



CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM  
MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL  
MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL

**POTENCIAIS CAÓTICOS NO OPERADOR DE  
SCHRÖDINGER UNIDIMENSIONAL: ANÁLISE PELO INVERSO  
DO NÚMERO DE PARTICIPAÇÃO**

**WESLEY FLORENTINO DE OLIVEIRA**

Orientador: Giancarlo Queiroz Pellegrino  
Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais – CEFET-MG

BELO HORIZONTE  
ABRIL DE 2018

WESLEY FLORENTINO DE OLIVEIRA

POTENCIAIS CAÓTICOS NO OPERADOR DE  
SCHRÖDINGER UNIDIMENSIONAL: ANÁLISE PELO INVERSO  
DO NÚMERO DE PARTICIPAÇÃO

Tese de Doutorado apresentado ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Matemática e Computacional do Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Modelagem Matemática e Computacional.

Área de concentração: Modelagem Matemática e Computacional

Linha de pesquisa: Métodos Matemáticos Aplicados

Orientador: Giancarlo Queiroz Pellegrino  
Centro Federal de Educação Tecnológica  
de Minas Gerais – CEFET-MG

CENTRO FEDERAL DE EDUCAÇÃO TECNOLÓGICA DE MINAS GERAIS  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM MATEMÁTICA E COMPUTACIONAL  
BELO HORIZONTE  
ABRIL DE 2018

Oliveira, Wesley Florentino de  
O48p Potenciais caóticos no operador de Schrödinger unidimensional:  
análise pelo inverso do número de participação / Wesley Florentino de  
Oliveira. – 2018.  
94 f.

Tese de doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em  
Modelagem Matemática e Computacional.

Orientador: Giancarlo Queiroz Pellegrino.

Dissertação (mestrado) – Centro Federal de Educação Tecnológica de  
Minas Gerais.

1. Comportamento caótico nos sistemas – Teses. 2. Schrödinger,  
Equação de – Teses. 3. Quasicristais – Teses. 4. Relações inversas  
(Matemática) – Teses. I. Pellegrino, Giancarlo Queiroz. II. Centro Federal  
de Educação Tecnológica de Minas Gerais. III. Título.

CDD 515.39

Dedico este trabalho à minha mãe, a mulher  
mais forte que eu conheço.

# Agradecimentos

Agradeço primeiramente ao universo, que me permitiu chegar até aqui. Obrigado Deus, por sempre colocar pessoas boas no meu caminho, que me ajudam e me dão forças para seguir em frente. Nunca me sinto desamparado.

Ao meu pai, que independente de presença física, está conectado a mim por uma energia indestrutível e eterna. À minha mãe por ser a melhor mãe que eu poderia ter. Por me amar, me apoiar, me aceitar, me incentivar e não medir esforços para que os meus sonhos se tornem realidade. A você eu agradeço por ser a pessoa que sou. A você eu dedico tudo que tenho. Serei eternamente grato!

À minha irmã Graziene, ao meu cunhado Jhonatan e meus sobrinhos Thiago Henrique e Sophia Vitória. Obrigado por continuarem a nossa família. Obrigado por me permitirem a graça de ser tio e vivenciar o amor mais puro, sincero e inocente que existe: de uma criança.

Aos meus familiares que sempre torceram por mim e me apoiaram.

Aos meus queridos amigos, agradeço por serem presença divina na minha vida! Obrigado por entenderem minhas ausências, meus sonhos, meus objetivos. Obrigado por me apoiarem, por me incentivarem, por me levantarem. Sem vocês não saberia viver.

Aos meus colegas do CEFET-MG e aos meus colegas do IFNMG, meu muito obrigado. Agradeço o apoio, a contribuição, as trocas de informação e as inúmeras ajudas neste trabalho. Quem caminha sozinho pode chegar mais rápido, mas quem caminha em grupo chega muito mais longe!

Ao meu querido AMIGO e orientador Gian, eu não tenho palavras para descrever minha gratidão. Você é um exemplo de profissionalismo, de integridade, de competência, de humildade e de ser humano. Eu sou grato pelo trabalho e pelo carinho, pela orientação e pelas inúmeras conversas de amigo, pelos conselhos, pela confiança, por tudo! Espero um dia ser próximo do profissional e ser humano que você é! De verdade, obrigado por tudo!

Por fim, agradeço aos meus professores do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática e Computacional pelos ensinamentos e à banca que aceitou ler e contribuir com este trabalho. À pró-reitoria de pesquisa do IFNMG pela contribuição financeira.

A todos, a minha gratidão!

*“Sonhos determinam o que você quer. Ações determinam o que você conquista.” (Aldo Novak)*

# Resumo

Uma maneira de se modelar quase-cristais consiste no ordenamento de sequências de átomos em redes unidimensionais por meio de sequências numéricas. As sequências peneperiódicas têm sido utilizadas com esse intuito desde a criação do primeiro quase-cristal, construído com base na sequência de Fibonacci na década de 80. Além disso, a caracterização da participação dos sítios da rede tem sido medida, entre outros métodos, pelo decaimento da densidade de probabilidade  $|\psi|^2$  do estado quântico. O presente trabalho propõe a utilização de mapas caóticos em substituição às sequências peneperiódicas, pois acredita-se que esses mapas apresentam a possibilidade de controle de desordem, o que indicaria uma vantagem frente às sequências peneperiódicas. A partir desses mapas caóticos são criados potenciais binários para o operador de Schrödinger. Além disso, propõe também a utilização do inverso do número de participação (*IPR*) para caracterizar o sistema em localizado-delocalizado, pois esse apresenta relação com as quantidades físicas de interesse, geralmente vistas em física do estado sólido. Além disso, o *IPR* é utilizado para se fazer diferentes caracterizações e estabelecer relações entre as dimensões fractais, o *IPR* generalizado (*GIPR*), *IPR* típico ou médio e a classificação pela energia do sistema, a fim de se conhecer melhor os sistemas gerados por mapas caóticos. Foi possível caracterizar os potenciais caóticos, obter correlação entre o *IPR* e o expoente de Lyapunov (*Ly*), reproduzir a singularidade encontrada por Johri e Bhatt para potenciais aleatórios e evidenciar o caráter multifractal dos autovetores. De modo amplo, pôde-se perceber que os mapas caóticos apresentam, de fato, a vantagem de controle da desordem por meio do ajuste da caoticidade.

**Palavras-chave:** Mapas caóticos, equação de Schrödinger, quase-cristais, inverso do número de participação (*IPR*).

# Abstract

One way of modeling quasi-crystals consists in the ordering of a sequence of atoms in a one-dimensional lattice as a numerical sequence. Almost-periodic sequences have been used for this purpose since the creation of the first quasi-crystal, built from the Fibonacci sequence in the 80's. Furthermore, the participation of lattice sites in the solutions has been measured by the decaying of the probability density for the quantum state. This work proposes the use of chaotic maps in place of the almost-periodic sequences and points the advantages in using them. From these chaotic maps, binary potentials are created for the Schrödinger operator. Beyond that, it also proposes the use of the inverse participation ratio (*IPR*) to characterize the quantum solution as localized-delocalized, and uses this ratio to establish different relationships between quantities such as fractal dimension, generalized IPR, typical or average *IPR*'s and also a classification as a function of the energy, in order to analyse these systems generated by chaotic maps. It was possible to characterize the chaotic potentials, to obtain a correlation between *IPR* and the Lyapunov exponent  $Ly$ , to reproduce the singularity found by Johri and Bhatt for random potentials, and to offer evidence of the multifractality of the eigenstates. In sum, it was shown that the chaotic maps present the advantage of disorder control by means of setting the chaoticity.

**Keywords:** Chaotic maps, Schrödinger equation, quasi-crystals, inverse participation ratio.

# Lista de Figuras

Figura 1 – Potencial aleatório gerado com a função randômica do Matlab: (a) Curva de densidade de probabilidade $ \psi ^2$ para um autovetor do hamiltoniano. (b) Espectro de energias do mesmo sistema. . . . .	9
Figura 2 – Potencial periódico: (a) Curva de densidade de probabilidade $ \psi ^2$ para um autovetor do hamiltoniano. (b) Espectro de energias do mesmo sistema. . . . .	10
Figura 3 – Sequência Logística: mapa de bifurcação. Observe que o mapa se inicia em $r = 2.9$ , pois os valores anteriores do parâmetro $r$ apresentam apenas um estado estacionário e não serão relevantes para este trabalho. . . . .	12
Figura 4 – Sequência da barraca: mapa de bifurcação. Observe que a passagem periódico-caótico acontece de maneira abrupta em $r = 0.5$ . . . . .	13
Figura 5 – Sequência gaussiana: mapa de bifurcação. O parâmetro $b = 7.5$ está fixado para todo esse trabalho. . . . .	14
Figura 6 – (a) Sequência de $IPR's$ para sistemas sob potencial aleatório. (b) Sequência de $IPR's$ para sistemas sob potencial periódico. . . . .	16
Figura 7 – $IPR(E)$ e $Ly\alpha$ para o modelo de Anderson unidimensional com distribuição aleatória uniforme (JOHRI; BHATT, 2012). . . . .	16
Figura 8 – Mapa logístico: espectro de energias para diferentes valores de $r$ . O eixo $y$ representa a energia e o eixo $x$ representa o índice do autovetor. . . . .	20
Figura 9 – Mapa logístico: decaimento de $ \psi ^2$ para o estado mais baixo de energia e para diferentes valores de $r$ . O eixo $y$ representa a densidade de probabilidade e o eixo $x$ representa a posição do vetor na rede. . . . .	22
Figura 10 – Mapa logístico: decaimento de $ \psi ^2$ para o estado 500 de energia e para diferentes valores de $r$ . Observe que para $r = 3.5$ o comportamento localizado é justificado exibindo-se um <i>zoom</i> no espectro de energia. . . . .	23
Figura 11 – Mapa da barraca: espectro de energias para diferentes valores de $r$ . . . . .	24
Figura 12 – Mapa da barraca: decaimento de $ \psi ^2$ para o estado mais baixo de energia e para diferentes valores de $r$ . . . . .	25
Figura 13 – Mapa da barraca: decaimento de $ \psi ^2$ para o estado 500 de energia e para diferentes valores de $r$ . . . . .	26
Figura 14 – Mapa gaussiano: espectro de energias para diferentes valores de $r$ . . . . .	27
Figura 15 – Mapa gaussiano: decaimento de $ \psi ^2$ para o estado mais baixo de energia e para diferentes valores de $r$ . . . . .	28
Figura 16 – Mapa gaussiano: decaimento de $ \psi ^2$ para o estado 500 de energia e para diferentes valores de $r$ . . . . .	29

Figura 17 – Mapa logístico: (a) $IPR(n)$ para todos os níveis de energia com $r = 3.80$ . Destacadas duas regiões que apresentam o valor do $IPR$ utilizados na parte b. (b) Decaimento de $ \psi ^2$ para os estados 201, 702 e 705 de energia. . . . .	30
Figura 18 – Mapa logístico: (a) $IPR(n)$ para todos os níveis de energia com $r = 4$ . Destacadas duas regiões que apresentam o valor do $IPR$ utilizados na parte b. (b) Decaimento de $ \psi ^2$ para os estados 101, 510 e 511 de energia. . . . .	30
Figura 19 – Mapa da barraca: (a) $IPR(n)$ para todos os níveis de energia para o mapa da barraca com $r = 0.7$ . Destacadas duas regiões que apresentam o valor do $IPR$ utilizados na parte b. (b) Decaimento de $ \psi ^2$ para os estados 121, 498 e 504 de energia. . . . .	31
Figura 20 – Mapa da barraca: (a) $IPR(n)$ para todos os níveis de energia com $r = 0.99$ . Destacadas duas regiões que apresentam o valor do $IPR$ utilizados na parte b. (b) Decaimento de $ \psi ^2$ para os estados 88, 94 e 524 de energia. . . . .	31
Figura 21 – Mapa gaussiano: (a) $IPR(n)$ para todos os níveis de energia com $r = -0.3$ . Destacadas duas regiões que apresentam o valor do $IPR$ utilizados na parte b. (b) Decaimento de $ \psi ^2$ para os estados 113, 645 e 647 de energia. . . . .	32
Figura 22 – Mapa logístico: (a) $IPR(n)$ para todos os níveis de energia com $r = 3.58$ . (b) Decaimento de $ \psi ^2$ para os estados 235, 510, 640 e 740 de energia. . . . .	34
Figura 23 – Mapa logístico: (a) $IPR(n)$ para todos os níveis de energia com $r = 3.67$ . (b) Decaimento de $ \psi ^2$ para os estados 500, 501 e 545 de energia. . . . .	34
Figura 24 – Mapa da barraca: (a) $IPR(n)$ para todos os níveis de energia para o mapa da barraca com $r = 0.6$ . (b) Decaimento de $ \psi ^2$ para os estados 500, 501 e 650 de energia. . . . .	35
Figura 25 – Mapa gaussiano: (a) $IPR(n)$ para todos os níveis de energia com $r = -0.76$ . (b) Decaimento de $ \psi ^2$ para os estados 500, 501 e 663 de energia. . . . .	36
Figura 26 – Mapa logístico: (a) Recorte do mapa de bifurcações. (b) $IPR(r)$ e $Ly$ para diferentes valores de $r$ do mapa. . . . .	38
Figura 27 – Mapa da barraca: (a) Recorte do mapa de bifurcações. (b) $IPR(r)$ e $Ly$ para diferentes valores de $r$ do mapa. . . . .	38
Figura 28 – Mapa gaussiano: (a) Recorte do mapa de bifurcações. (b) $IPR(r)$ e $Ly$ para diferentes valores de $r$ do mapa. . . . .	39

Figura 29 – $IPR$ do mapas Logístico, da Barraca e Gaussiano <i>versus</i> respectivo expoente de Lyapunov. Observe que as regiões de caos e comportamento aleatório são preservadas. . . . .	40
Figura 30 – Mapa de comportamento periódico ( $P$ ), caótico ( $C_1$ e $C_2$ ) e regiões com comportamento SNA (hachurado) Considere $\epsilon' = \alpha\epsilon/(4 - \alpha)$ . (AWADHESH et al., 2001) . . . . .	41
Figura 31 – Região com comportamento SNA. Linhas tracejadas são indicativas de zero e das fronteiras da região SNA para $\epsilon' = 0.95$ . Para o cálculo do $IPR(r)$ utilizou-se o autovetor 300. . . . .	42
Figura 32 – $IPR(E)$ e $Ly(E)$ para o modelo de Anderson unidimensional com distribuição aleatória uniforme (JOHRI; BHATT, 2012). Observe que na energia $\pm 2.5$ o $IPR(E)$ sofre uma mudança abrupta, enquanto o $Ly(E)$ não. . . . .	43
Figura 33 – $IPR(E)$ para os mapas periódico e aleatório. O extremo aleatório condizente com a literatura e o extremo periódico gerado para análise dos mapas caóticos. . . . .	44
Figura 34 – $IPR(E)$ para as sequências de Fibonacci, Duplicação de Período, Thue-Morse, Dobra de Papel e Rudin-Shapiro. . . . .	45
Figura 35 – Mapa logístico: $IPR(E)$ para diferentes valores de $r$ . . . . .	46
Figura 36 – Mapa da barraca: $IPR(E)$ para diferentes valores de $r$ . . . . .	46
Figura 37 – Mapa gaussiano: $IPR(E)$ para diferentes valores de $r$ . . . . .	47
Figura 38 – Sequência periódica: (a) Gráfico em escala logarítmica envolvendo o tamanho do sistema e o $GIPR$ com $q = 2$ . Para este gráfico, pelo ajuste de curvas, obteve-se coeficiente angular $a = -0.9938$ , com precisão de 100%. (b) Gráfico em escala logarítmica envolvendo o tamanho do sistema e o $GIPR$ com $q = 3$ . Para este gráfico, pelo ajuste de curvas, obteve-se coeficiente angular $a = -1.988$ , com precisão de 100%. . . . .	50
Figura 39 – Sequência aleatória: (a) Gráfico em escala logarítmica envolvendo o tamanho do sistema e o $GIPR$ com $q = 2$ . Para este gráfico, pelo ajuste de curvas, obteve-se coeficiente angular $a = -0.1448$ , com precisão de 80%. (b) Gráfico em escala logarítmica envolvendo o tamanho do sistema e o $GIPR$ com $q = 3$ . Para este gráfico, pelo ajuste de curvas, obteve-se coeficiente angular $a = -0.2555$ , com precisão de 93%. . . . .	51
Figura 40 – (a) Curva do valor assintótico da dimensão fractal para diferentes $q$ 's gerados pela sequência periódica. (b) Curva do valor assintótico da dimensão fractal para diferentes $q$ 's gerados pela sequência aleatória. . . . .	52
Figura 41 – Quadro comparativo para as sequências penepериódicas. Em cada gráfico, pode-se ver a relação $d_q \times q$ . . . . .	53

Figura 42 – Quadro comparativo para as sequências peneperiódicas. Em cada gráfico, pode-se ver a relação $d_q \times q$ . . . . .	53
Figura 43 – Quadro comparativo para o mapa logístico. Em cada gráfico, pode-se ver a relação $d_q \times q$ . . . . .	54
Figura 44 – Quadro comparativo para o mapa da barraca. Em cada gráfico, pode-se ver a relação $d_q \times q$ . . . . .	55
Figura 45 – Quadro comparativo para o mapa gaussiano. Em cada gráfico, pode-se ver a relação $d_q \times q$ . . . . .	56
Figura 46 – Mapa de bifurcação para sequência logística. . . . .	66
Figura 47 – Mapa de bifurcação para o mapa da barraca. . . . .	66
Figura 48 – Mapa de bifurcação para o mapa gaussiano. . . . .	66

# Lista de Abreviaturas e Siglas

IPR(N)	Inverso do Número de Participação em função do tamanho $N$ do sistema.
IPR(E)	Inverso do Número de Participação em função da energia (E) do sistema.
GIPR (N)	Inverso do Número de Participação Generalizado em função do tamanho $N$ do sistema.
GIPR(E)	Inverso do Número de Participação Generalizado em função da energia (E) do sistema.
Lya	Expoente de Lyapunov dos autovetores.
Ly	Expoente de Lyapunov do mapa caótico.
SNA	regiões com atrator não-caóticos.

# Lista de Símbolos

$\psi$	Função de onda
$\rho(T)$	Conjunto resolvente associado ao operador $T$
$\lambda$	Número complexo
$\sigma(T)$	Espectro do operador $T$
$ \psi ^2$	Densidade de probabilidade
$N$	Tamanho dos sistemas
$d_q$	Dimensão fractal
$q$	Índice da dimensão fractal
$H$	Hamiltoniano da equação de Schrödinger
$V$	Potencial da equação de Schrödinger
$n$	Posição do termo na sequência
$w$	Termo da sequência caótica
$r$	Parâmetro a ser definido dos mapas caóticos
$b$	Parâmetro a ser definido do mapa gaussiano
$\rho^{-1}$	Inverso do número de Participação
$\rho_q^{-1}$	Inverso do número de participação generalizado.

# Sumário

<b>1 – Introdução</b> . . . . .	<b>1</b>
1.1 Estrutura da Tese . . . . .	6
<b>2 – Caracterização do problema e Metodologia</b> . . . . .	<b>7</b>
2.1 A equação de Schrödinger independente do tempo . . . . .	7
2.2 O método de resolução numérica <i>tight-binding</i> , os resultados de Anderson e Bloch . . . . .	8
2.3 Mapas e potenciais caóticos . . . . .	10
2.3.1 Mapa logístico . . . . .	11
2.3.2 Mapa da barraca . . . . .	12
2.3.3 Mapa Gaussiano . . . . .	13
2.4 Inverso do Número de Participação ( <i>IPR</i> ) . . . . .	14
2.4.1 <i>IPR versus</i> tamanho do sistema e <i>IPR versus</i> Energia . . . . .	15
2.4.2 O <i>GIPR</i> e a dimensão multifractal dos autoestados . . . . .	17
<b>3 – Caracterização dos sistemas sob potenciais caóticos</b> . . . . .	<b>19</b>
3.1 Espectro e autovetores . . . . .	19
3.1.1 Mapa logístico . . . . .	20
3.1.2 Mapa da barraca . . . . .	21
3.1.3 Mapa Gaussiano . . . . .	24
3.2 <i>IPR</i> e o decaimento de $ \psi ^2$ . . . . .	25
3.2.1 Mapa logístico . . . . .	27
3.2.2 Mapa da barraca . . . . .	28
3.2.3 Mapa gaussiano . . . . .	32
3.3 O <i>IPR</i> e as fronteiras de mobilidade . . . . .	33
<b>4 – <i>IPR</i> e o expoente de Lyapunov dos mapas caóticos</b> . . . . .	<b>37</b>
<b>5 – <i>IPR</i> e a singularidade Johri-Bhatt</b> . . . . .	<b>43</b>
5.1 Os mapas peneperiódicos . . . . .	44
5.2 Os mapas caóticos . . . . .	45
<b>6 – <i>GIPR</i> e a dimensão multifractal dos autoestados</b> . . . . .	<b>49</b>
6.1 Dimensão fractal para sequências aleatória, periódica e peneperiódicas . . . . .	50
6.2 Dimensão fractal para os mapas caóticos . . . . .	54
<b>7 – Conclusão</b> . . . . .	<b>57</b>

7.1 Trabalhos Futuros . . . . .	60
<b>Referências . . . . .</b>	<b>61</b>
<b>Anexos</b>	<b>65</b>
<b>ANEXO A – Diagramas de Bifurcação . . . . .</b>	<b>66</b>
<b>ANEXO B – Trabalhos Publicados . . . . .</b>	<b>67</b>

# Capítulo 1

## Introdução

Na natureza, é possível encontrar materiais ordenados e desordenados. A estrutura do material é responsável, em grande parte, pelas propriedades físicas que aquele material possui. Por exemplo, um material com estrutura cristalina ordenada periódica pode apresentar característica física de bom condutor (de eletricidade ou calor, por exemplo). Porém, muitos materiais apresentam uma estrutura com impurezas na ordenação. Já esses materiais apresentam características de isolamento e são considerados desordenados do ponto de vista do ordenamento de átomos que compõem a estrutura da matéria (aqui, desconsiderando outras características importantes para classificação do material como, por exemplo, as vindas da eletrodinâmica). Há anos a física vem se preocupando em modelar matematicamente essas estruturas atômicas, com o objetivo de compreender e prever características dos materiais disponíveis na natureza e eventualmente de produzir novos materiais, com características específicas. Essa modelagem faz parte da física do estado sólido e uma das classificações importantes para o fenômeno da resistência (ou condutância) proposta nesta teoria procura distinguir um dado estado quântico entre localizado e estendido espacialmente, como indicaremos abaixo.

Uma maneira matemática de se modelar as diferentes estruturas materiais consiste em introduzir-se as principais características de estrutura atômica no potencial que aparece na Equação de Schrödinger.

Esta é uma equação diferencial parcial de segunda ordem nas variáveis espaciais, desenvolvida pelo físico teórico austríaco Erwin Rudolf Josef Alexander Schrödinger, pela qual recebeu o prêmio Nobel de física, em 1933. Ela é utilizada para descrever como o estado quântico de um sistema físico muda com o passar do tempo. Sua solução é dada por uma função de onda  $\Psi(x, t)$  que descreve o comportamento do sistema ao longo do tempo, através da interpretação de  $|\psi|^2$  como sendo a densidade de probabilidade de se encontrar a partícula de interesse numa dada região do espaço num determinado tempo.

