,i,nlat,IX,SEED,o,NSEED,tti,nsite,nx,
  AA1(1:NP1),AA2(1:NP1),num,yu,nmed,SEED1,N0,N01
  integer cont3,c10,NENE
  real*8 u3,v3,VV,nu,pa,pm2,m(NP)
  parameter (bbb=12,bb=10000,bb2=10)
  real*8 DUU,ee,t,WmB1,D(NP),E(NP),E4(NP),P4(NP),rndv
  real*8 ii,RR,fnlat,GG,WmB2,WmA,mm,ff(0:bb2),z,z1,ti
  real*8 EE9,EE10,DD10,nn,jj,kk,m2,EN,var,parm
  real*8 AP(0:NP,0:21000),AE(0:NP,0:21000)
```



```

real*8 Eme,EEE(2000),DOS(2000),c9,step
real*8 P24(0:NP),sdpn,pm,conta
real*8 ale(0:1000,0:1000),Ein,m0
parameter (q=1000000,y=500000)
real*8 G1,f(NP),aa,XE(NP),XP(NP)
Wm2,Wm,m1,t1(0:NP),DE,DU,U,Sx
character*18 filename,filename1,filename2
COMPLEX*16 yy,gy

X1='PMN'
X2='alpha'
X3='M'
X4='S'
X5='.dat'
X6='SPDNN'

write(*,*)'Numero de massa,alpha,medias,SEED'
read(*,*)nlat,alpha,nmed,SEED

c-----PARTICIPACAO MEDIA-----
call SUBARCH(3,X1,X2,X3,X4,X5,nlat,alpha,nmed,SEED)
c-----FLUTUACAO MEDIA-----
call SUBARCH(5,X6,X2,X3,X4,X5,nlat,alpha,nmed,SEED)

C-----calculo--das--constantes--de--mola-----
SEED=-SEED
do 9034 yu=1,nmed
do 1001 i=1,nlat/2
phik(i)=2.0*PI*ran1(SEED)

```

```

1001 continue
  mean1=0.0
  mean2=0.0
  do 1005 i=1,nlat
    beta(i)=0.0
    m(i)=1.
    ii=dfloat(i)
    do 1010 K=1,nlat/2
      kk=dfloat(k)
      AUX=dcos((2.0*PI*kk*ii)/(dfloat(nlat))+phik(k))
      AUX2=dexp(-(alpha/2.)*dlog(kk))
      beta(i)=beta(i)+AUX2*AUX
    1010 continue
    mean1=mean1+beta(I)
    mean2=mean2+beta(I)**2.0
  1005 continue
  mean1=mean1/float(nlat)
  mean2=mean2/float(nlat)
  vari=(mean2-mean1**2.)**0.5
  do 1020 i=1,nlat
    beta(i)=(beta(i)-mean1)/vari
    beta(i)=beta(i)+4.5
  1020 continue

```

C-----Fim-do-calculo-das-constantes-de-mola-----

```

  m(nlat+1)=1
  do i=1,nlat
    D(i)=(beta(i)+beta(i-1))/m(i)
    if (i.gt.1) E(i)=beta(i-1)/(m(i-1)*m(i))**0.5
  enddo

```

```
DU=0.15
do 201 i=1,nlat
XE(i)=0.0
XP(i)=0.0
do 202 j=1,nlat
if (i.eq.j) then
A(i,j)=1.0
else
A(i,j)=0.0d0
A(j,i)=0.0d0
endif
202 continue
201 continue
CALL TQLI(D,E,nlat,NP,A)
DO 3211 I=1,NLAT
C2=0.0d0
DO 3222 J=1,NLAT
C2=C2+A(J,I)*A(J,I)
3222 continue
DO 3224 J=1,NLAT
A(J,I)=A(J,I)/(C2)
3224 continue
3211 continue
DO 21 I=1,NLAT
C2 = 0.0
C4 = 0.0
C5 = 0.0
DO 22 J=1,NLAT
U = A(J,I)
```

```
C2 = C2 + U*U
C4 = C4 + U*U*U*U
22 CONTINUE
AP(i,yu)=1.0d0/C4
AE(i,yu)=D(i)
21 CONTINUE
C2=0.0
C4=0.0
aux=0.0d0
j=0
9034 continue
step=0.2d0
do Ene=0.0d0,15.0d0,step
pm=0.0d0
pm2=0.0d0
sdpn=0.0d0
conta=0.0d0
do 16766 yu=1,nmed,1
do 5215 i=1,NLAT
if (dabs(AE(i,yu)-Ene).lt.(step/2.0d0)) then
pm=pm+AP(i,yu)
pm2=pm2+AP(i,yu)**2.0d0
conta=conta+1.0d0
endif
5215 continue
16766 continue
if (conta.gt.0.0) then
pm2=pm2/conta
pm=pm/conta
```

```

write(3,*)Ene,pm
sdpn=pm2-pm*pm
write(5,*)Ene,pm2/(pm**2.0d0)-1.0d0
endif
enddo
STOP
END

```

C=====

C-----*Subrotinas-e-Funcoes*-----

```

SUBROUTINE TQLI(D,E,N,NP,Z)

real*8 D(NP),E(NP),Z(NP,NP)
real*8 S,H,G,C,R,F,B,P,DD
ITER=0
IF (N.GT.1) THEN
DO 11 I=2,N
E(I-1)=E(I)
CONTINUE
E(N)=0.
DO 15 L=1,N
ITER=0
1 DO 12 M=L,N-1
DD=dabs(D(M))+dabs(D(M+1))
IF (dabs(E(M))+DD.EQ.DD) GO TO 2
12 CONTINUE
M=N
2 IF(M.NE.L)THEN
IF(ITER.EQ.1050)PAUSE 'too many iterations'
ITER=ITER+1

```