Apesar dos materiais apresentarem uma estrutura de ordenamento tridimensional, o modelamento em uma dimensão traz à tona várias propriedades de sólidos reais. Em alguns casos, a unidimensionalidade é suficiente para sugerir as propriedades de transmissão dos materiais. Essa simplificação facilita muito a modelagem matemática da estrutura, pois possibilita a utilização de técnicas mais simples para simular o potencial da Equação de Schrödinger e reduz consideravelmente as variáveis do problema.

A redução das variáveis na equação de Schrödinger também possibilita que se utilize a versão discretizada para obter sua solução. Essa, apresenta soluções numéricas e é realizada neste trabalho utilizando-se o modelo *tight-binding*, que considera que o potencial é apreciável apenas nas proximidades dos átomos (sítios da rede), sendo desprezível na região entre-átomos, o que permite a utilização de sequências numéricas para simulação do potencial numa versão discretizada da equação de Schrödinger. Assim, este modelo utiliza-se de sequências numéricas para simular o potencial da equação de Schrödinger e resolvê-la numericamente por meio de uma aproximação discreta para a equação diferencial de segunda ordem. De maneira sucinta (MERLIN et al., 1985), podemos estabelecer a seguinte forma de classificação para a função de onda, solução da equação: (a) caso a geração do potencial para o modelo *tight-binding* de resolução da equação de Schrödinger seja aleatória, então a probabilidade apreciável de se encontrar a partícula na rede está reduzida a um intervalo finito, ou seja, a partícula está confinada numa região finita da rede. Esse resultado é conhecido como localização de Anderson (ANDERSON, 1958); (b) caso a sequência de geração para o potencial da equação de Schrödinger seja periódica, então a probabilidade de se encontrar a partícula é estendida a toda rede. Esse resultado é consequência do teorema de Bloch (ASHCROFT; MERMIN, 1976).

Além disso, no conjunto dos números reais, o operador de Schrödinger é um operador linear autoadjunto não limitado que atua num importante conjunto matemático: o espaço de Hilbert. Esse é uma generalização do espaço euclidiano que não precisa estar restrito a um número finito de dimensões (KREYSZIG, 1989). É um espaço vetorial, dotado de produto interno, normado e completo. Esse espaço pode ser decomposto em associação a dois subconjuntos dos escalares: o conjunto resolvente  $\rho(T)$  associado ao operador  $T$  (que contém todos os números complexos  $\lambda$  para os quais o operador resolvente  $R_\lambda$  existe, é limitado e possui domínio denso no espaço) e o seu complementar, a parte espectral  $\sigma(T)$ .

Neste trabalho, exploraremos mais a parte espectral  $\sigma(T)$ , que pode ser dividida em três subconjuntos: as partes pontual  $\sigma_p(T)$ , contínua  $\sigma_C(T)$  (que novamente se divide em duas: absolutamente contínua ( $\sigma_{AC}(T)$ ) e singular contínua ( $\sigma_{SC}(T)$ ) e residual  $\sigma_R(T)$ .

$$\sigma(T) = \sigma_P(T) \cup \sigma_{AC}(T) \cup \sigma_{SC}(T) \cup \sigma_R(T)$$

De maneira sucinta e sem rigor matemático, os operadores autoadjuntos atuando em espaços de Hilbert complexos têm sua parte residual do espectro sempre vazia. Como a equação de Schrödinger  $H(\psi(x)) = E\psi(x)$  pode ser reescrita na forma  $(H - EI)\psi(x) = 0$ , nota-se que o resolvente do operador Hamiltoniano é dado por  $R_E(H) = (H - EI)^{-1}$  e que o valor  $E$  é um valor regular ou espectral do operador  $H$ . Quando  $E$  é um valor espectral do operador, ele então pertence ou à parte pontual ou à parte contínua (singular contínua ou absolutamente contínua). A partir desses subconjuntos do espectro  $\sigma(H)$ , é possível classificar o tipo de decaimento da curva gerada pela função de onda  $\psi(x)$  de acordo com o tipo espectral em que  $E$  está situado (SOUKOULIS; ECONOMOU, 1984) (KOHMOTO et al., 1987):

- para  $E \in \sigma_P(T)$ ,  $\psi$  é localizada ( $|\psi|^2$  apresenta decaimento exponencial em  $x$ );
- para  $E \in \sigma_{SC}(T)$ ,  $\psi$  é crítica ( $|\psi|^2$  apresenta decaimento algébrico em  $x$ );
- para  $E \in \sigma_{AC}(T)$ ,  $\psi$  é estendida ( $|\psi|^2$  não apresenta decaimento persistente).

Entre esses dois extremos (localizado e estendido), o homem conseguiu produzir estados intermediários. Esses estados (conhecidos como críticos), podem ser gerados a partir de potenciais quase-periódicos (aqueles que apresentam uma regra de criação mas não geram sequências de período finito), seu decaimento é considerado algébrico e está contido na parte singular contínua do espectro de  $H$  (KREYSZIG, 1989). Este estado intermediário ainda é estudado por físicos, matemáticos e engenheiros e esse estudo já fez significativas contribuições para a ciência como, por exemplo, a geração dos quase-cristais na década de 80 (SCHECHTMAN D.; GRATIAS, 1984) (MERLIN et al., 1985).

Desde sua descoberta, as sequências de substituição têm sido utilizadas como simuladores de potenciais para o modelo *tight-binding* de resolução da equação de Schrödinger, em especial como modo de se gerar estados críticos e de se modelar os quase-cristais. Essas sequências são geradas pela repetição de uma dada regra de substituição de valores e muitos trabalhos utilizaram as assim obtidas sequências penepariódicas (Fibonacci, Rudin-Shapiro, Thue-Morse, Dobra de Papel etc.) como base de criação de quase-cristais e muito se estudou sobre as propriedades de transmissão dessas estruturas (RYU et al., 1992) (DULEA et al., 1992a) (DULEA et al., 1992b) (DULEA et al., 1993) (ALLOUCHE, 1997). As sequências penepariódicas são um exemplo de sequências que chamaremos de semi-periódicas para abordar as diversas possibilidades que estariam entre os extremos periódico e aleatório.

A maneira usual de se analisar as propriedades de transmissão das estruturas quase-cristalinas consiste na utilização do decaimento da função densidade de probabilidade  $|\psi|^2$  para o estado quântico  $\psi$  e esta análise define o estado em localizado,

estendido ou crítico. Vários trabalhos utilizaram-se desse medidor para analisar resultados e fazer classificação entre o estado localizado e estendido; porém, já é sabido que a classificação da “desordem” dos sistemas intermediários depende da ferramenta matemática utilizada para classificar os sistemas (GONG et al., 2015).

Muitos importantes resultados e avanços já foram obtidos utilizando-se as sequências de substituição peneperiódicas (MERLIN et al., 1985) (ROY; KHAN, 1994) (ROY et al., 1995) (OH; LEE, 1993) (PIÉCHON et al., 1995) (PIÉCHON, 1996) (MI-ZOGUCHI et al., 1997). De maneira sucinta, pode-se citar a criação de quase-cristais baseando-se na sequência de Fibonacci (de maneira experimental, utilizando-se técnicas de crescimento de cristais por epitaxia), a descoberta de propriedades de transmissão para estruturas  $GaAs - AlAs$  (AXEL; TERAUCHI, 1991), o desenvolvimento de aços inoxidáveis extremamente resistentes, utilizados em lâminas de barbeadores elétricos e agulhas para microcirurgias oftalmológicas, isolantes termoelétricos super-resistentes utilizados para isolantes térmicos de motores, entre outros (BELISSÁRIO, 2003) (YANO, 2011). Porém, ainda existem muitos pontos a serem considerados envolvendo os problemas com essas estruturas intermediárias. Entre as limitações, está o fato de as sequências de substituição serem estáticas, ou seja, são geradas por regras de iteração fixas. Assim, uma vez geradas as sequências, um dado classificador de desordem estabelece uma hierarquia indo das menos desordenadas às mais desordenadas. Como exemplo, no trabalho de mestrado (OLIVEIRA, 2012), sugeriu-se a seguinte hierarquia de desordem, usando-se o decaimento de  $|\psi|^2$  para tal classificação:

Periódico  $\Rightarrow$  Thue-Morse  $\Rightarrow$  Dobra de papel  $\Rightarrow$  Fibonacci  $\Rightarrow$  Duplicação de período  $\Rightarrow$   
Rudin-Shapiro  $\Rightarrow$  Aleatório.

Esta estratificação pode ser um limitador quanto ao estudo das propriedades das estruturas intermediárias. Seria desejável poder-se controlar a desordem, por meio de um parâmetro que pudesse ser variado continuamente.

No trabalho de mestrado (OLIVEIRA, 2012) foram propostas duas alternativas às condições estabelecidas anteriormente: (a) a utilização (OLIVEIRA, 2002) de sequências caóticas em substituição às sequências peneperiódicas, como tentativa de se obter desordem variável e (b) a utilização do Inverso do Número de Participação ( $IPR$ ), como alternativa ao medidor  $|\psi|^2$ . Utilizou-se duas maneiras de análise dos resultados: qualitativa (de forma classificatória, organizou-se quadros incluindo sequências peneperiódicas, caóticas, aleatória e periódica) e quantitativa (utilizou-se o  $IPR$  para classificar as sequências peneperiódicas e caóticas entre os extremos periódico e aleatório). Conseguiu-se perceber que o  $IPR$  é tão eficaz medidor de participação dos sítios na distribuição da função de onda  $\psi$  sobre o sistema quanto o convencional  $|\psi|^2$ , e que as sequências caóticas apresentavam vantagens de controle da desordem por meio

do ajuste de parâmetros que geram os mapas caóticos, e esse é um avanço com relação às penepериódicas.

O presente trabalho consiste na exploração das sequências geradas a partir de mapas estudados na teoria do caos (HILBORN, 2000) como alternativa às sequências penepериódicas, para simulação do modelo *tight-binding* de resolução do hamiltoniano da equação de Schrödinger, e um aprofundamento da análise utilizando o *IPR* como ferramenta de medição de participação dos sítios num dado estado desse sistema. Além disso, pretende-se explorar a possibilidade de controle da caoticidade através do ajuste de parâmetro para esses mapas caóticos, característica que pode ser um benefício frente às sequências penepериódicas.

Essa análise se dará de forma qualitativa, utilizando-se os autovetores e o espectro; e quantitativa, por meio do *IPR*, pelo decaimento de  $|\psi|^2$  dos autovetores e pelo expoente de Lyapunov  $L_y$  dos mapas caóticos. Caso esse controle realmente seja possível, o fato de se poder obter modelos que se aproximem mais do comportamento aleatório ou periódico pode ser uma contribuição inovadora para as pesquisas da área, que ainda não utilizam os mapas caóticos na geração de materiais desordenados. O *IPR* será analisado não apenas pelo tamanho  $N$  do sistema, mas também variando-se a energia  $E$  do estado quântico. Acredita-se que essa nova análise pode trazer contribuições e novas informações quanto ao sistema. Utilizar-se-á as sequências penepериódicas, periódica e aleatória como referências já conhecidas que nortearão a análise dos resultados obtidos pelos mapas caóticos. Além disso, uma relação entre *IPR* e  $L_y$  será realizada, pois o expoente  $L_y$ , sendo um medidor da caoticidade das sequências, pode fortalecer a ideia de que o *IPR* é um bom medidor de desordem para as sequências caóticas.

A comparação entre o *IPR* e o expoente de Lyapunov dos autovetores  $L_y$  também é apresentada por Johri e Bhatt (JOHRI; BHATT, 2012). Em seu trabalho, eles perceberam uma singularidade no comportamento do *IPR* para as sequências aleatórias no modelo de localização de Anderson. Acredita-se que os mapas caóticos, por apresentarem comportamento muito próximo aos obtidos com sequências aleatórias, também apresentarão tal singularidade. Ademais, se verificado o controle da desordem pela variação do parâmetro de caoticidade, então pode-se tentar uma construção desta singularidade por aproximação.

Será realizada também a generalização do *IPR* para o *IPR* generalizado - *GIPR* (CUEVAS, 2002) (MURPHY et al., 2011). Essa consiste em caracterizar os autovetores sob diferentes valores de expoente do *IPR* convencional. Acredita-se que esta generalização pode trazer contribuições significativas na análise dos resultados obtidos com mapas caóticos, notadamente aquelas que se referem à multifractalidade dos autovetores.

Finalmente, será feita uma análise da dimensão fractal dos autovetores por meio do *IPR*. Neste contexto do modelo de Anderson, as autofunções do sistema podem

ser vistas como distribuições fractais. Sabe-se (EVERS; MIRLIN, 2000) que o  $IPR$  para sistemas de tamanho finito está relacionado com a dimensão fractal  $d_q$  associada a uma dada autofunção. Assim, acredita-se que a análise fractal pode trazer informações importantes sobre sistemas sob potenciais caóticos e contribuir ainda mais para a compreensão de suas propriedades.

## 1.1 Estrutura da Tese

A presente tese se divide em sete capítulos. A introdução apresentou uma ideia panorâmica do trabalho; no capítulo 2, a Caracterização do problema e Metodologia mostram a viabilidade em utilizar o  $IPR$  e as sequências caóticas como medidor de desordem e simuladoras de potencial na equação de Schrödinger, respectivamente, e apresentam a base matemática necessária para que isso aconteça; o capítulo 3 apresenta a Caracterização das Sequências Caóticas; o capítulo 4, o  $IPR$  agrupado por energia e o expoente de Lyapunov ( $Ly$ ); o capítulo 5 traz o  $GIPR$  e a singularidade Johri-Bhatt; o capítulo 6 apresenta uma relação entre o  $GIPR$  e as dimensões fractais do sistema e, finalmente, o capítulo 7 apresenta as considerações finais e uma análise dos resultados. Uma proposta de trabalhos futuros para esse trabalho também está presente no capítulo. A revisão bibliográfica é feita ao longo de todo o texto.

# Capítulo 2

## Caracterização do problema e Metodologia

Apresenta-se aqui, as principais ferramentas matemáticas utilizadas para o desenvolvimento do trabalho e como essas ferramentas serão utilizadas para resolver os problemas de pesquisa propostos. Além disso, apresenta-se a caracterização do problema, sua justificativa e objetivo do projeto.

### 2.1 A equação de Schrödinger independente do tempo

A equação de Schrödinger unidimensional e dependente do tempo é dada pela equação

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + U(x)\Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (1)$$

onde

- $\hbar = \frac{h}{2\pi}$  ( $h$  é a constante de Planck);
- $m$  é a massa da partícula;
- $t$  é o tempo;
- $x$  é a coordenada espacial no tempo  $t$ ;
- $U(x)$  é o potencial a que a partícula está sujeita na posição  $x$ ;
- $\Psi$  é a função de onda (complexa).

Para resolvê-la, utilizamos o método de separação de variáveis. Esse método supõe que a função de onda  $\Psi(x, t)$  pode ser dividida em duas funções: uma que depende exclusivamente da posição  $x$  e outra que depende exclusivamente do tempo  $t$ .

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \cdot \phi(t)$$

Assim, são obtidas duas equações:

1. A equação temporal:  $\frac{d\phi(t)}{dt} = \frac{E}{i\hbar}\phi(t)$ , cuja solução é dada por  $\phi(t) = Ae^{\frac{-Et}{i\hbar}}$ , onde  $A$  é uma constante a ser definida e  $E$  é a energia da partícula.
2. A equação independente do tempo:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (2)$$

onde  $E$  é a energia da partícula. A solução dessa equação depende do potencial  $U(x)$  a que a partícula está sujeita.

A equação independente do tempo é comumente apresentada na forma  $H(\psi(x)) = E\psi(x)$ , para isso basta considerar  $\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x) = H$  e esse é chamado de hamiltoniano da equação de Schrödinger.

Na próxima sessão veremos como aproximar numericamente esse hamiltoniano pelo método numérico *tight-binding*.

## 2.2 O método de resolução numérica *tight-binding*, os resultados de Anderson e Bloch

Uma maneira de se resolver numericamente a Equação de Schrödinger unidimensional independente do tempo é através do modelo *tight-binding*. Esse consiste em aproximar numericamente o hamiltoniano da equação

$$H = \frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x),$$

por meio da aproximação da diferencial de segunda ordem  $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}$  que é dada por

$$\frac{\psi_{n+1} - 2\psi_n + \psi_{n-1}}{(\Delta_n)^2},$$

em que  $\Delta_n = x_{n+1} - x_n$  é tomado com valor 1 de espaçamento entre os sítios  $n$  e  $n + 1$ .

Assim, substituindo a parte aproximada na equação (2), obtêm-se a seguinte relação:

$$(H\psi)_n = \psi_{n+1} + \psi_{n-1} + V_n\psi_n, \quad (3)$$

em que  $\psi_n$  é a amplitude da função de onda no sítio  $n$ . O modelo *tight-binding* exige a utilização de sequências de potencial  $V_n$  como diagonal principal da equação matricial que reescreve a equação 3:

$$\begin{bmatrix} V_1 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & V_2 & 1 & 0 & \vdots \\ 0 & 1 & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & 1 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & V_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_N \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \vdots \\ \psi_N \end{bmatrix} \quad (4)$$

Pela localização de Anderson ([ANDERSON, 1958](#)), potenciais aleatórios confinam as soluções  $\psi$  em regiões finitas da rede, o que resulta em materiais mau condutores, dada a interpretação probabilística da Mecânica Quântica. A figura 1 apresenta um exemplo de densidade de probabilidade associada a um autovetor e o espectro de energia gerados pela resolução numérica *tight-binding* da equação de Schrödinger unidimensional independente do tempo sob potencial aleatório. É possível ver que a probabilidade de encontrar a partícula está confinada em uma região finita e que o espectro é representado por uma curva não suave formada por pontos discretizados.

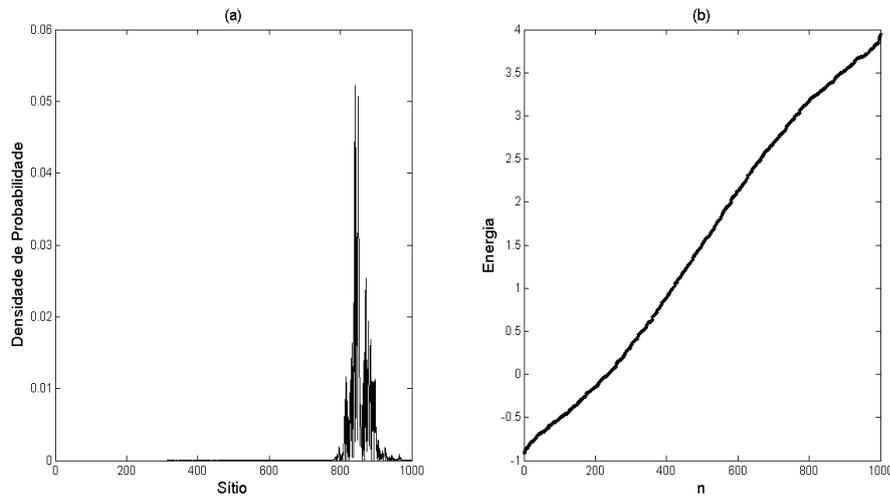


Figura 1 – Potencial aleatório gerado com a função randômica do Matlab: (a) Curva de densidade de probabilidade  $|\psi|^2$  para um autovetor do hamiltoniano. (b) Espectro de energias do mesmo sistema.

Por outro lado, o teorema de Bloch ([ASHCROFT; MERMIN, 1976](#)) afirma que a utilização de potenciais periódicos fazem com que  $|\psi|^2$  também seja periódica e, assim, todos os sítios tenham participação apreciável na formação do estado  $\psi$ , o que gera bons condutores. A figura 2 mostra claramente que uma partícula sob ação deste potencial tem probabilidade apreciável de ser encontrada ao longo de toda a rede. Observa-se,

também, que o espectro é representado por uma curva suave e um *gap* de energia proibida (a presença de um ou mais *gaps* está diretamente relacionada com o período da sequência utilizada, podendo ou não existir.)

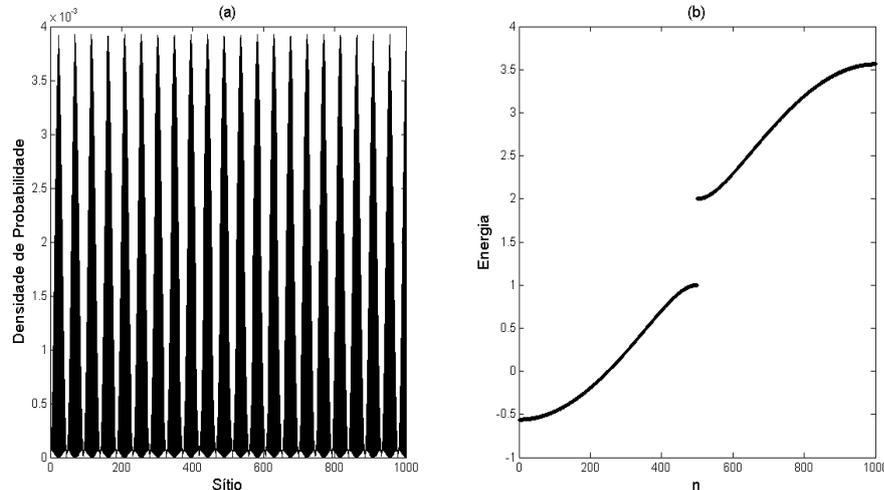


Figura 2 – Potencial periódico: (a) Curva de densidade de probabilidade  $|\psi|^2$  para um autovetor do hamiltoniano. (b) Espectro de energias do mesmo sistema.

Até então, muitos trabalhos (OH; LEE, 1993) (PIÉCHON et al., 1995) (ROY; KHAN, 1994) (ROY et al., 1995) (RYU et al., 1993) utilizaram sequências penepериódicas para simular o potencial da equação. Essas sequências geram resultados intermediários aos casos aleatório e periódico e essa é uma maneira de se gerar quase-cristais. De maneira alternativa, este trabalho propõe a utilização de mapas caóticos (que recebem esse nome por advirem da teoria do caos) e acredita-se que as sequências geradas por estes mapas apresentam vantagens em relação às sequências já utilizadas.

### 2.3 Mapas e potenciais caóticos

Existem vários mapas caóticos (HILBORN, 2000). De maneira genérica, esses mapas são dados por relações da forma  $w_{n+1} = f_r(w_n)$ , onde  $f_r$  é uma operação aplicada em um dado  $w_n$  para obter-se o termo seguinte  $w_{n+1}$  e a variação do parâmetro  $r$  provoca comportamento dito caótico da quantidade  $w_n$ : descartados os transientes iniciais, os pontos fixos  $w_n(r)$  proliferam de modo errático, o que se convencionou denominar rotas para o caos (vide os exemplos que se seguem). Para este trabalho, escolhemos três mapas com diferentes características e rotas para o caos.

### 2.3.1 Mapa logístico

O mapa logístico é construído a partir da seguinte regra de iteração

$$w_{n+1} = rw_n(1 - w_n), \quad (5)$$

onde  $r \in [0, 4]$  é um parâmetro a ser definido,  $w_1$  é a semente inicial da sequência e  $n$  é a posição do termo na sequência.

Neste mapa, a rota para o caos se dá através de bifurcações e tem-se sempre  $w_n \in [0, 1]$ . Geralmente (e neste trabalho), os primeiros termos da sequência são considerados transientes e descartados. As sequências  $w_n$  poderiam ser usadas como potencial na equação de Schrödinger; entretanto, para possibilitar comparação com as sequências binárias largamente utilizadas em trabalhos envolvendo sequências numéricas e também para se ter em vista a possibilidade experimental oferecida pelas técnicas de crescimento de cristais por epitaxia, escolheu-se utilizar as sequências binárias  $V_n$  formadas pela seguinte regra: (a) se  $w_n \leq 0.5$ , então  $V_n = 1$ ; (b) se  $w_n > 0.5$  então  $V_n = 2$ . Segundo Steuer (STEUER et al., 2001), essa é considerada a melhor maneira de se transformar o mapa logístico em uma sequência binária, pois maximiza a entropia da sequência.

Para exemplificar essa transformação entre mapa logístico e sequência binária, abaixo apresenta-se a transformação para os dez primeiros números obtidos pela regra de criação 5 com semente inicial  $w_1 = 0.3333$ .

$$(0.333; 0.8888; 0.3952; 0.9561; 0.1680; 0.5591; 0.9860; 0.0552; 0.2084; 0.6600) \quad (6)$$

gera a sequência binária (1, 2, 1, 2, 1, 2, 2, 1, 1, 2).

O mapa logístico apresenta rota para o caos por meio de bifurcações. Essas podem ser claramente vistas através da figura 3, que apresenta os pontos fixos do mapa logístico descartando-se o transiente inicial.

Observe que à medida que o parâmetro  $r$  se aproxima do limite superior, a sequência vai se tornando mais caótica e apresenta maiores possibilidades de pontos fixos, o que é comumente quantificado pelo expoente de Lyapunov ( $Ly$ ) da sequência (HILBORN, 2000), que é dado por

$$Ly(r) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \ln |f'_r(w_n)|, \quad (7)$$

onde  $N$  é o número total de iterações e  $f'$  é a derivada de  $f$ .

Mostraremos que os resultados obtidos com sequências de parâmetro  $r$  maiores se aproximam mais dos resultados obtidos com sequências aleatórias, com exceção das

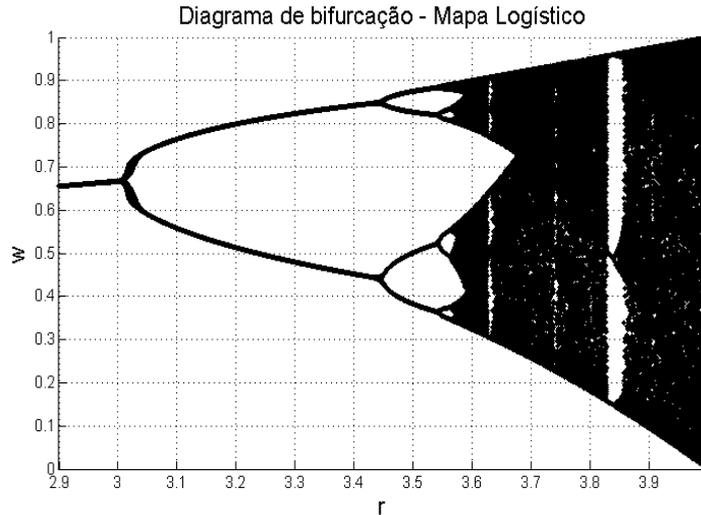


Figura 3 – Sequência Logística: mapa de bifurcação. Observe que o mapa se inicia em  $r = 2.9$ , pois os valores anteriores do parâmetro  $r$  apresentam apenas um estado estacionário e não serão relevantes para este trabalho.

janelas de periodicidade existentes na figura 3. Isso pode ser observado utilizando-se os parâmetros  $r = 3.6$ ,  $r = 3.75$  e  $r = 4.0$ , e sugere que, nos mapas caóticos, o controle da caoticidade pode implicar diretamente no controle da desordem do sistema, fato que garantiria ao pesquisador poder ajustar a sequência ao problema físico em que estivesse interessado naquele momento.

### 2.3.2 Mapa da barraca

O mapa da barraca é construído pela seguinte regra de iteração

$$w_{n+1} = r \left( 1 - 2 \left| w_n - \frac{1}{2} \right| \right), \quad (8)$$

onde  $r \in [0, 1]$  é um parâmetro a ser definido,  $w_1$  é a semente inicial da sequência e  $n$  é a posição do termo na sequência. Também aqui, utilizou-se sequências binárias  $V_n$  formadas pela seguinte regra: (a) se  $w_n \leq 0.5$ , então  $V_n = 1$ ; (b) se  $w_n > 0.5$  então  $V_n = 2$  e descartou-se os primeiros elementos da sequência, considerados transientes.

O mapa da barraca não apresenta rota para o caos através de bifurcações, como no mapa anterior. Aqui, a rota para o caos é dada de forma abrupta em  $r = 0.5$ . Porém, à medida que o parâmetro  $r$  se aproxima de 1, as possibilidades de pontos fixos também crescem e, conseqüentemente, a caoticidade aumenta à medida em que  $r$  cresce, o que poderá ser confirmado pelo expoente  $Ly$  da sequência. A figura 4 apresenta os pontos fixos da sequência na medida em que  $r$  varia no intervalo estabelecido.

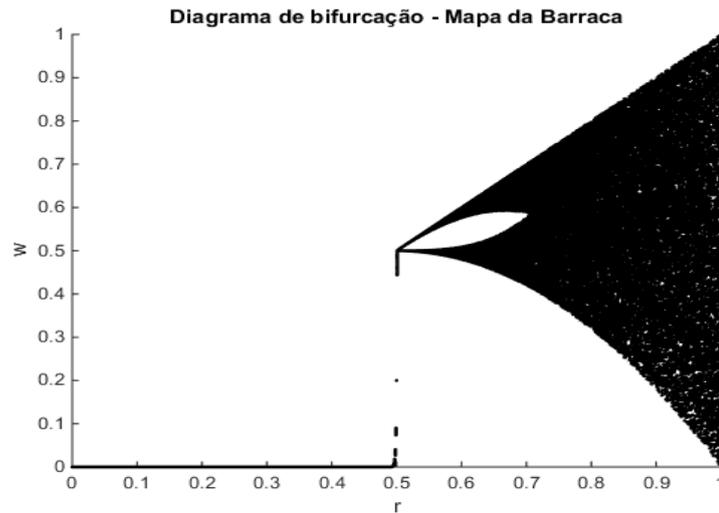


Figura 4 – Sequência da barraca: mapa de bifurcação. Observe que a passagem periódico-caótico acontece de maneira abrupta em  $r = 0.5$ .

### 2.3.3 Mapa Gaussiano

O mapa gaussiano apresenta uma regra de iteração um pouco mais complexa que as outras duas apresentadas. Ele considera dois parâmetros a serem variados, e um deles é determinante para que o mapa apresente ou não regiões caóticas e dado pela seguinte regra de iteração

$$w_{n+1} = e^{-bw_n^2} + r, \quad (9)$$

onde  $r$  e  $b$  são parâmetros a serem definidos,  $w_1$  é a semente inicial da sequência e  $n$  é a posição do termo na sequência.

O mapa gaussiano também apresenta rota para o caos por meio de bifurcações. A diferença é que aqui o retorno às regiões periódicas se dá por meio de unificações. A figura 5 apresenta a rota para o caos do mapa gaussiano. Para esse mapa, o parâmetro  $b = 7.5$  foi fixado, pois garante as regiões caóticas da figura. Casos em que a figura se comporta toda de maneira periódica não são relevantes para este trabalho, pois o objetivo principal é investigar o comportamento dos sistemas gerados por potenciais caóticos e o controle da caoticidade dos mapas.

Este mapa também foi transformado em sequências binárias  $V_n$  formadas pela seguinte regra: (a) se  $w_n \leq 0$ , então  $V_n = 1$ ; (b) se  $w_n > 0$  então  $V_n = 2$  e descartou-se os primeiros elementos da sequência, considerados transientes.

Como as características destes mapas serão determinadas para a validação de nossos resultados e como serão frequentes as referências a estes mapas, o anexo A os traz em conjunto, para consulta rápida.

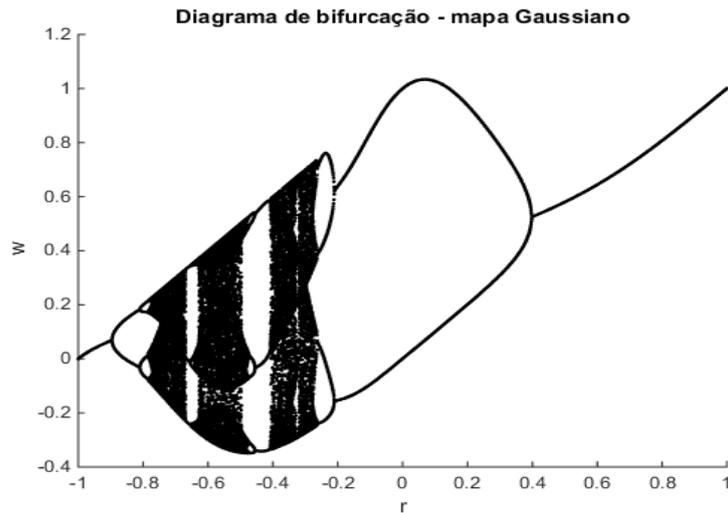


Figura 5 – Sequência gaussiana: mapa de bifurcação. O parâmetro  $b = 7.5$  está fixado para todo esse trabalho.

## 2.4 Inverso do Número de Participação ( $IPR$ )

Uma alternativa ao decaimento de  $|\psi|^2$  como medidor da participação dos sítios, o *Inverse Participation Ratio* ( $IPR$ ) é uma ferramenta matemática já utilizada na teoria do estado sólido (MONTHUS; GAREL, 2010) (LUDLAM, 2004). O  $IPR$  em uma dimensão é dado pela seguinte definição:

$$IPR(N) = \rho^{-1} = \frac{\sum_{i=1}^N |\psi_i|^4}{\left(\sum_{i=1}^N |\psi_i|^2\right)^2} \quad (10)$$

onde:

1.  $N$  é o tamanho do sistema;
2.  $\rho$  é a razão de participação;
3. o denominador é utilizado para normalização.

De forma sucinta, esse número fornece uma estimativa da participação dos sítios da rede na composição da função de onda e, portanto, dá uma medida da sua distribuição sobre a rede. O  $IPR$  pode ser mais vantajoso frente ao decaimento de  $|\psi|^2$  por trazer relações com a dimensão fractal, com o expoente de Lyapunov ( $Ly$ ) do mapa, entre outras relações que serão apresentadas ao longo desse trabalho.

No caso estendido, com sequências de potenciais periódicos, se  $N$  é suficientemente grande, pode-se tomar a densidade de probabilidade como sendo homogeneamente distribuída, de modo que cada sítio  $N$  da rede recebe, aproximadamente, a

mesma probabilidade  $1/N$ . Dessa forma e se consideramos a condição de normalização para o denominador  $\sum_{i=1}^N |\psi_i|^2 = 1$ , o somatório do numerador da equação 10, é igual a  $1/N$ , pois  $|\psi_i|^2 = \frac{1}{N}$ . Disso, decorre

$$|\psi_i|^4 = \frac{1}{N^2} \Rightarrow \sum_{i=1}^N |\psi_i|^4 = N \frac{1}{N^2} = \frac{1}{N}$$

No limite  $N \rightarrow \infty$ , temos que  $\rho^{-1} \rightarrow 0$  para o caso periódico.

Para o extremo aleatório, considerando que  $\psi$  tem decaimento exponencial com uma distância a um centro  $x_j$  fixado pelo valor máximo, tem-se

$$\psi_i \propto e^{-\gamma(x_i - x_j)}$$

Quando  $\gamma$  tende ao infinito, temos

$$\psi_i \propto \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases}$$

Assim, para esta localização extrema, ter-se-ia  $|\psi_i|^2 = \delta_{ij}$  e, conseqüentemente,  $\rho^{-1} \rightarrow 1$ . Para casos localizados menos extremados espera-se, portanto,  $\rho^{-1} \rightarrow k > 0$ , uma constante positiva.

O *IPR* apresentado na equação 10 pode ser generalizado para a seguinte forma:

$$GIPR(N) = \rho_q^{-1} = \frac{\sum_{i=1}^N |\psi_i|^{2q}}{\left(\sum_{i=1}^N |\psi_i|^2\right)^q} \quad (11)$$

conhecido como *GIPR* (MURPHY et al., 2011). Geralmente (OLIVEIRA, 2012) utiliza-se  $q = 2$ , o que nos retorna à equação 10. A utilização de variáveis  $q$ 's pode trazer contribuições para compreender os resultados obtidos utilizando-se as sequências caóticas, sobretudo no que se refere à fractalidade da função de onda.

#### 2.4.1 *IPR versus* tamanho do sistema e *IPR versus* Energia

Alguns autores (OLIVEIRA, 2012) constroem gráficos que levam em consideração o tamanho  $N$  do sistema. A análise assintótica, considerando que o *IPR* se estabiliza em uma constante positiva  $k$  ou tende a zero (MONTHUS; GAREL, 2010) exige que seja assim. Para este trabalho, considerou-se o tamanho das sequências  $N = 1000$ , após verificar-se tamanhos maiores e perceber-se que eles não apresentavam diferenças significativas. A figura 6 apresenta duas curvas de *IPR*, para o estado fundamental, variando-se o tamanho do sistema: uma para o potencial periódico e outra para o potencial aleatório.

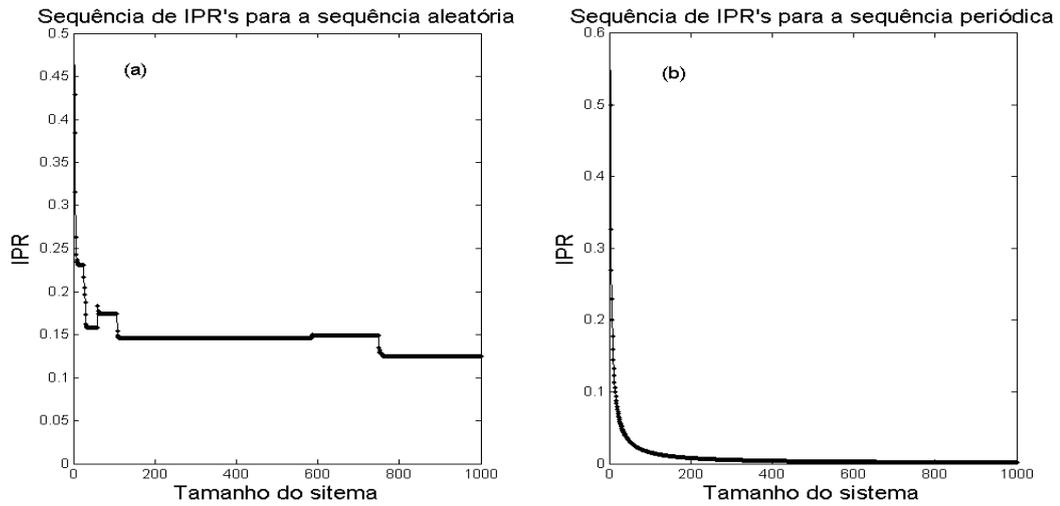


Figura 6 – (a) Sequência de  $IPR$ 's para sistemas sob potencial aleatório. (b) Sequência de  $IPR$ 's para sistemas sob potencial periódico.

Observe que a curva de  $IPR$  se estabiliza em uma constante positiva para o potencial aleatório e tende à zero para o potencial periódico, como esperado.

Em um recente estudo (JOHRI; BHATT, 2012), realizou-se análises com o modelo de Anderson para sistemas desordenados em uma dimensão e percebeu-se uma singularidade para o  $IPR$  em função da energia do estado, que não é acusada pelo expoente de Lyapunov dos autovetores ( $Ly\alpha$ ). Esta singularidade ainda não foi completamente compreendida, mas pode-se afirmar que a derivada primeira é descontínua. A figura 7 ilustra esta singularidade.

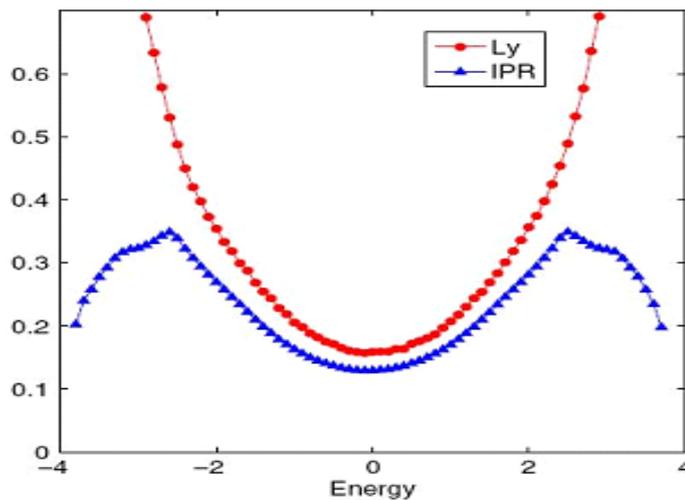


Figura 7 –  $IPR(E)$  e  $Ly\alpha$  para o modelo de Anderson unidimensional com distribuição aleatória uniforme (JOHRI; BHATT, 2012).

Observe que as curvas têm comportamento semelhante no centro da figura. Sabe-se (IZRAILEV et al., 1998) que os autovetores associados às energias do meio do espectro de energia tendem a ser mais delocalizados, o que é possível perceber pelas curvas de  $IPR(E)$  e  $Lya$ . Porém, na medida em que se afastam do centro do espectro, o  $Lya$  tende ao infinito, enquanto o  $IPR(E)$  faz uma mudança abrupta e, aparentemente, tende a zero. Isso contraria o fato de que os autovetores tendem a ser mais localizadas nos extremos das bandas (o que está caracterizado pela curva de  $Lya$ ). Essa singularidade (a abrupta mudança de sentido de localização), representada pelos picos aproximadamente nos pontos  $x = \pm 2.5$ , ainda não está completamente explicada e pode eventualmente ser abordada com o uso dos mapas caóticos. Acredita-se que os mapas caóticos apresentarão semelhante singularidade, pois os resultados já obtidos com o  $IPR(N)$  se aproximam muito dos resultados obtidos pelas sequências aleatórias.

## 2.4.2 O $GIPR$ e a dimensão multifractal dos autoestados

A análise multifractal surgiu para o modelo  $\sigma$  não linear e foi testado para as autofunções do hamiltoniano do operador de Schrödinger. Como essa nova perspectiva funcionou bem, aplicou-se a análise multifractal para os autovetores neste contexto.

No modelo de Anderson, as autofunções do sistema podem ser vistas como distribuições multifractais, com suas várias dimensões  $d_q$ . Um sistema é considerado não fractal quando sua dimensão é constante e inteira; é considerado fractal quando sua dimensão é constante mas é fracionária e, por fim, é considerada multifractal quando a dimensão além de fracionada não é constante, mas sofre variações. Sabe-se (CUEVAS, 2002) que o  $IPR$  para sistemas de tamanho finito está relacionado com a dimensão fractal  $d_q$  associada a uma dada autofunção, conforme explicado a seguir.

Dada a equação 11, o  $GIPR$  pode ser escrito de forma contínua, para autofunções normalizadas, como

$$GIPR(q) = \int_{\Omega} dx |\psi(x)|^{2q} \propto L^{-d_q(q-1)}, \quad (12)$$

onde  $d_q$  é a dimensão fractal associada à autofunção,  $\Omega$  é um intervalo de comprimento  $L$ . Considerando-se diferentes valores de  $q$  para a relação, temos:

$$q = 1:$$

$GIPR(1) \propto L^{-d_1(1-1)}$ , ou seja,  $GIPR(1) \propto L^{-d_1(0)} = 1$ . Aqui, graficamente falando, temos como ajuste de curva uma reta paralela ao eixo das abscissas.

$$q = 2:$$

$$GIPR(2) \propto L^{-d_2(2-1)}, \text{ ou seja, } GIPR(2) = L^{-d_2(1)}.$$

Aplicando-se logaritmo natural de ambos os lados da igualdade, temos:

$$\ln GIPR(2) = \ln \left( \frac{1}{L^{d_2}} \right), \text{ ou tamb\u00e9m, } \ln GIPR(2) = \ln 1 - d_2 \ln L.$$

De forma geral, pode-se dizer que o segundo termo da equa\u00e7\u00e3o \u00e9 do tipo  $b - ax$  e esse tipo de fun\u00e7\u00e3o \u00e9 representado graficamente por uma reta cuja inclina\u00e7\u00e3o \u00e9 dada por  $a = d_2$ .

$$q = 3:$$

$$GIPR(3) \propto L^{-d_3(3-1)}, \text{ ou seja, } GIPR(3) = L^{-2d_3}.$$

Aplicando-se logaritmo natural de ambos os lados da igualdade, temos:

$$\ln GIPR(3) = \ln \left( \frac{1}{L^{2d_3}} \right), \text{ ou tamb\u00e9m, } \ln GIPR(3) = \ln 1 - 2d_3 \ln L.$$

Como no caso anterior, aqui ter\u00edamos uma reta cujo coeficiente angular \u00e9 determinado por  $a = 2d_3$ .

De modo geral, pode-se perceber uma rela\u00e7\u00e3o direta entre o  $GIPR$  e a dimens\u00e3o fractal do autovetor  $\psi$ , a partir do coeficiente angular da reta gerada pelo ajuste de curva do tipo  $b - ax$  da seguinte maneira: dado um valor para  $q$ , a dimens\u00e3o fractal  $d_q$  \u00e9 dada pelo coeficiente angular  $\frac{a}{(q-1)} = d_q$ .

Por fim, vale ressaltar que a dimens\u00e3o fractal \u00e9 objeto de estudo de v\u00e1rios trabalhos (EVERS; MIRLIN, 2000) (MIRLIN A. D.; EVERS, 2000) (PRIGODIN V.N.; ALTSHULER, 1998) que analisam as propriedades de transi\u00e7\u00e3o entre condut\u00e2ncia e isolamento no modelo de Anderson.

# Capítulo 3

## Caracterização dos sistemas sob potenciais caóticos

As sequências peneperiódicas têm sido utilizadas como ferramenta para simulação do potencial da equação de Schrödinger há anos. Essas sequências apresentam regra bem definida e geram resultados intermediários aos casos periódico e aleatório. Em trabalhos anteriores ([OLIVEIRA, 2012](#)), foi proposta a análise dos mapas caóticos como possível alternativa às sequências peneperiódicas. Pelos testes iniciais, pôde-se perceber que, além de uma boa alternativa, os mapas caóticos apresentavam a possibilidade de controle de desordem, por meio de ajuste do caos.

Uma análise mais profunda foi realizada ao longo deste trabalho e pôde-se perceber que as sequências caóticas apresentam, de fato, a vantagem de controle de desordem. A análise foi feita de maneira qualitativa analisando-se vários valores de  $r$ , o que permitiu-se perceber que quanto mais próximo do limite superior, mais caótico e similar ao comportamento das sequências aleatórias os mapas se tornavam; e quantitativa, utilizando-se o *IPR* e a densidade de probabilidade.

### 3.1 Espectro e autovetores

A análise qualitativa foi realizada comparando-se visualmente o espectro e a densidade de probabilidade. Para todos os casos, priorizou-se utilizar valores de parâmetro que crescessem no caos, janelas de periodicidade e também as regiões mais caóticas de cada mapa. O que pode-se perceber é que, para todos os mapas, o comportamento intermediário aos casos aleatório/periódico acontece e o controle de desordem por meio do ajuste do parâmetro  $r$  da sequência funciona bem.