```
G=(D(L+1)-D(L))/(2.*E(L))
R=dsqrt(G**2+1.)
G=D(M)-D(L)+E(L)/(G+SIGN(R,G))
S=1.
C=1.
P=0.
DO 14 I=M-1,L,-1
F=S*E(I)
B=C*E(I)
IF(dabs(F).GE.dabs(G))THEN
C=G/F
R=dsqrt(C**2+1.)
E(I+1)=F*R
S=1./R
C=C*S
ELSE
S=F/G
R=dsqrt(S**2+1.)
E(I+1)=G*R
C=1./R
S=S*C
ENDIF
G=D(I+1)-P
R=(D(I)-G)*S+2.*C*B
P=S*R
D(I+1)=G+P
G=C*R-B
DO 13 K=1,N
F=Z(K,I+1)
```

```
Z(K,I+1)=S*Z(K,I)+C*F
Z(K,I)=C*Z(K,I)-S*F
13 CONTINUE
14 CONTINUE
D(L)=D(L)-P
E(L)=G
E(M)=0.
GO TO 1
ENDIF
15 CONTINUE
ENDIF
RETURN
END
```

C-----

```
SUBROUTINE SORT3(N,RA, RB, WKSP, IWKSP)
real*8 RA(N),RB(N),WKSP(N),IWKSP(N)
CALL INDEXX(N,RA, IWKSP)
DO 11 J=1,N
WKSP(J)=RA(J)
11 CONTINUE
DO 12 J=1,N
RA(J)=WKSP(IWKSP(J))
12 CONTINUE
DO 13 J=1,N
WKSP(J)=RB(J)
13 CONTINUE
DO 14 J=1,N
RB(J)=WKSP(IWKSP(J))
```

```
14 CONTINUE
   RETURN
   END
```

C-----

```
SUBROUTINE INDEXX(N,ARRIN,INDX)
  real*8 ARRIN(N),INDX(N)
  DO 11 J=1,N
    INDX(J)=J
  11 CONTINUE
  L=N/2+1
  IR=N
  10 CONTINUE
  IF(L.GT.1)THEN
    L=L-1
    INDXT=INDX(L)
    Q=ARRIN(INDXT)
  ELSE
    INDXT=INDX(IR)
    Q=ARRIN(INDXT)
    INDX(IR)=INDX(1)
    IR=IR-1
  IF(IR.EQ.1)THEN
    INDX(1)=INDXT
  RETURN
  ENDIF
  ENDIF
  I=L
  J=L+L
```



```

20 IF(J.LE.IR)THEN
  IF(J.LT.IR)THEN
    IF(ARRIN(INDX(J)).LT.ARRIN(INDX(J+1)))J=J+1
  ENDIF
  IF(Q.LT.ARRIN(INDX(J)))THEN
    INDX(I)=INDX(J)
    I=J
    J=J+J
  ELSE
    J=IR+1
  ENDIF
  GO TO 20
ENDIF
INDX(I)=INDXT
GO TO 10
END

```

c-----

```

FUNCTION ran1(idum)
  INTEGER idum,IA,IM,IQ,IR,NTAB,NDIV
  REAL ran1,AM,EPS,RNMX
  PARAMETER (IA=16807,IM=2147483647,AM=1./IM,IQ=127773,IR=2836)
  PARAMETER (NTAB=32,NDIV=1+(IM-1)/NTAB,EPS=1.2e-7,RNMX=1.-EPS)
  INTEGER j,k,iv(NTAB),iy
  SAVE iv,iy
  DATA iv /NTAB*0/, iy /0/
  if (idum.le.0.or.iy.eq.0) then
    idum=max(-idum,1)
    do 11 j=NTAB+8,1,-1

```

```

      k=idum/IQ
      idum=IA*(idum-k*IQ)-IR*k
      if (idum.lt.0) idum=idum+IM
      if (j.le.NTAB) iv(j)=idum
11 continue
      iy=iv(1)
      endif
      k=idum/IQ
      idum=IA*(idum-k*IQ)-IR*k
      if (idum.lt.0) idum=idum+IM
      j=1+iy/NDIV
      iy=iv(j)
      iv(j)=idum
      ran1=min(AM*iy,RNMX)
      return
      END
      SUBROUTINE SUBARCH(NOUT,C1,C2,C3,C4,C5,NS,xal,xx,se)
      CHARACTER*300 FOUT,FDUMMY
      CHARACTER*20 C1,C2,C3,C4,C33,C5
      integer SAMP,NS,xx,se
      real*8 xal,var
      FDUMMY = ' '
      FOUT = ' '
      WRITE(FDUMMY,'(A,I5,A,F7.2,A,I5,A,I5,A)')C1,NS,C2,xal
      ,C3,xx,C4,se,C5
      C REMOVE THE BLANKS FROM NAME
      IPOS = 0
      DO 41 I=1,LEN(FDUMMY)
      IF(FDUMMY(I:I).NE.' ')THEN

```

```
IPOS = IPOS+1
FOUT(IPOS:IPOS) = FDUMMY(I:I)
ENDIF
41 CONTINUE
OPEN(NOUT,FILE=FOUT,STATUS='NEW')
RETURN
END
```