### 3.1.1 Mapa logístico

O mapa logístico apresenta rota para o caos através de bifurcações. Já o retorno à zona periódica se dá abruptamente, pelas janelas de periodicidade. A partir disso, uma nova rota para o caos se inicia, novamente por bifurcações. O diagrama de bifurcação desse mapa apresenta as regiões periódica, caótica e as janelas de periodicidade.

A figura 8 apresenta um quadro com o espectro obtido do modelo *tight-binding*, para diferentes mapas logísticos.

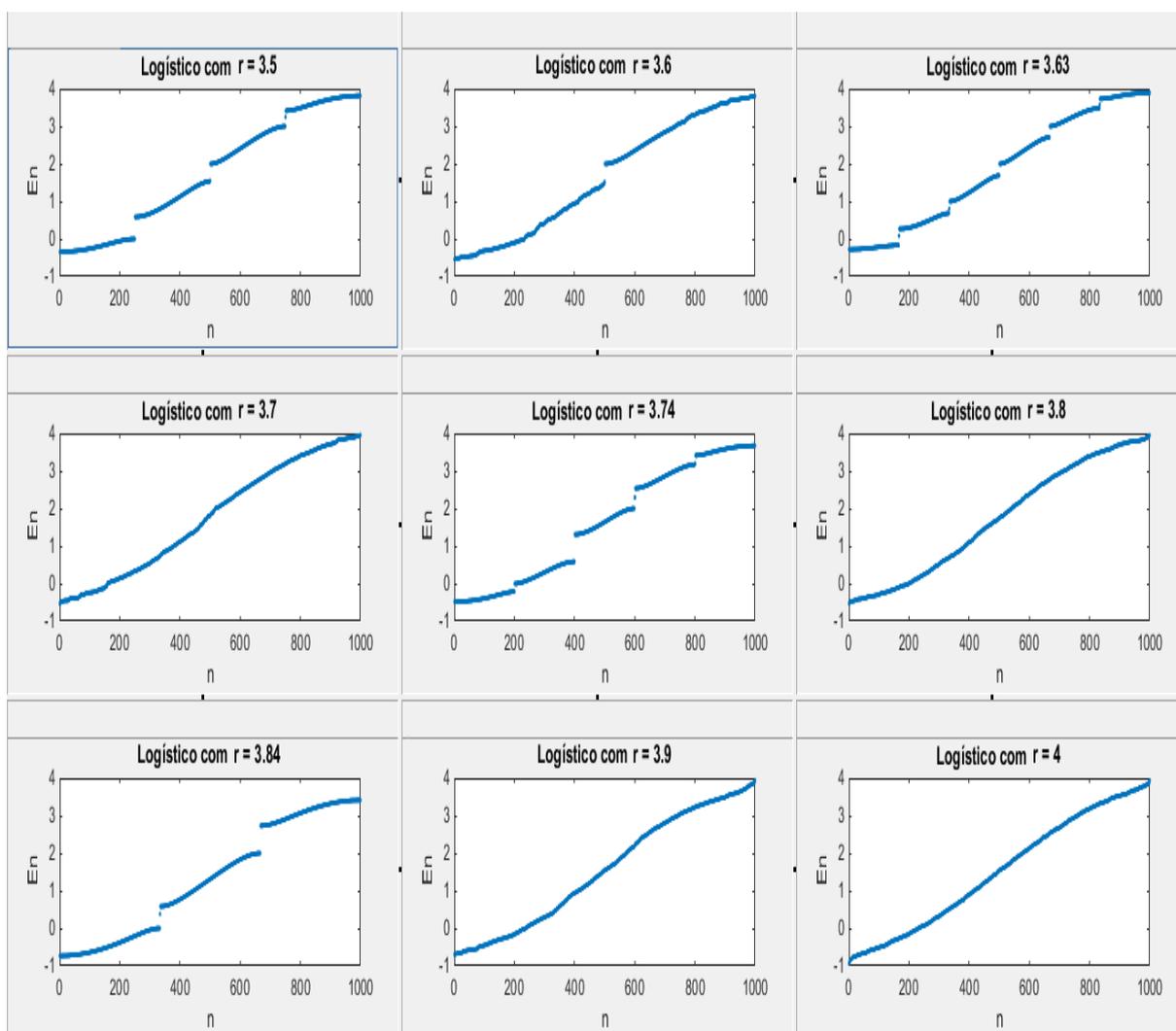


Figura 8 – Mapa logístico: espectro de energias para diferentes valores de  $r$ . O eixo  $y$  representa a energia e o eixo  $x$  representa o índice do autovetor.

Observe que a figura 8 apresenta comportamento bem definido em todas as regiões (periódica, caótica e janelas de periodicidade) do diagrama de bifurcação do mapa. Além disso, o espectro para as regiões periódicas (ou janelas de periodicidade) trazem os *gaps* de acordo com o tamanho do período da sequência.

Alguns espectros ( $r = 3.5$ ,  $r = 3.74$  e  $r = 3.84$ ) apresentam um valor de energia descontínuo dos demais (observe que existe um ponto isolado, descontínuo, no espectro). Essa descontinuidade de energia gera autovetores localizados, mesmo para mapas com comportamento estendido (como no teorema de Bloch) e já foi estudada. (BRENNER; FISHMAN, 1992).

As figuras 9 e 10 apresentam a densidade de probabilidade para o estado fundamental e estado associado ao autovetor 500 de energia do sistema, respectivamente. Pensou-se em apresentar dois diferentes níveis de energia (apesar de terem sido verificados os demais) para que fosse possível perceber que a correspondência entre os autovalores e autovetores, bem como a relação com o valor de  $r$  na sequência, independem do nível de energia utilizado.

A comparação entre estas matrizes de gráficos mostra a concordância entre espectros e (de)localização.

Para ilustrar a criação de estados localizados, observe o mapa logístico com  $r = 3.5$  nas figuras 8, 9 e 10. Pelo diagrama de bifurcação, sabe-se que esse valor de  $r$  gera um mapa com comportamento periódico, ou seja, os autoestados devem ser estendidos. Ao se analisar o espectro de energias e o estado fundamental do sistema, é possível perceber que as condições esperadas são satisfeitas. Porém, ao se verificar o autovetor 500, um estado localizado aparece e contradiz o que era desejado. Mas, pelo zoom no espectro de energia, apresentado no primeiro quadro da figura 10, é possível perceber que a energia 500 é exatamente um ponto descontínuo do espectro, que gera estados localizados mesmo para o caso periódico (e, logo, estendido).

### 3.1.2 Mapa da barraca

O mapa da barraca apresenta uma rota bem diferente para o caos: a mudança é feita abruptamente em  $r = 0.5$ . Dessa maneira, o que se tem nesse mapa é uma região periódica (anterior a  $r = 0.5$ ) e uma região que se torna mais caótica na medida em que  $r$  aumenta. Não existem janelas de periodicidade, como no caso anterior. A figura 11 apresenta um quadro contendo espectros obtidos no modelo *tight-binding*, para diferentes valores de parâmetro do mapa.

Observe que para valores de  $r = 0.4$  e  $r = 0.5$ , o espectro é contínuo e sem a presença de *gaps*. Isso acontece porque o período da sequência gerada é igual a 1, o que não gera nenhum *gap* de energia. Os demais gráficos do quadro estão em zona caótica. Para  $r = 0.6$  e  $r = 0.7$ , um pequeno *gap* é formado e, aparentemente, vai se fechando até chegar ao espectro similar ao caso aleatório.

De fato, é possível perceber que quando se estabelece uma variação suficientemente pequena para o parâmetro  $r$  e gera-se a curva espectral desse sistema, a faixa

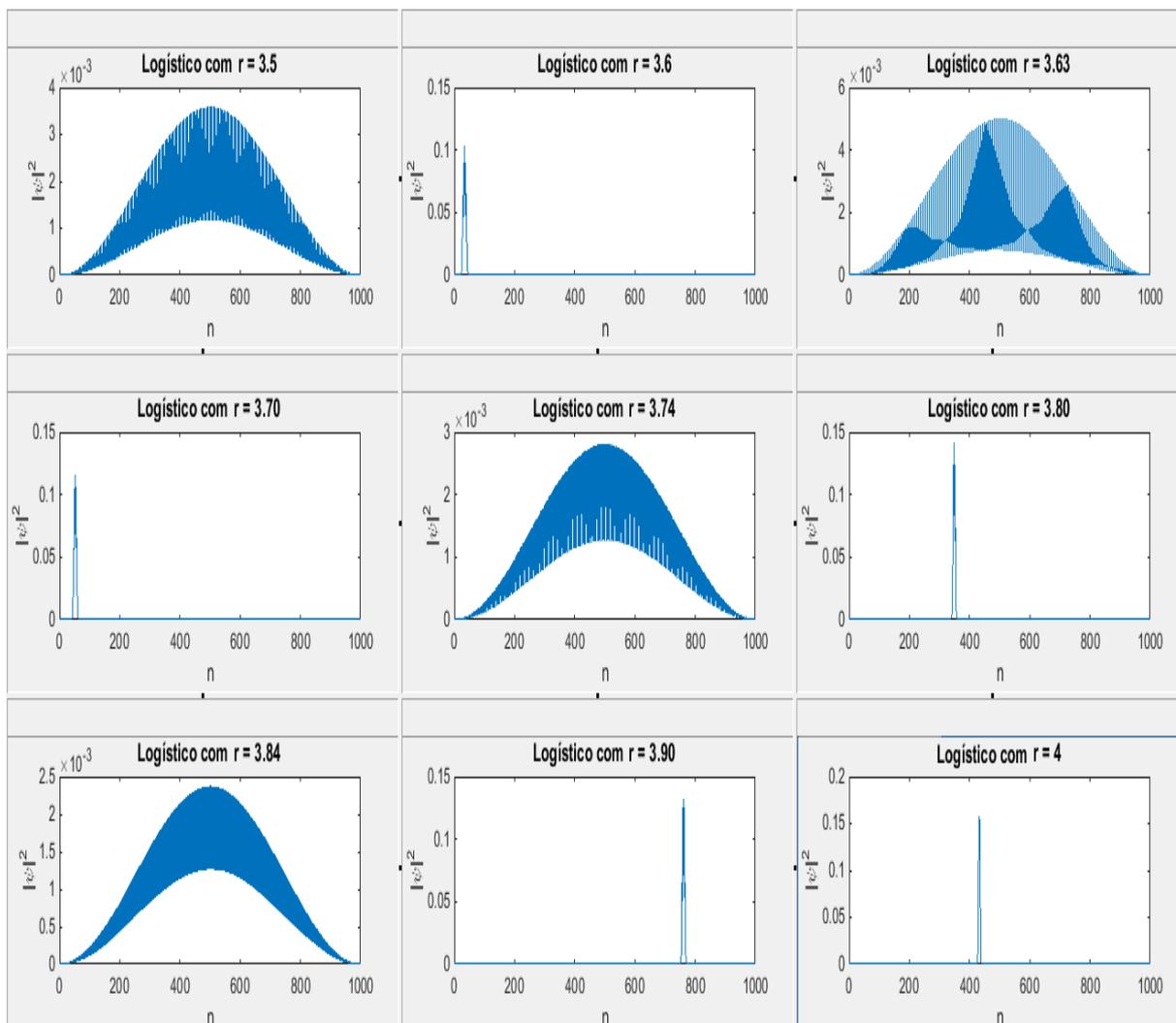


Figura 9 – Mapa logístico: decaimento de  $|\psi|^2$  para o estado mais baixo de energia e para diferentes valores de  $r$ . O eixo  $y$  representa a densidade de probabilidade e o eixo  $x$  representa a posição do vetor na rede.

proibida de energia vai diminuindo até que desapareça, dando a impressão de continuidade na energia. Para verificar tal fato, construiu-se um pequeno vídeo em formato ".avi" com variação bem pequena em  $r$ , pois graficamente seria inviável verificar todos os níveis de energia. Com essa ferramenta de análise, foi possível perceber que para o caso da barraca, na medida em que  $r$  cresce, a zona proibida de energia diminui e isso se segue até que aconteça uma junção entre as bandas de energia.

Acredita-se que a existência dessa faixa proibida de energia para regiões caóticas bem próximos ao  $r = 0.5$  é devido a sua caoticidade ser muito pequena, pois os valores de pontos fixos que  $w_{n+1}$  pode assumir, segundo o diagrama de bifurcação, é bem limitada.

As figuras 12 e 13 apresentam a densidade de probabilidade do estado funda-

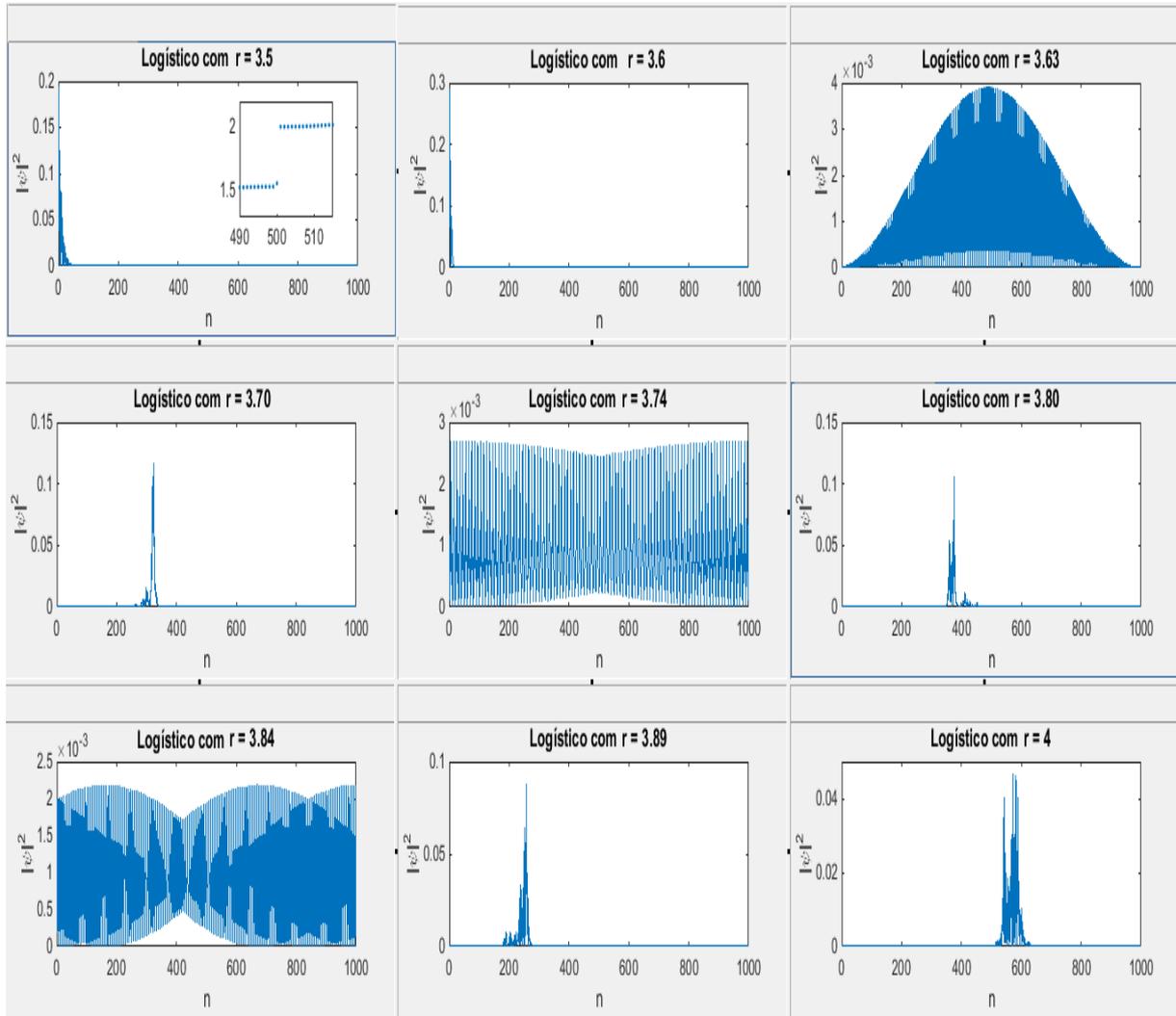


Figura 10 – Mapa logístico: decaimento de  $|\psi|^2$  para o estado 500 de energia e para diferentes valores de  $r$ . Observe que para  $r = 3.5$  o comportamento localizado é justificado exibindo-se um *zoom* no espectro de energia.

mental e energia 500 do sistema, respectivamente.

É possível perceber que a correspondência entre as regiões periódica e caótica é satisfeita. Os primeiros mapas apresentam autovetores bem espalhados, cobrindo toda a extensão  $n$  da rede, enquanto os demais casos (caóticos) apresentam a partícula bem confinada. Novamente, pensou-se em apresentar dois níveis diferentes de energia para garantir que não houvesse dúvidas quanto a classificação independentemente do autovetor escolhido. Todos os autovetores e outros valores de  $r$  foram testados e observou-se que a classificação independe do autovetor.

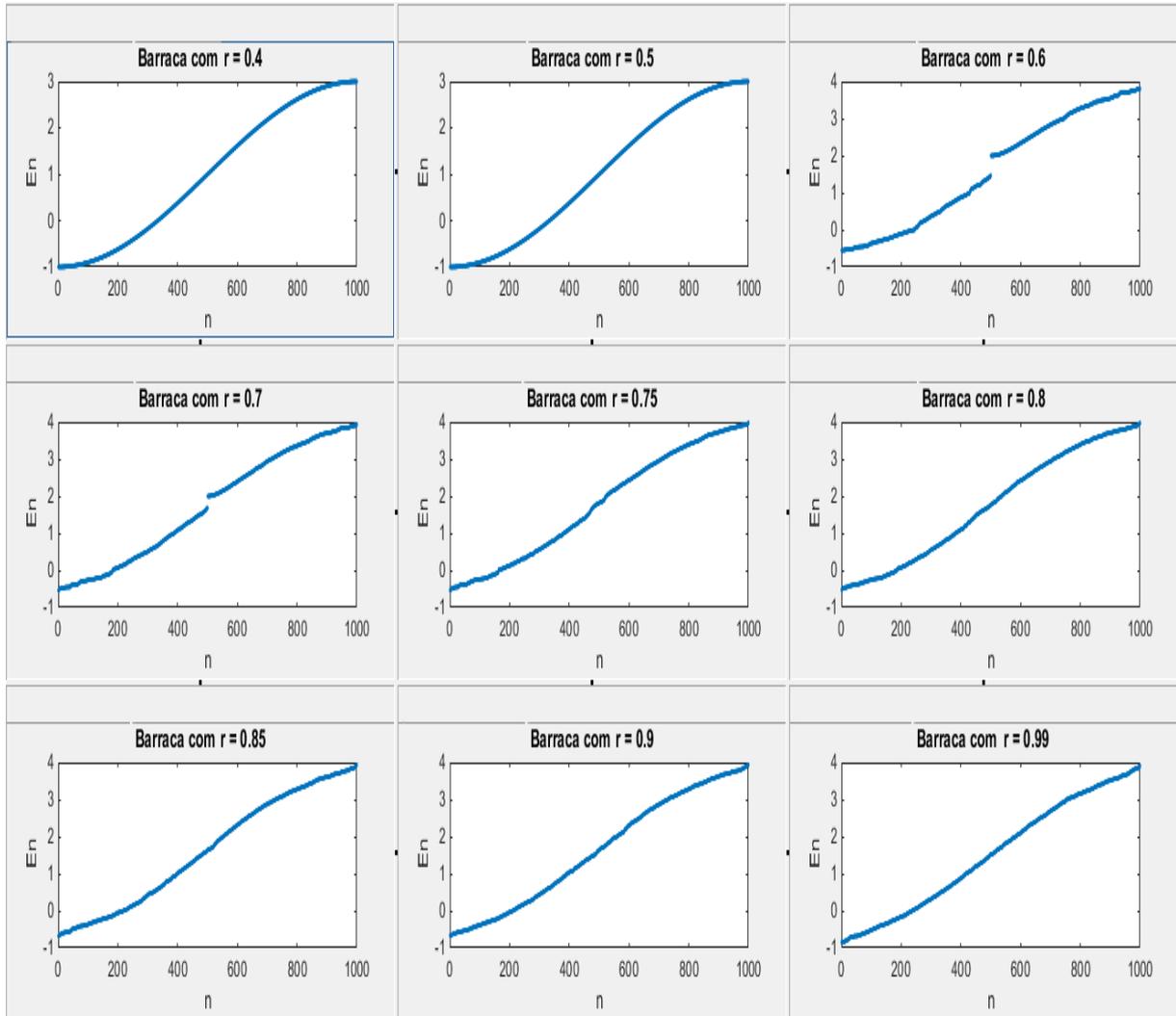


Figura 11 – Mapa da barraca: espectro de energias para diferentes valores de  $r$ .

### 3.1.3 Mapa Gaussiano

O mapa gaussiano também apresenta rota para o caos através de bifurcações. Porém, diferentemente do caso logístico, o mapa retorna para a região periódica por meio de unificações. Para esse mapa, a presença de regiões caóticas depende do parâmetro  $b$ , fixado neste trabalho em  $b = 7.5$ , para garantir a existência de caos. A figura 14 mostra o espectro de energias para diferentes valores de  $r$ .

Observe que à medida em que  $r$  varia, é possível ver a unificação das bandas de energia e, em seguida, o surgimento de dois *gaps*. Comparado com o diagrama de bifurcações do mapa, é possível perceber que a região em que apenas um *gap* é apresentado é composta por dois estados fixos para  $w_{n+1}$ . Já o gráfico para  $r = -0.65$  apresenta quatro valores e é uma janela de periodicidade. O quadro finaliza com  $r$  periódico novamente, característica que o mapa apresenta e o distingue do caso logístico.

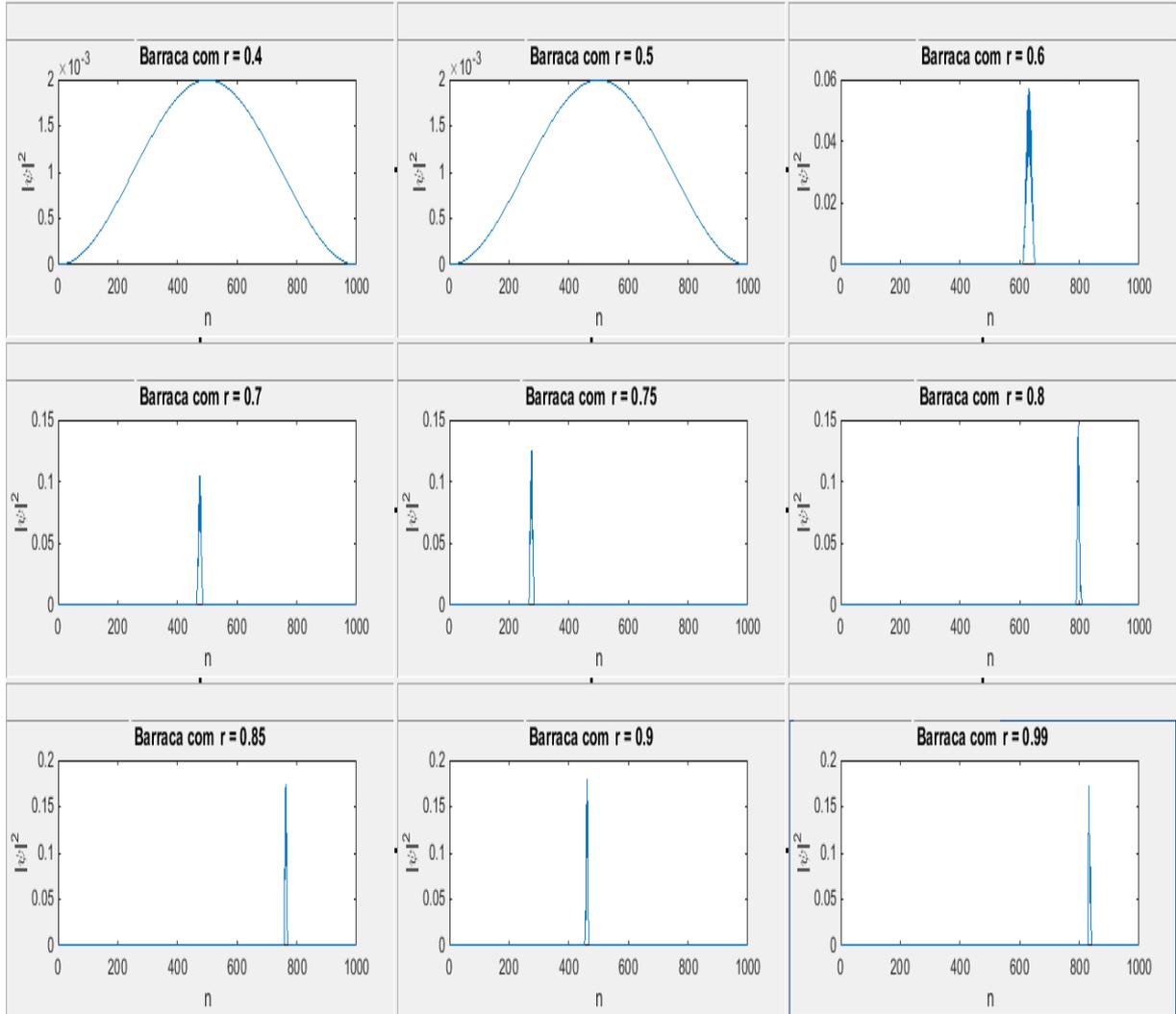


Figura 12 – Mapa da barraca: decaimento de  $|\psi|^2$  para o estado mais baixo de energia e para diferentes valores de  $r$ .

As figuras 15 e 16 apresentam os quadros de autovetores dos níveis 1 e 500 de energia, respectivamente.

Observe que, ao se comparar as figuras 14, 15 e 16, a correspondência entre os casos periódico, caótico e as janelas de periodicidade é bem caracterizada. Além disso, observe que para os casos em regiões caóticas, o estado fundamental está sempre mais localizado do que o estado do meio do espectro. Isso está de acordo com a teoria de que o meio do espectro é menos localizado do que os extremos (IZRAILEV et al., 1998).

### 3.2 IPR e o decaimento de $|\psi|^2$

Apesar de utilizar-se do IPR como análise quantitativa para classificação de curvas, achou-se prudente relacioná-lo com a densidade de probabilidade  $|\psi|^2$  devido a

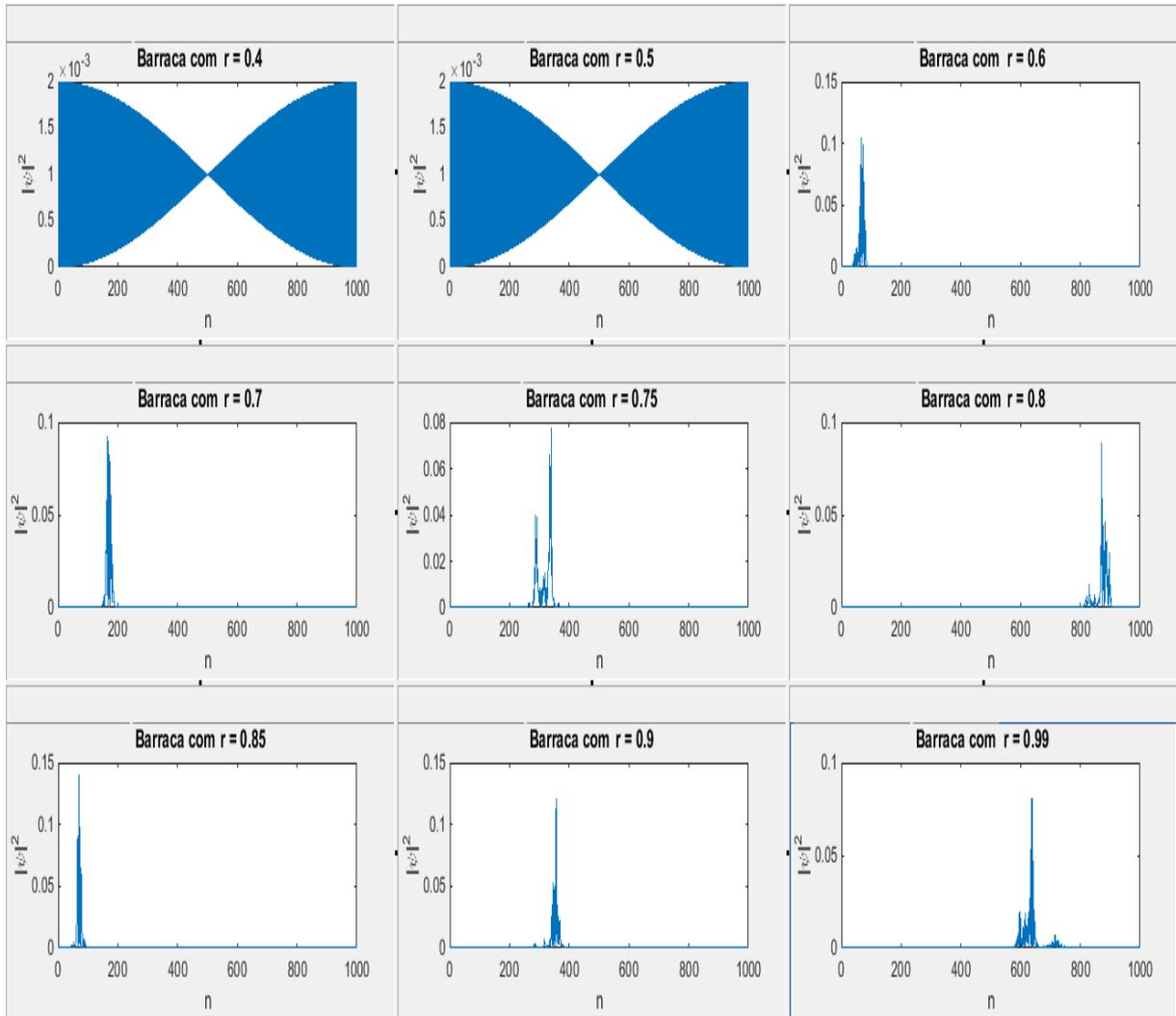


Figura 13 – Mapa da barraca: decaimento de  $|\psi|^2$  para o estado 500 de energia e para diferentes valores de  $r$ .

sua extensa utilização na literatura. O que pôde-se perceber é que ambas as medidas deixam claro sua competência quanto à classificação e ajuste do parâmetro  $r$  para aproximar os resultados dos extremos aleatório e periódico.

É importante relembrar que, como mostrado no capítulo 2, o  $IPR$  se estabiliza em uma constante  $k$  positiva para o caso aleatório e tende a zero para o extremo periódico (MONTHUS; GAREL, 2010).

Além disso, pretendeu-se verificar se quanto mais alto o valor  $k$  de estabilização do  $IPR$ , mais localizado se daria o estado. Para tanto, gerou-se figuras que relacionam o  $IPR$  de todos os níveis de energia do sistema, com o decaimento de  $|\psi|^2$  para energias específicas, de acordo com o valor de estabilização.

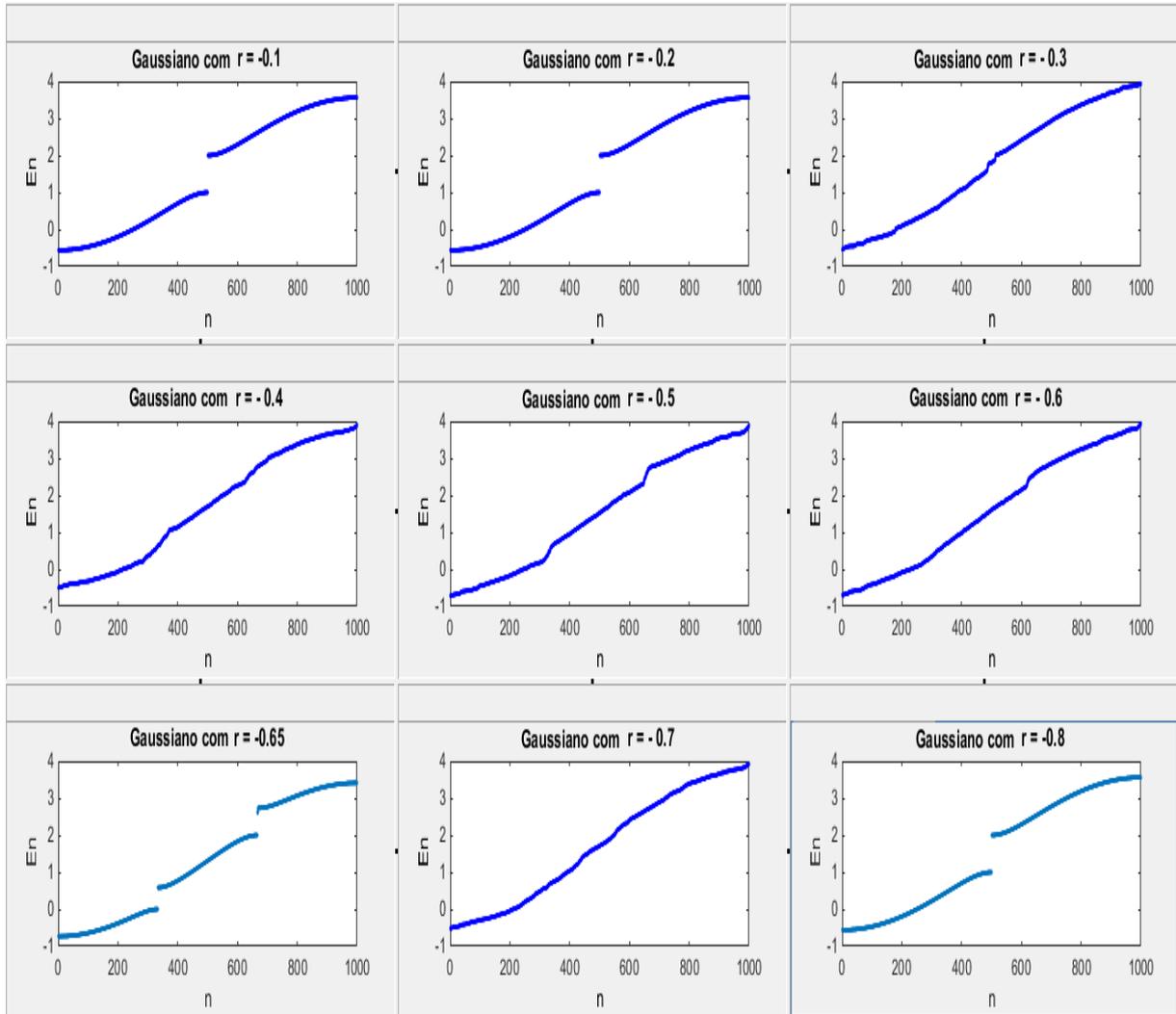


Figura 14 – Mapa gaussiano: espectro de energias para diferentes valores de  $r$ .

### 3.2.1 Mapa logístico

As figuras 17 e 18 apresentam o  $IPR(n)$  para todos os níveis de energia para dois diferentes valores de  $r$  do mapa logístico: um que gere mapas mais caóticos possíveis ( $r = 4$ ) e outro que seja um estado intermediário ( $r = 3.80$ ). Observe que apesar de terem o mesmo comportamento, as curvas estão em faixas diferentes de  $IPR$ .

Ao se observar a figura 17, é possível perceber que os valores de energia escolhidos para se analisar o decaimento de  $|\psi|^2$ , destacados nos quadros da parte (a) da figura apresentam valores de  $IPR$  bem diferentes. Apesar de todos os  $IPR$ 's serem positivos e todos os estados localizados,  $|\psi_{201}|^2$  é mais localizado. Em contrapartida,  $|\psi_{702}|^2$ , que apresenta o valor de  $IPR$  mais baixo, é menos localizado.

A figura 18 apresenta a curva de  $IPR$  com valores mais altos do que as apresentadas na figura 17. Os quadros destacados na região (a) da figura mostram que, mesmo

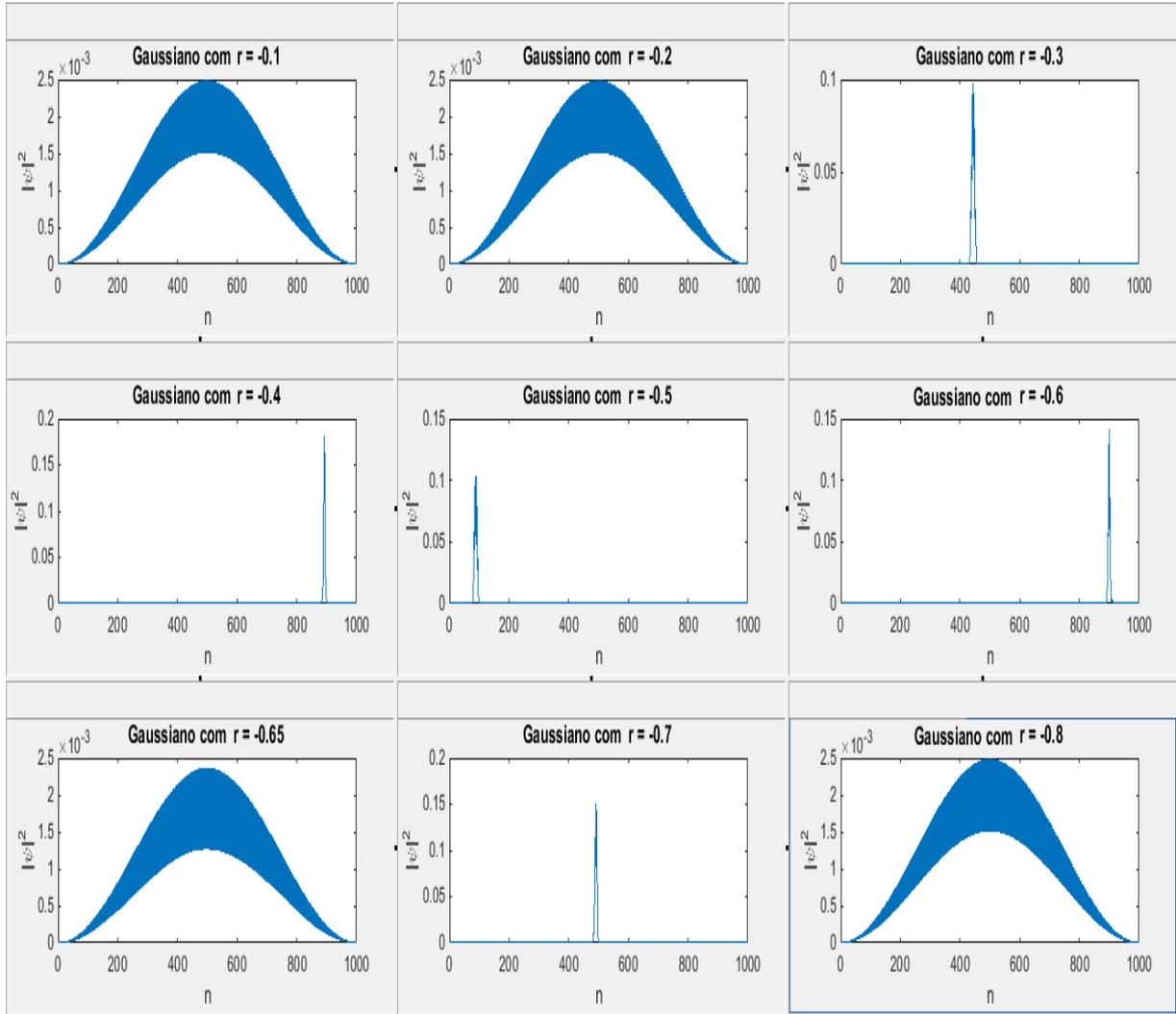


Figura 15 – Mapa gaussiano: decaimento de  $|\psi|^2$  para o estado mais baixo de energia e para diferentes valores de  $r$ .

que o estado localizado aconteça para todos os níveis de energia, o valor de  $IPR$  mais alto (na energia 101) mostra um estado mais localizado, enquanto o  $IPR$  de valor mais baixo (na energia 510) mostra um estado menos localizado.

### 3.2.2 Mapa da barraca

As figuras 19 e 20 apresentam os resultados para o mapa da barraca com  $r = 0.7$  e  $r = 0.99$ , respectivamente. Para ambos os casos, a parte (a) da figura mostra o  $IPR$  para todos os níveis de energia e a parte (b) apresenta o decaimento de  $|\psi|^2$  para valores específicos, escolhidos de acordo com o valor de estabilização  $k$  do  $IPR$ .

Ao se analisar a parte (a) da figura 19, percebe-se que em aproximadamente  $n = 500$  há uma queda brusca no valor do  $IPR$ , dando a sensação de que o valor tende a zero e depois volta a subir e se estabilizar numa constante  $k$ . Ao se analisar os  $|\psi|^2$

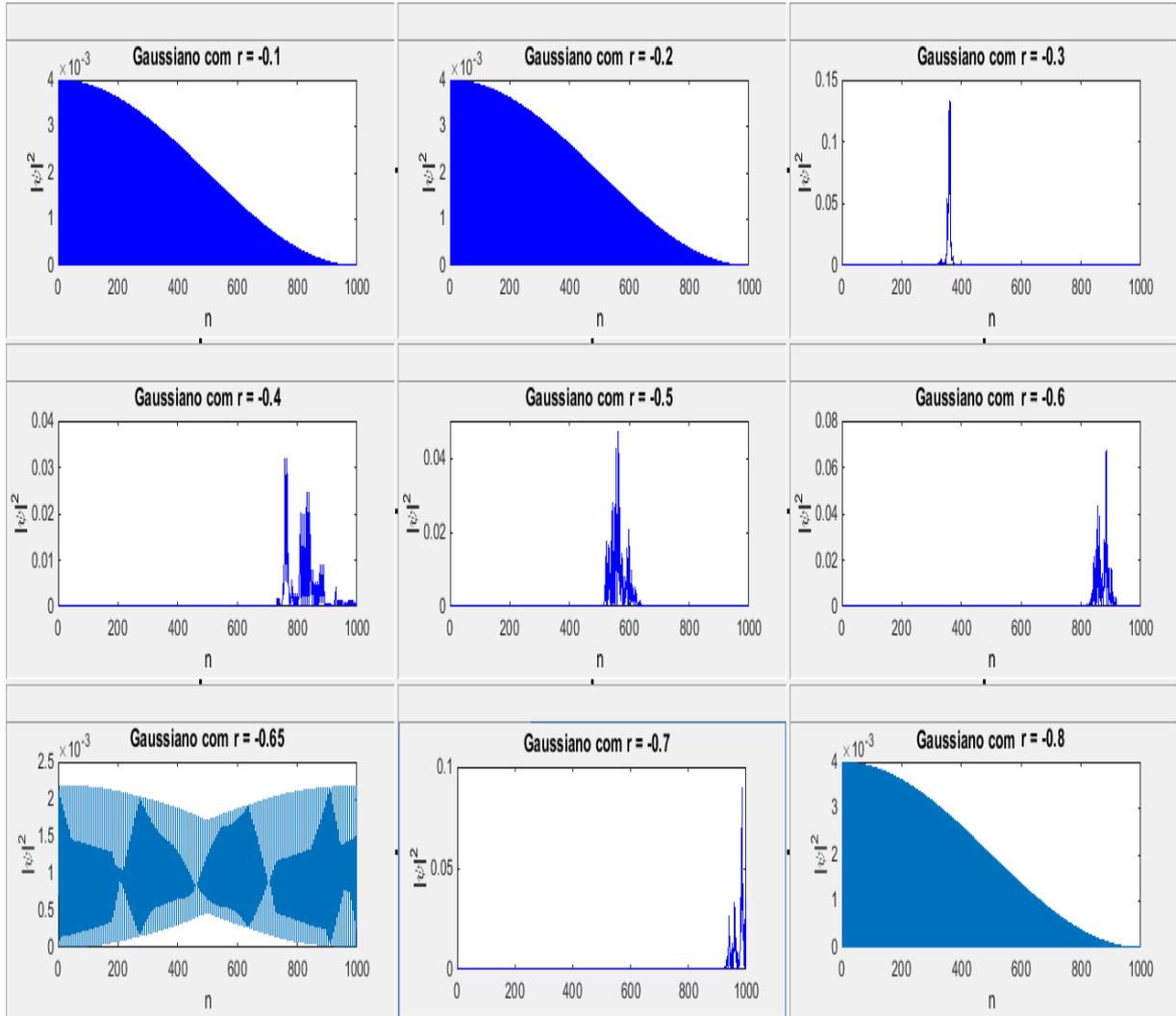


Figura 16 – Mapa gaussiano: decaimento de  $|\psi|^2$  para o estado 500 de energia e para diferentes valores de  $r$ .

dessa região, percebe-se que  $|\psi_{504}|^2$  apresenta comportamento estendido (apesar da baixa probabilidade da partícula ser encontrada nas regiões azuis da figura).

Este comportamento atípico pode indicar a existência de uma fronteira de mobilidade (IZRAILEV; KROKHIN, 1999), um nível de energia específico que separa uma região de estados localizados de uma região de estados delocalizados. A existência de fronteiras de mobilidade está relacionada com a capacidade de correlação de algum alcance da sequência, que de maneira muito superficial, pode ser definida como a capacidade que a sequência têm de memória dos seus elementos anteriores; além da dimensão em que se está trabalhando. Mais estudos sobre as fronteiras de mobilidade e sua relação com os mapas caóticos aparecem na seção 3.3 e estão propostos nos trabalhos futuros.

Para o caso  $r = 0.99$  do mapa da barraca, podemos perceber que o comporta-

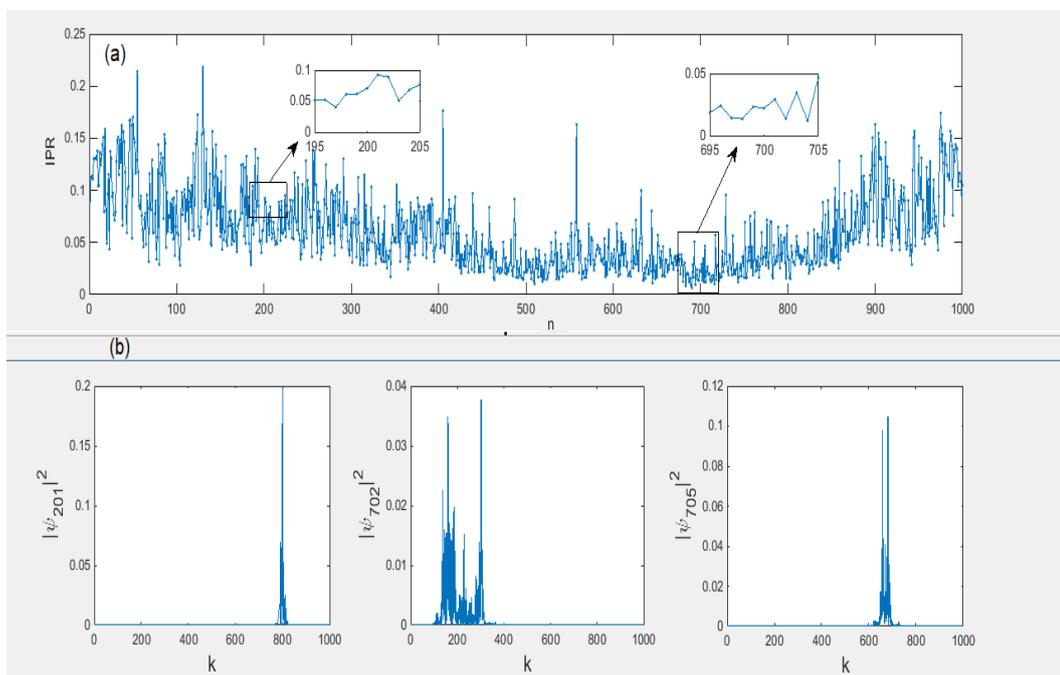


Figura 17 – Mapa logístico: (a)  $IPR(n)$  para todos os níveis de energia com  $r = 3.80$ . Destacadas duas regiões que apresentam o valor do  $IPR$  utilizados na parte b. (b) Decaimento de  $|\psi|^2$  para os estados 201, 702 e 705 de energia.

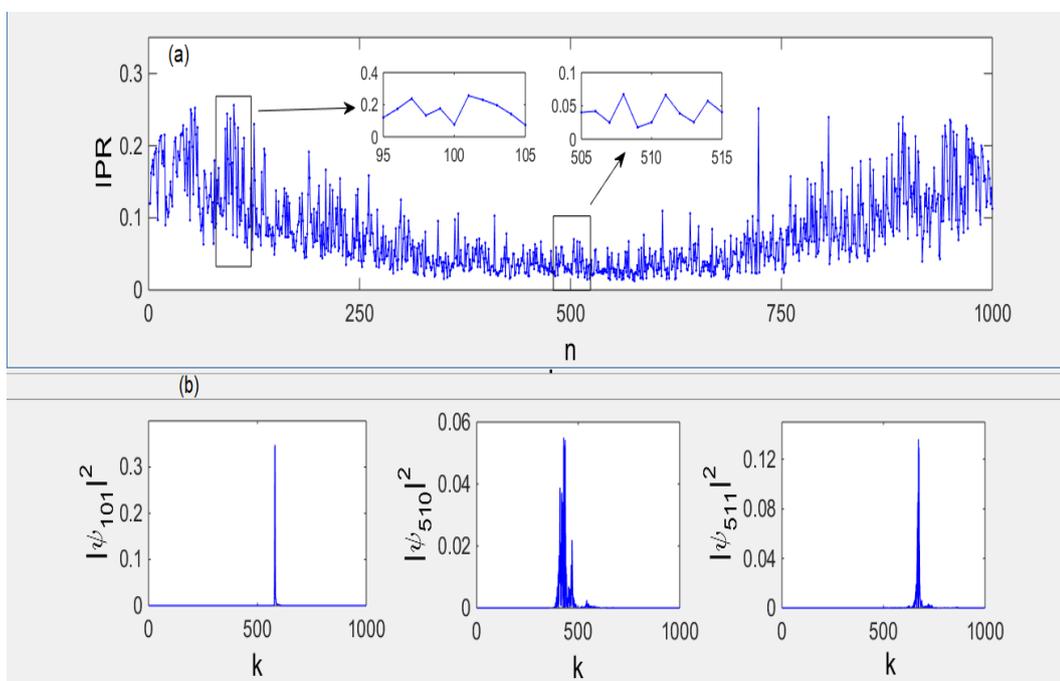


Figura 18 – Mapa logístico: (a)  $IPR(n)$  para todos os níveis de energia com  $r = 4$ . Destacadas duas regiões que apresentam o valor do  $IPR$  utilizados na parte b. (b) Decaimento de  $|\psi|^2$  para os estados 101, 510 e 511 de energia.

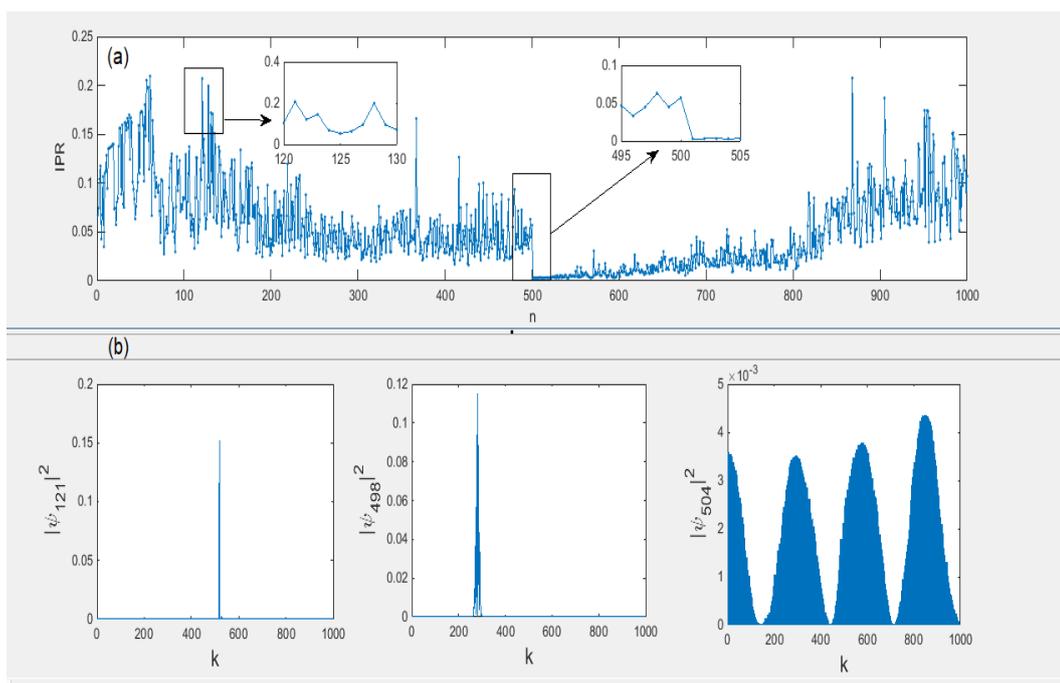


Figura 19 – Mapa da barraca: (a)  $IPR(n)$  para todos os níveis de energia para o mapa da barraca com  $r = 0.7$ . Destacadas duas regiões que apresentam o valor do  $IPR$  utilizados na parte b. (b) Decaimento de  $|\psi|^2$  para os estados 121, 498 e 504 de energia.

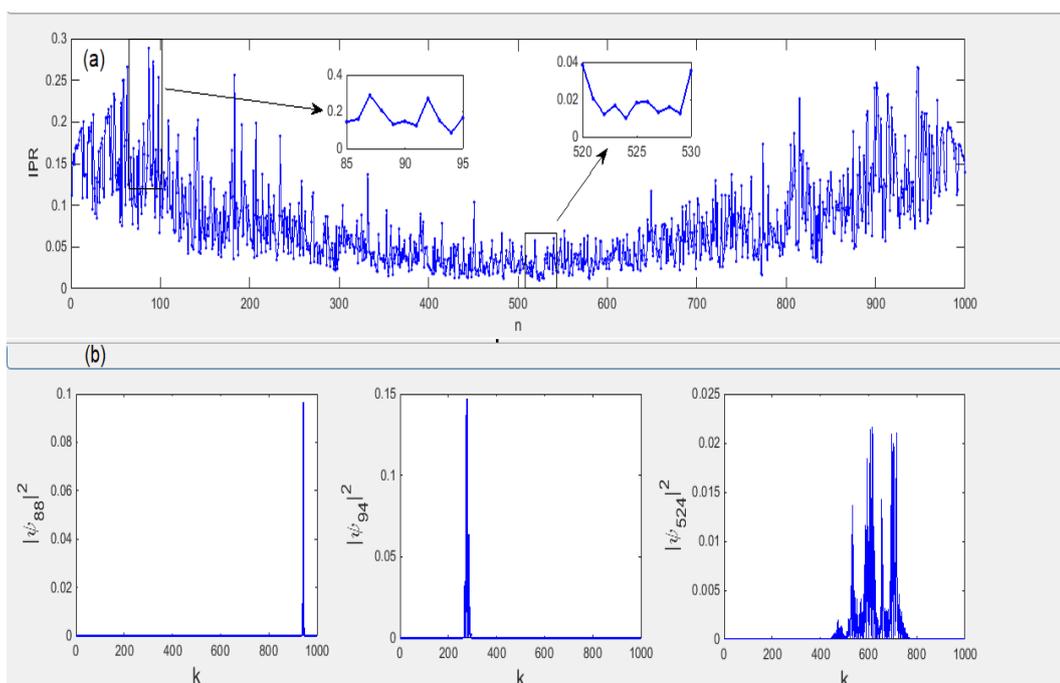


Figura 20 – Mapa da barraca: (a)  $IPR(n)$  para todos os níveis de energia com  $r = 0.99$ . Destacadas duas regiões que apresentam o valor do  $IPR$  utilizados na parte b. (b) Decaimento de  $|\psi|^2$  para os estados 88, 94 e 524 de energia.

mento dos decaimentos de  $|\psi_{88}|^2$  seguem o esperado: mais localizado para  $IPR$  com valor assintótico em  $k$  maiores e menos localizados para  $k$  menores ( $|\psi_{524}|^2$ ).

### 3.2.3 Mapa gaussiano

O mapa gaussiano apresenta algumas diferenças com relação aos mapas anteriores. Por se tratar de um mapa que caminha para o caos por bifurcações e retorna para o periódico por unificações, é difícil estabelecer dentro das regiões caóticas aquela que apresenta maior caoticidade que as demais. Assim, para esse mapa, acredita-se que apresentar mais que um valor de  $r$  caótico para comparar regiões mais ou menos caóticas perde o sentido.

Dessa maneira, a figura 21 apresenta os  $IPR$ 's de todos os autoestados na parte (a) e destaca três valores de energia para a parte (b).

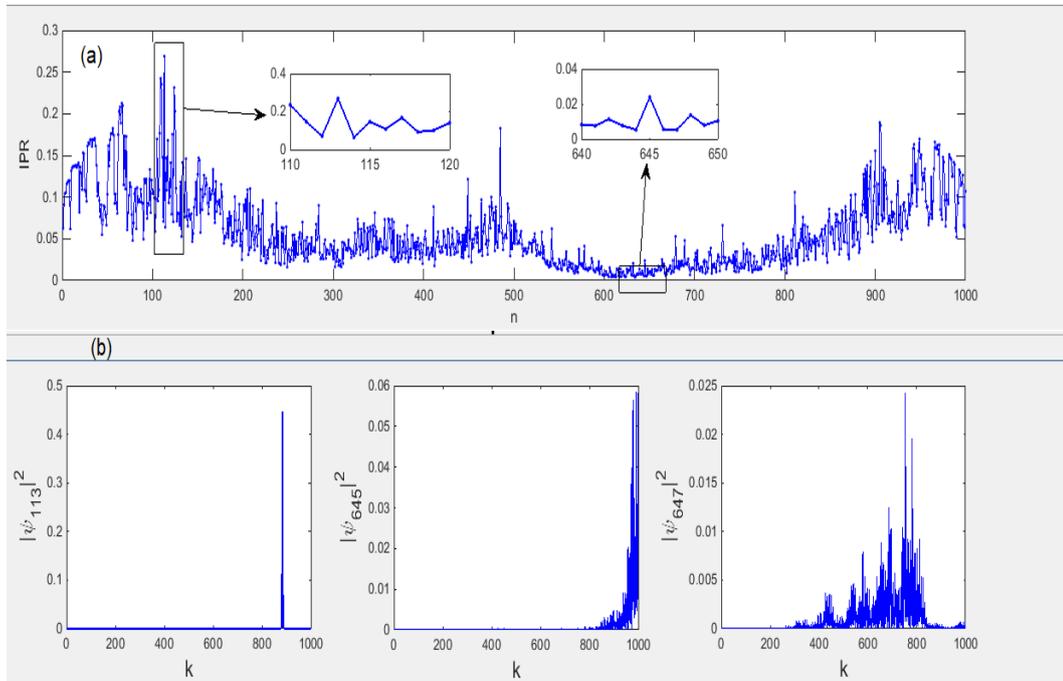


Figura 21 – Mapa gaussiano: (a)  $IPR(n)$  para todos os níveis de energia com  $r = -0.3$ . Destacadas duas regiões que apresentam o valor do  $IPR$  utilizados na parte b. (b) Decaimento de  $|\psi|^2$  para os estados 113, 645 e 647 de energia.

Analisando a figura 21, é possível perceber que para o valor de  $IPR$  mais baixo, a densidade de probabilidade  $|\psi_{647}|^2$  apresenta uma larga região com probabilidade apreciável de se encontrar a partícula. Ainda assim, a região é uma região finita de confinamento, logo, este mapa não apresenta regiões de fronteira de mobilidade para  $r = -0.3$ .

Uma outra proposta de caracterização dos mapas partiria do expoente de Lyapunov dos autovetores ( $Lya$ ). Basicamente, o  $Lya$  calcula o inverso do comprimento

de localização (IZRAILEV; KROKHIN, 1999). Apesar de os casos com parâmetro  $r$  que geram mapas periódicos funcionarem bem, não conseguiu-se estabelecer compreensão suficiente para os casos em que o mapa tem comportamento caótico. Assim, optou-se por suprimir os resultados do capítulo e sugerir melhor compreensão e sistematização do *Lya* nos trabalhos futuros.

Por fim, após as análises qualitativa e quantitativa, a correspondência entre a densidade de probabilidade  $|\psi|^2$  para o estado fundamental de energia e o meio do espectro, a relação entre o *IPR* e a densidade de probabilidade de alguns valores escolhidos de energia, pode-se afirmar que os mapas caóticos apresentam vantagens com relação às sequências peneperiódicas, pois o controle da desordem por meio do ajuste dos parâmetros de criação dos mapas pode possibilitar que os mapas sejam adaptados a diferentes problemas físicos ou de acordo com o interesse do pesquisador.

### 3.3 O *IPR* e as fronteiras de mobilidade

O comportamento atípico apresentado na figura 19 para o autoestado de energia 504 pode ser entendido como uma fronteira de mobilidade. Retomando essa discussão, verificou-se que existem situações análogas nos mapas logístico, barraca com outros valores de  $r$  e gaussiano.

Percebeu-se que, quando se considera valores de  $r$  para os mapas caóticos em que as regiões caóticas se dividem em duas ou mais faixas de caos, é constatada essa queda abrupta para o *IPR* e são encontrados estados delocalizados em zonas caóticas, o que aparenta ser uma fronteira de mobilidade.

Observe que a presença ou não dessas fronteiras de mobilidade está relacionada com a quantidade de faixas de caos.

As figuras 22 e 23 apresentam valores de  $r$  que representam faixas de caoticidade em 4 e 2 regiões, respectivamente.

Observe que o número de fronteiras de mobilidade está relacionado com esse número de faixas e que, para ambos os casos, as regiões com comportamento estendido apresentam uma queda abrupta no *IPR* daqueles autovetores.

A figura 22 traz a densidade de probabilidade de quatro níveis distintos de energia. Observe que são três situações em que o estado deixa de ser localizado e passa a ser estendido.

Já a figura 23 ilustra bem como a fronteira de mobilidade age de forma abrupta: do estado 500 para o estado 501, a densidade de probabilidade deixa de ser localizada e passa para o estendida. O retorno para o estado localizado acontece de forma suave.

O mapa da barraca já havia sido comentado na seção anterior, porém, para

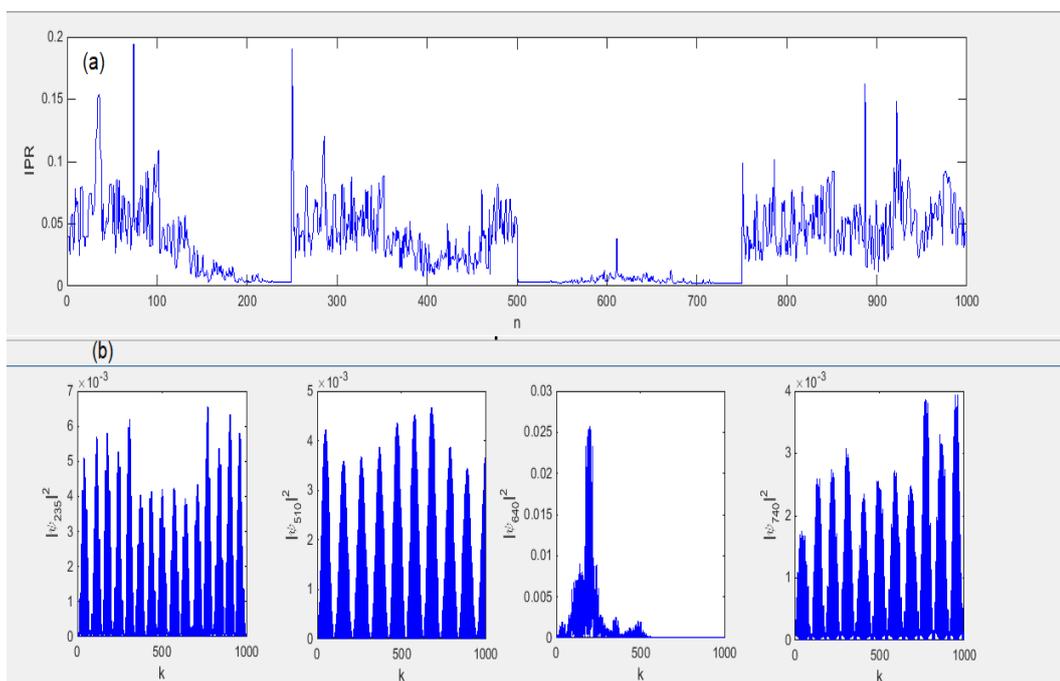


Figura 22 – Mapa logístico: (a)  $IPR(n)$  para todos os níveis de energia com  $r = 3.58$ . (b) Decaimento de  $|\psi|^2$  para os estados 235, 510, 640 e 740 de energia.

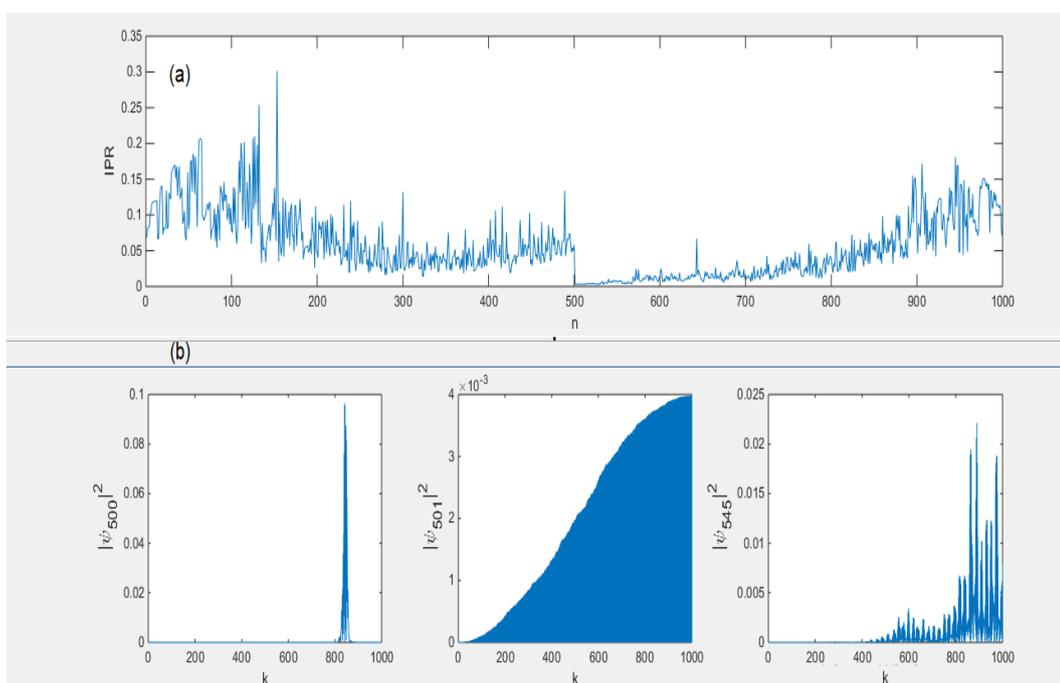


Figura 23 – Mapa logístico: (a)  $IPR(n)$  para todos os níveis de energia com  $r = 3.67$ . (b) Decaimento de  $|\psi|^2$  para os estados 500, 501 e 545 de energia.

ilustrar o fato de que toda a extensão do diagrama de bifurcação que apresenta mais de uma faixa de caoticidade apresenta as fronteiras de mobilidade, a figura 24 mostra o mapa da barraca com  $r = 0.6$ , onde também é possível identificar uma mudança abrupta do estado localizado para o delocalizado.

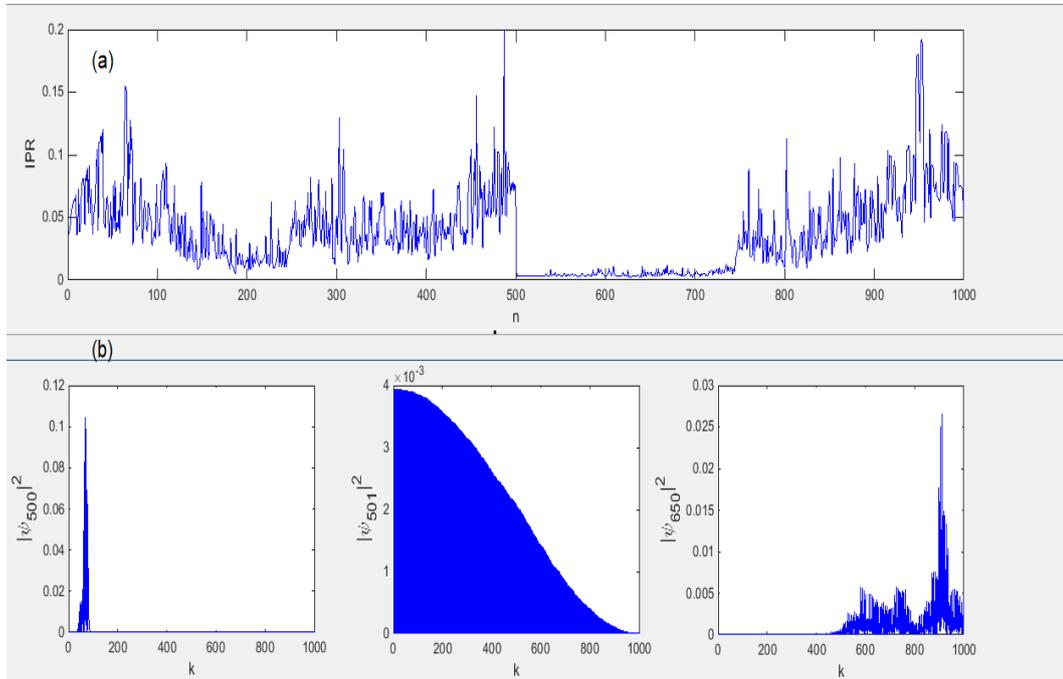


Figura 24 – Mapa da barraca: (a)  $IPR(n)$  para todos os níveis de energia para o mapa da barraca com  $r = 0.6$ . (b) Decaimento de  $|\psi|^2$  para os estados 500, 501 e 650 de energia.

Por fim, para o mapa gaussiano, considerou-se  $r = -0.76$ , onde os pontos se dividem em duas faixas de caoticidade. Para este caso, pode-se perceber a presença de uma fronteira de mobilidade e a figura 25 ilustra tal situação.

Pode-se concluir então que, aparentemente, as fronteiras de mobilidade têm se apresentado para todos os mapas caóticos em valores de  $r$  em que duas ou mais faixas de caoticidade aparecem nos mapas de bifurcação. Além disso, o  $IPR$  mostra-se sensível a essas fronteiras de mobilidade, o que pode ser uma boa característica para esse medidor de desordem. Essas fronteiras geralmente estão relacionadas com correlação de curto ou longo alcance das sequências (IZRAILEV; KROKHIN, 1999) e, por esse motivo, propõe-se uma investigação mais detalhada nos trabalhos futuros.

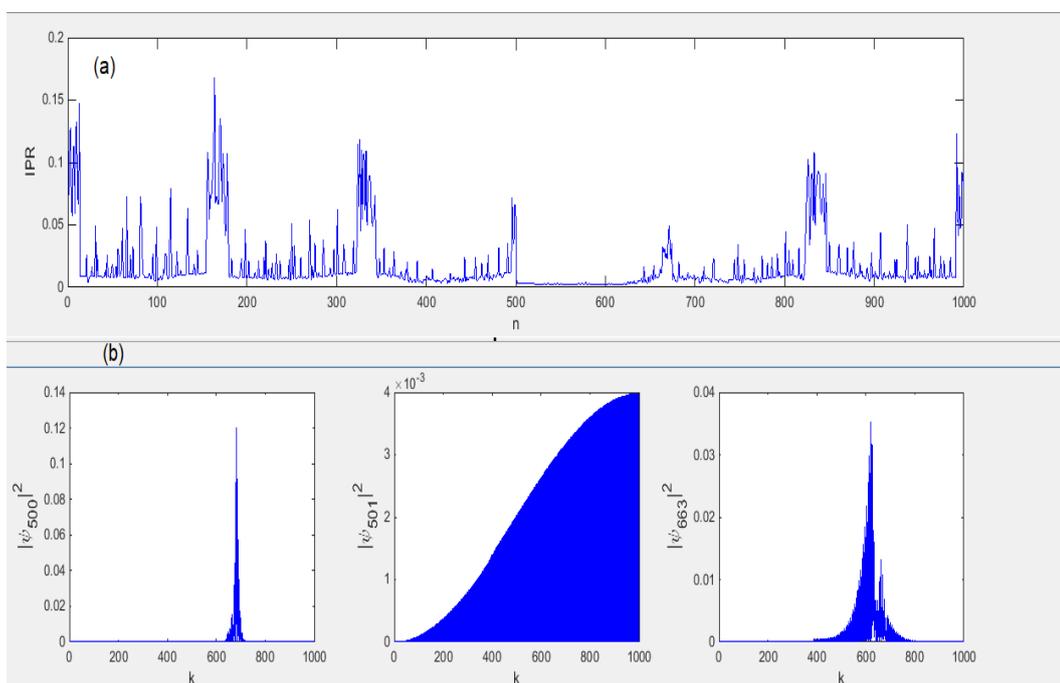


Figura 25 – Mapa gaussiano: (a)  $IPR(n)$  para todos os níveis de energia com  $r = -0.76$ .  
 (b) Decaimento de  $|\psi|^2$  para os estados 500, 501 e 663 de energia.

## Capítulo 4

# *IPR* e o expoente de Lyapunov dos mapas caóticos

Como já foi dito, o expoente de Lyapunov  $L_y$  é um consagrado medidor de caoticidade na teoria do caos. Sabe-se (HILBORN, 2000) que ele apresenta valores negativos para regiões onde não há caoticidade (zonas periódicas do mapa) e apresenta-se positivo para regiões caóticas.

Como a proposta do trabalho era de se utilizar o *IPR* como um medidor de desordem para os potenciais caóticos, pensou-se então em tentar estabelecer uma correlação entre o *IPR* dos potenciais e o  $L_y$  do mapa, pois essa conjectura poderia contribuir positivamente para o fortalecimento da ideia de que o *IPR* é um bom indicador de desordem do sistema, em alternativa à densidade de probabilidade  $|\psi|^2$ . Além disso, havia de se considerar que o *IPR* dos sistemas são calculados com sequências binárias e o  $L_y$  calculado na sequência original, eliminando-se os transientes. Se uma correlação fosse estabelecida, mesmo com essa diferença de cálculo, a ligação entre a caoticidade do mapa e a desordem do sistema por meio do controle de parâmetro  $r$  seria fortalecida.

A análise foi feita variando-se os valores de parâmetro dos mapas caóticos e calculando-se o  $IPR(r)$  e o  $L_y$ . É importante ressaltar que o  $IPR(r)$  é calculado tirando-se o valor assintótico do estado fundamental para  $N = 1000$  de cada valor de  $r$ . Observou-se que ambos os medidores comportam-se de forma similar e correspondente, respeitando-se as regiões periódicas, caóticas e as janelas de periodicidade de cada mapa, ou seja, onde o  $L_y$  apresenta-se negativo, o  $IPR(r)$  tende a zero e onde o  $L_y$  apresenta-se positivo, o  $IPR(r)$  estabiliza-se em uma constante positiva.

As figuras 26, 27 e 28 apresentam recortes dos mapas de bifurcações (já apresentados no capítulo 2) e as curvas de  $IPR(r)$  e  $L_y$  para os mapas logístico, da barraca e gaussiano, respectivamente.

Para todos os casos, foram considerados sistemas de tamanho  $N = 1000$ . Para o

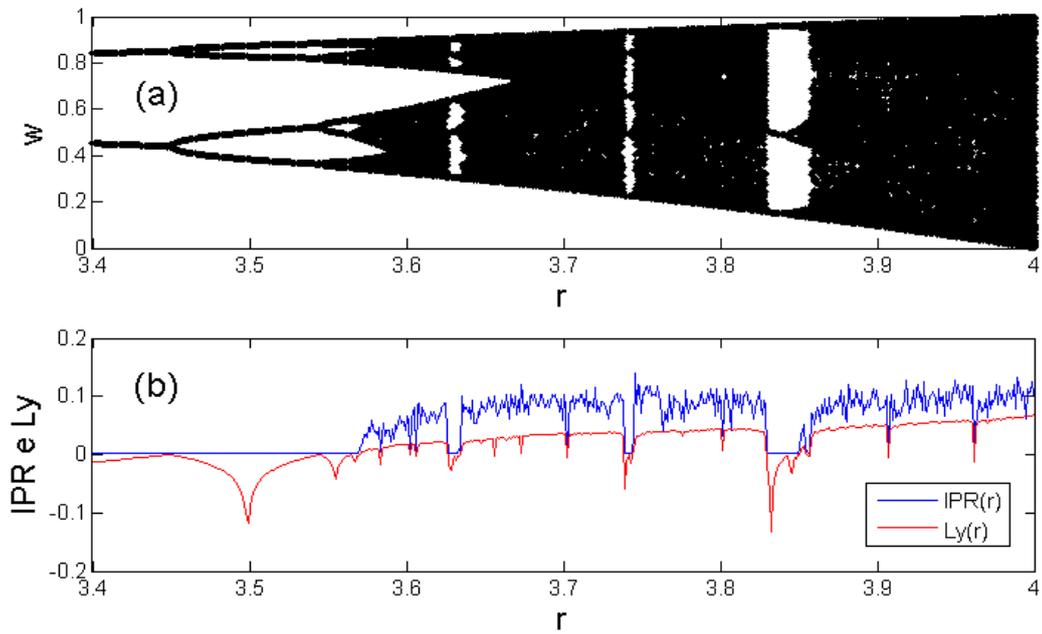


Figura 26 – Mapa logístico: (a) Recorte do mapa de bifurcações. (b)  $IPR(r)$  e  $Ly$  para diferentes valores de  $r$  do mapa.

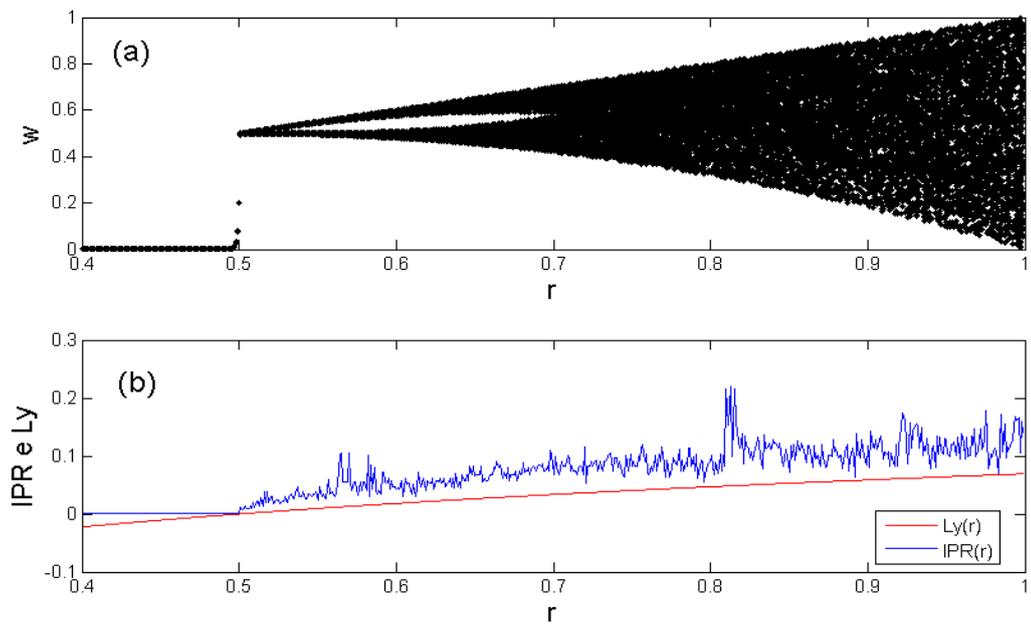


Figura 27 – Mapa da barraca: (a) Recorte do mapa de bifurcações. (b)  $IPR(r)$  e  $Ly$  para diferentes valores de  $r$  do mapa.

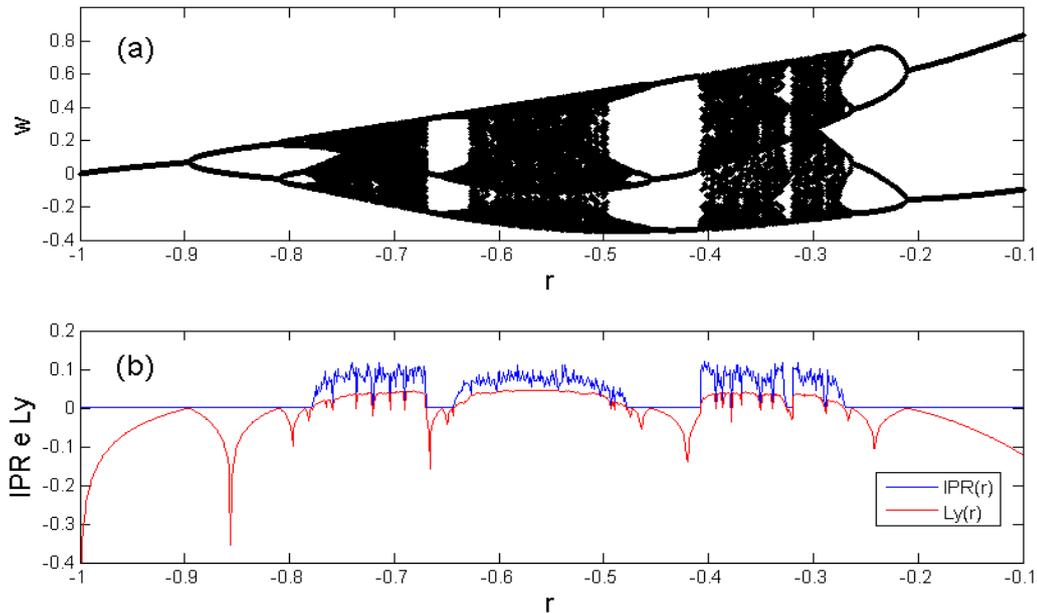


Figura 28 – Mapa gaussiano: (a) Recorte do mapa de bifurcações. (b)  $IPR(r)$  e  $Ly$  para diferentes valores de  $r$  do mapa.

cálculo do  $IPR(r)$  foi necessário fazer média de 500 curvas para suavização. Essa média foi feita armazenando-se os 500 valores de  $IPR$  para o estado fundamental num vetor e fazendo-se média aritmética dos componentes dos vetores. Já o  $Ly$  é calculado para o mapa original e não carece de média. Mesmo assim, as estruturas gerais das curvas, como picos, foram preservados. Além disso, para os cálculos do  $IPR(r)$  apresentados, foram considerados apenas os estados fundamentais de cada sistema, porém, os demais níveis de energia foram investigados, mas não houve diferenças significativas que justificassem sua apresentação.

Observe a correspondência entre os mapas de bifurcações na parte (a) das figuras e as janelas de periodicidade na parte (b). Observe também que para o mapa da barraca (figura 27), para valores de  $r > 0.5$  tanto o  $IPR$  quanto o  $Ly$  mantêm-se positivos.

A correlação entre estas quantidades pode ser atestada exibindo-se num mesmo gráfico os resultados de  $IPR(r)$  e  $Ly(r)$ . A figura 29 mostra claramente que para todos os mapas, tanto o  $IPR(r)$  quanto o  $Ly(r)$ , estão correlacionados no que diz respeito às zonas periódica, caótica e janelas de periodicidade.

Assim, fica ainda mais visível a correspondência entre o  $IPR(r)$  e o  $Ly$ , o que fortalece a ideia de que o  $IPR$  pode ser um indicador confiável de aleatoriedade para os sistemas analisados (em substituição ao decaimento de  $|\psi|^2$ ).

Outro ponto relevante na figura 29 é que os mapas logístico e gaussiano apresen-

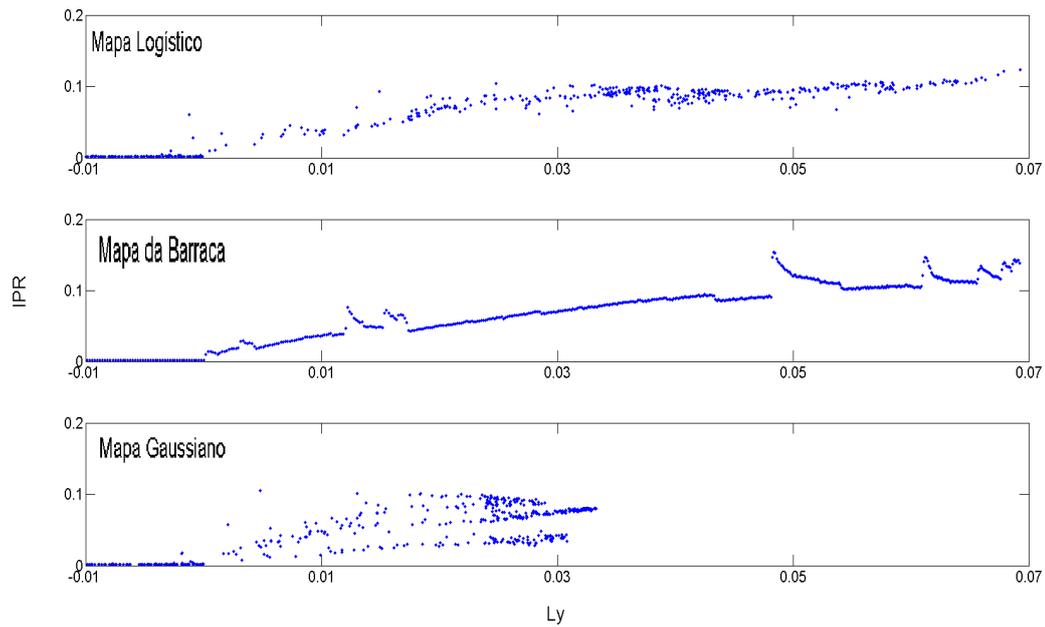


Figura 29 –  $IPR$  do mapas Logístico, da Barraca e Gaussiano *versus* respectivo expoente de Lyapunov. Observe que as regiões de caos e comportamento aleatório são preservadas.

tam valores mais dispersos ao longo da curva, enquanto o mapa da barraca já apresenta uma curva menos dispersa. Isso ocorre devido ao processo de construção dos mapas: os mapas logístico e gaussiano, nas janelas de periodicidade, retornam o valor do  $IPR(r)$  e o  $Ly(r)$  para zero e retornam para o crescimento na próxima zona caótica; isso confere um caráter multivalente à relação entre o  $IPR(r)$  e o  $Ly(r)$ . O mesmo não ocorre com o mapa da barraca pois este apresenta rota abrupta para o caos. A observação das autofunções não evidenciam uma causa para os picos do mapa da barraca.

As sequências caóticas aqui apresentadas (em especial a sequência logística), foram escolhidas de forma que em toda sua extensão, o  $Ly$  fosse positivo para regiões caóticas e negativo para regiões periódicas. Porém, alguns trabalhos apresentaram mapas mais complexos que apresentam zonas conhecidas como *Strange nonchaotic attractors* (SNA) (AWADHESH et al., 2001) (HEAGY; HAMMEL, 1994). Essas regiões são conhecidas por apresentarem comportamento semelhante ao caótico, mas com expoente de Lyapunov  $Ly$  negativo, ou próximo de zero. Esses mapas apresentam uma dinâmica de formação mais complicada, dependendo de vários coeficientes. Como foi possível estabelecer uma relação coerente entre o  $IPR(r)$  e o  $Ly(r)$  para as sequências utilizadas neste trabalho, achou-se pertinente observar como o  $IPR$  se comporta nessas zonas SNA.

A figura 30 mostra as diferentes regiões de comportamento para a sequência

formada com o mapa logístico forçado

$$\begin{aligned} w_{n+1} &= \alpha[1 + \epsilon \cos(2\pi\theta_n)]w_n(1 - w_n) \\ \theta_{n+1} &= \theta_n + \phi \pmod{1}, \end{aligned} \quad (13)$$

onde  $\phi$  é um número irracional (geralmente usa-se a razão áurea  $\phi = (\sqrt{5} - 1)/2$ ),  $0 \leq \alpha \leq 4$  e  $0 \leq \epsilon \leq (4/\alpha - 1)$  para que o fator  $\alpha[1 + \epsilon \cos(2\pi\theta_n)]$  fique entre 0 e 4.

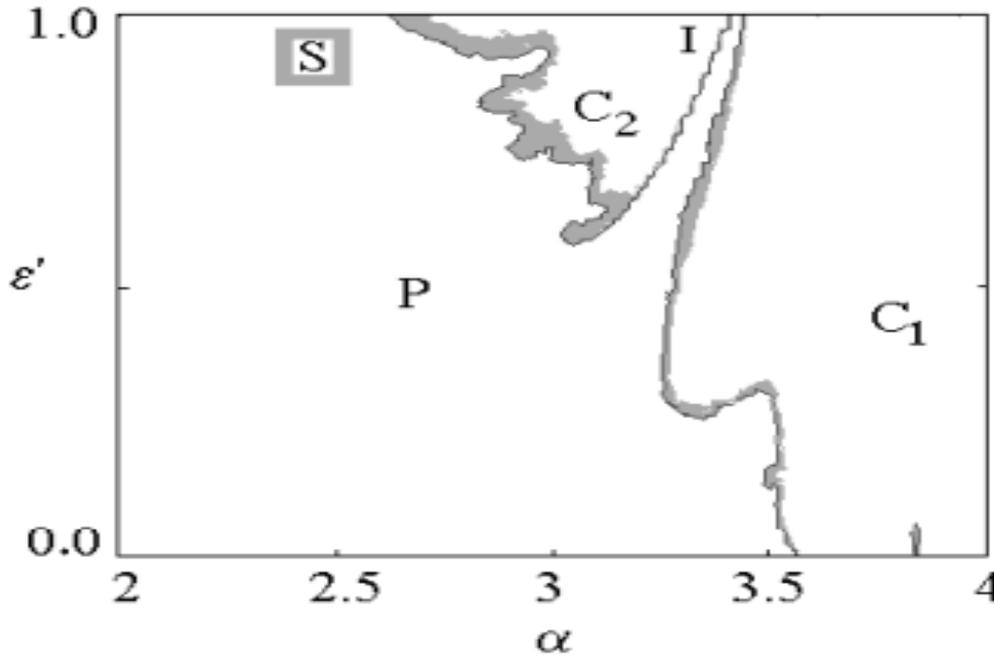


Figura 30 – Mapa de comportamento periódico ( $P$ ), caótico ( $C_1$  e  $C_2$ ) e regiões com comportamento SNA (hachurado) Considere  $\epsilon' = \alpha\epsilon/(4 - \alpha)$ . (AWADHESH et al., 2001)

Esse mapa mostra partes sombreadas para as regiões SNA. Nessas regiões sabe-se (AWADHESH et al., 2001) que o  $L_y$  da sequência é negativo ou oscila levemente em torno de zero, porém, não se sabe o que é encontrado para o  $IPR$ . Assim, considerando  $\epsilon' = 0.95$  e levando em consideração a área SNA que o mapa apresenta ( $2.75 \leq \alpha \leq 3$ ), traçou-se a figura 31. Para construir o potencial para a equação de Schrödinger, utilizou-se ainda os  $w_n$  considerando a regra de transformação para potencial binário já apresentada no capítulo 2: se  $w_n \geq 0.5 \rightarrow 2$  e se  $w_n < 0.5 \rightarrow 1$ .

É possível perceber que na região destacada o  $L_y$  permanece negativo, enquanto o  $IPR(r)$  tende a crescer. Comparando as figuras 30 e 31, pode-se perceber que anteriormente a  $\alpha = 2.75$  estava-se em uma região periódica e que o  $IPR(r)$  é sensível à região SNA. Essa sensibilidade corrobora a ideia de que as sequências utilizadas, onde a região caótica e periódica são bem definidas, com  $L_y(r) > 0$  e  $L_y(r) \leq 0$ , respectivamente, são

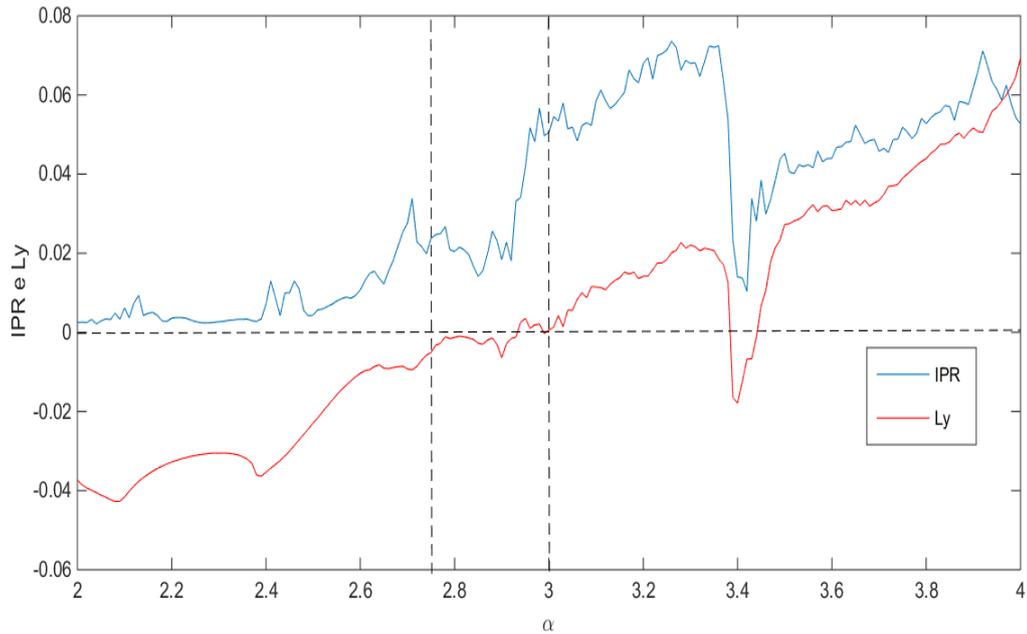


Figura 31 – Região com comportamento SNA. Linhas tracejadas são indicativas de zero e das fronteiras da região SNA para  $\epsilon' = 0.95$ . Para o cálculo do  $IPR(r)$  utilizou-se o autovetor 300.

mais convenientes para o trabalho de correlação entre o  $IPR(r)$  e o  $Ly(r)$ . Investigação mais minuciosa sobre as regiões SNA e os mapas gerados por sequências advindas destas regiões é sugerida nas propostas de trabalhos futuros.

Por fim, pode-se considerar que todas essas comparações fortalecem a ideia de que o  $IPR(r)$  é um bom medidor de desordem e pode contribuir para as análises de sequências unidimensionais criadas a partir de mapas caóticos. A compatibilidade com o  $Ly$  (com exceção das zonas SNA), já vastamente utilizada na teoria do caos, sugere que o  $IPR$  pode ter uso amplo e confiável como medidor de caoticidade para estes mapas. A sensibilidade quanto às regiões SNA também corrobora a ideia de que o  $IPR$  é um bom medidor de desordem.

## Capítulo 5

### *IPR* e a singularidade Johri-Bhatt

Em um artigo publicado em 2012, Johri & Bhatt (JOHRI; BHATT, 2012), analisaram o  $IPR(E)$  de sistemas gerados por potenciais aleatórios. A proposta do trabalho era analisar a densidade dos estados, para os diferentes níveis de energia do espectro, bem como o expoente de Lyapunov também para toda a faixa de energia. O que pôde ser observado é que, à medida em que a energia caminhava para os extremos da distribuição, o  $IPR(E)$  apresenta um ponto singular, e, aparentemente, tende a zero, enquanto o expoente de Lyapunov não apresenta tal comportamento. A figura 32 ilustra essa singularidade.

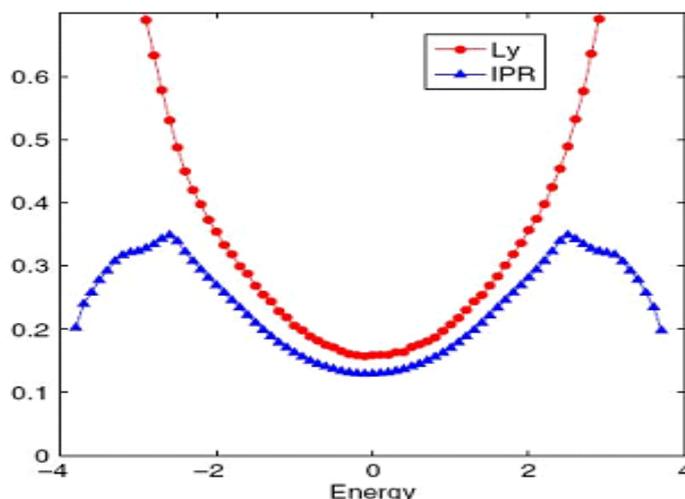


Figura 32 –  $IPR(E)$  e  $Ly(E)$  para o modelo de Anderson unidimensional com distribuição aleatória uniforme (JOHRI; BHATT, 2012). Observe que na energia  $\pm 2.5$  o  $IPR(E)$  sofre uma mudança abrupta, enquanto o  $Ly(E)$  não.

Apesar de Johri & Bhatt utilizarem um agrupamento diferente para o  $IPR$  do que os nossos trabalhos, pensou-se em tentar reproduzir esse resultado para os potenciais caóticos. Para isso, e considerando que não se sabia ao certo nem se essa reprodução era

possível, iniciou-se os trabalhos tentando reproduzir tal singularidade para as nossas seqüências aleatória, periódica e peneperiódicas, que são utilizadas durante todo o nosso trabalho como limites e parâmetro de comparação, respectivamente.

A figura 33 mostra os extremos aleatório (compatível com a literatura) e periódico do  $IPR$  agrupado por energia, ou seja, calcula-se o  $IPR$  para todos os níveis de energia do sistema e depois agrupa-os em um intervalo  $\Delta E$ . Esses resultados são importantes para que consigamos compreender os resultados obtidos pelas seqüências semiperiódicas (peneperiódicas e caóticas).

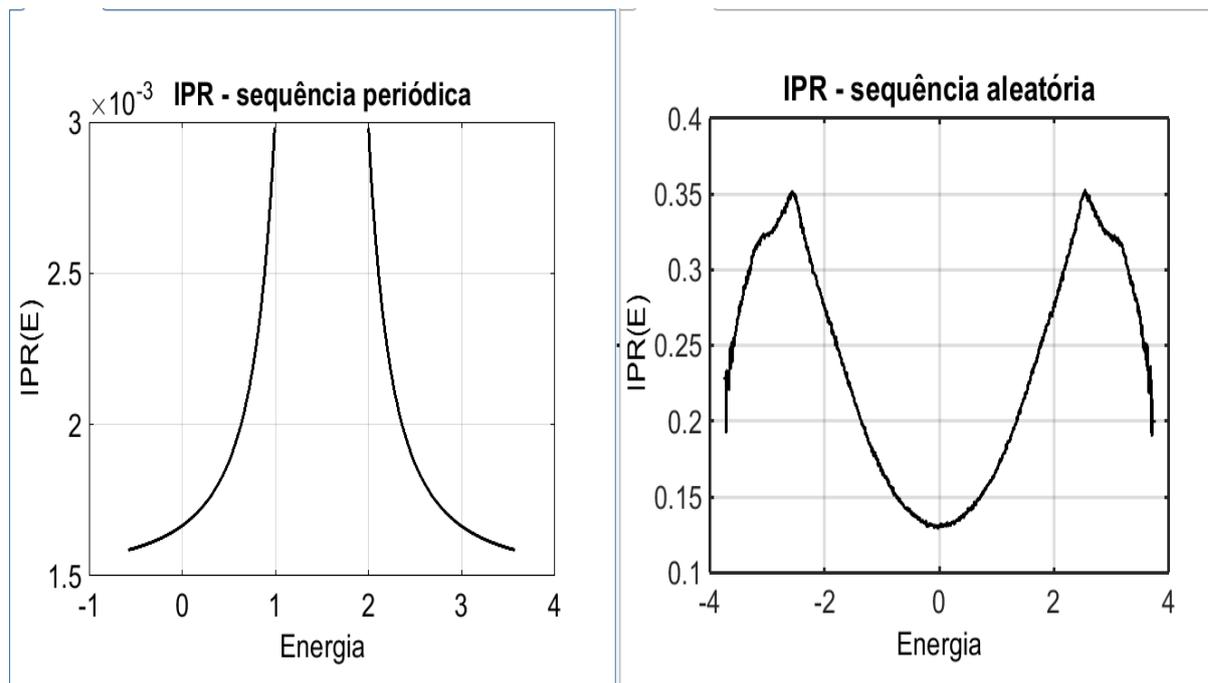


Figura 33 –  $IPR(E)$  para os mapas periódico e aleatório. O extremo aleatório condizente com a literatura e o extremo periódico gerado para análise dos mapas caóticos.

## 5.1 Os mapas peneperiódicos

Com os extremos periódico e aleatório caracterizados, procurou-se gerar curvas com seqüências peneperiódicas para observar os seus comportamentos. Como é possível ver na figura 34, a desordem crescente das seqüências peneperiódicas parece sugerir a passagem gradativa entre as caracterizações apresentadas na figura 33.

Analisando a figura 34, é possível perceber que os casos que se aproximam do extremo periódico não estão bem caracterizados. Os gráficos mostram que algumas zonas de energia são proibidas (o que está associado ao tamanho do período, para o caso periódico). Porém, como as seqüências peneperiódicas não apresentam período

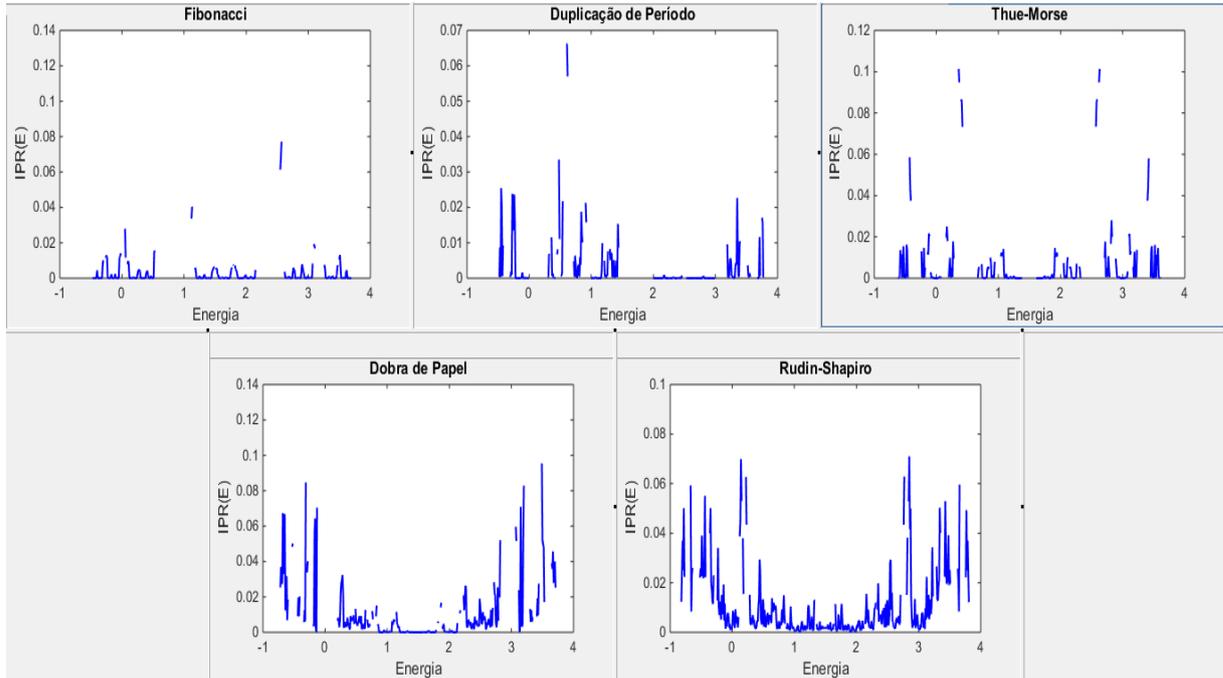


Figura 34 –  $IPR(E)$  para as seqüências de Fibonacci, Duplicação de Período, Thue-Morse, Dobra de Papel e Rudin-Shapiro.

finito, pode vir daí essa divergência. Já nos casos mais próximos ao extremo aleatório, é possível perceber que os picos com a singularidade próximo às bandas aparecem bem definidos.

## 5.2 Os mapas caóticos

Para mapas caóticos, observou-se que os casos em que o parâmetro  $r$  está com valores que os geram com o comportamento mais próximo ao aleatório, as singularidades são bem caracterizadas. Já para as janelas de periodicidade, ou nas zonas periódicas dos mapas, os resultados se aproximaram muito do extremo periódico já visto. Para a construção desses gráficos, foram consideradas seqüências de tamanho  $N = 1000$  e semente inicial aleatória, utilizando-se recursos próprios do MatLab. Para as médias, utilizou-se também pedaços distintos (sem sobreposição) da mesma seqüência caótica com parâmetro definido, mas os resultados não mostraram diferenças significativas. Assim, optou-se por utilizar as sementes aleatórias.

Ao analisar a figura 35, referente ao mapa logístico, é possível perceber que a média de  $IPR(E)$  tem comportamento similar ao periódico para os valores de  $r$  que geram mapas que se aproximam dos gerados por seqüências periódicas (inclusive com relação aos *gaps* presentes no caso periódico), e que caracterizam bem a singularidade encontrada no modelo de Anderson em valores de  $r$  que aproximam o comportamento

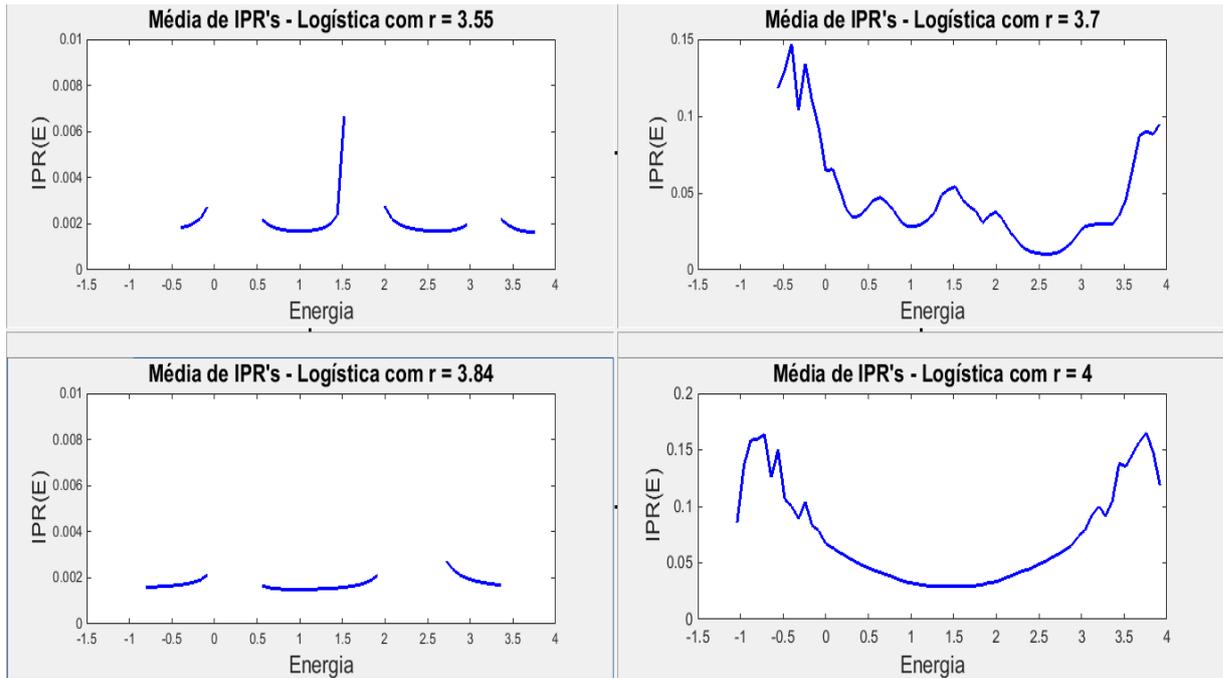


Figura 35 – Mapa logístico:  $IPR(E)$  para diferentes valores de  $r$ .

do extremo aleatório. É possível perceber também que a média de  $IPR$ 's gerada pelo mapa com  $r = 4$  é bem definida quanto à singularidade.

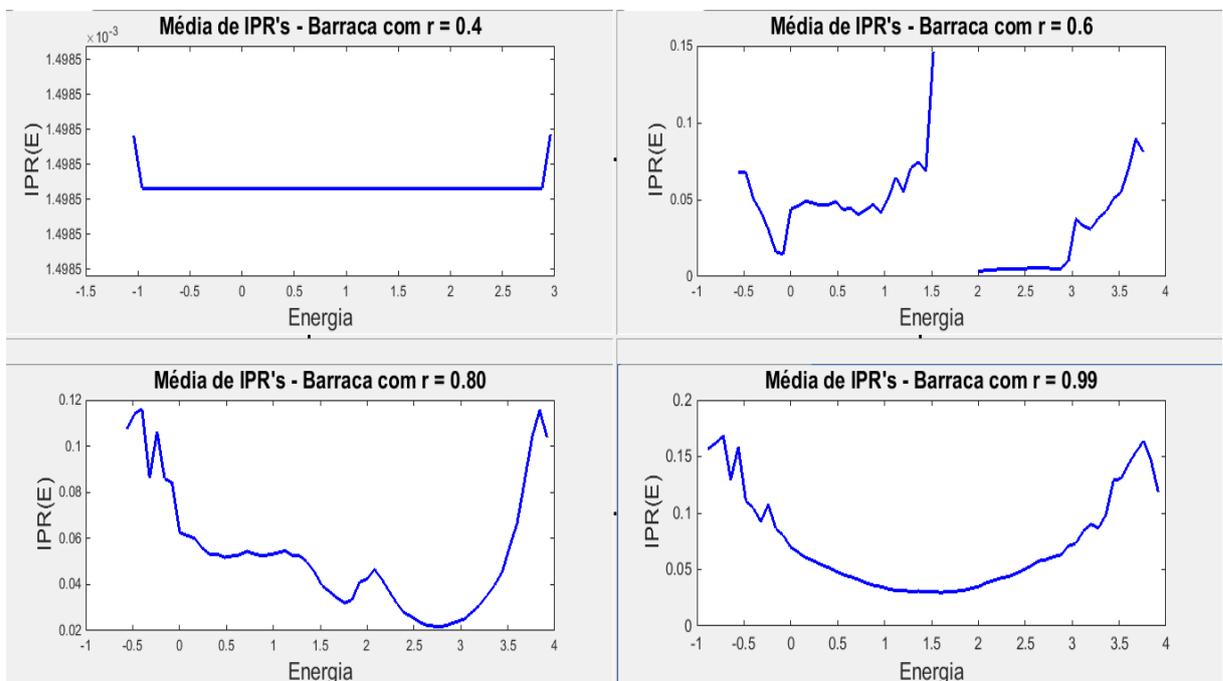


Figura 36 – Mapa da barraca:  $IPR(E)$  para diferentes valores de  $r$ .

O mapa da barraca já mostra que a mudança abrupta para o caos é bem definida,

na figura 36. Observe que, para  $r = 0.4$ , o mapa se aproxima do comportamento periódico, porém sem *gaps*. Como já dito anteriormente, a existência de um ou mais *gaps* está diretamente relacionada com o tamanho do período da sequência e, neste caso, tinha-se uma sequência com apenas um ponto de acumulação, portanto, sem *gaps*. Na medida em que o parâmetro  $r$  caminha em direção ao extremo 1, temos que a singularidade vai se tornando mais caracterizada.

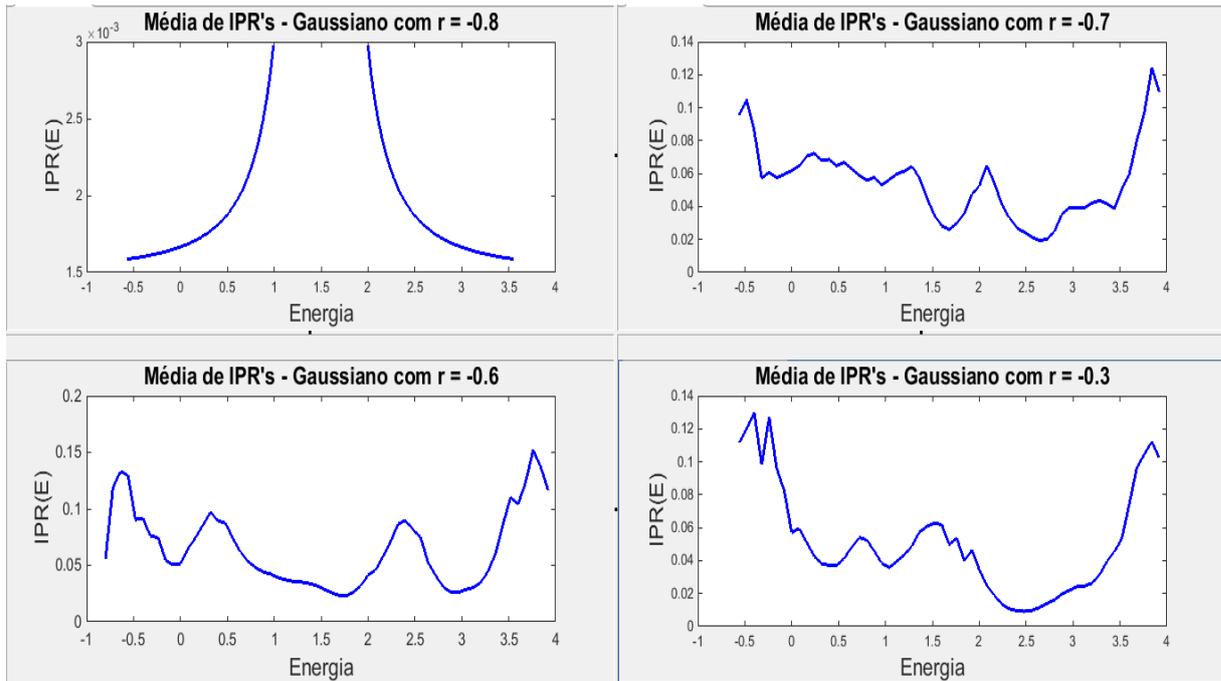


Figura 37 – Mapa gaussiano:  $IPR(E)$  para diferentes valores de  $r$ .

O mapa gaussiano tem ida para o caos por bifurcações e volta para a região periódica por unificações. A figura 37 apresenta uma região periódica, com  $r = -0.8$  e três valores de  $r$  com resultado com comportamento similar ao extremo aleatório. Aqui, optou-se por não apresentar mais valores com comportamento periódico devido à similaridade das curvas. As singularidades estão bem marcadas nas regiões de  $r$  caótico, porém não existem muitas maneiras de se comparar quais as regiões mais ou menos caóticas, uma vez que o mapa bifurca para o caos e unifica para a região periódica novamente.

Apesar das figuras 35, 36 e 37 apresentarem apenas quatro valores diferentes de parâmetro  $r$ , quando outros valores de parâmetro  $r$  foram gerados, percebeu-se que existe uma continuidade na construção da singularidade, à medida em que seguimos do periódico para o aleatório. Assim, construiu-se uma sequência de quadros na extensão “avi” para comprovar essa continuidade. O vídeo mostra que, quando o parâmetro  $r$  vai caminhando para as zonas mais aleatórias, a singularidade vai ficando melhor definida.

Não se sabe ao certo quais características físicas essa singularidade pode trazer.

Acredita-se que essa mudança abrupta no *IPR* pode evidenciar alguma propriedade do sistema que ainda não foi explorada. Como percebeu-se que os mapas caóticos apresentam a mesma singularidade, pretende-se explorar um pouco mais das consequências físicas dessa mudança abrupta. Acredita-se, superficialmente, que essa singularidade pode ser explicada a partir dos estados de Lifshitz (JOHRI; BHATT, 2012), que sinteticamente podem ser definidos como pequenas regiões periódicas se analisadas separadamente, que podem surgir na aleatoriedade de uma sequência maior, mas isso necessita de maior investigação.

## Capítulo 6

# *GIPR* e a dimensão multifractal dos autoestados

Nos modelos classificados como críticos, as autofunções do sistema podem ser vistas como distribuições multifractais, com suas várias dimensões  $d_q$ . Sabe-se (CUEVAS, 2002) que o *GIPR* para sistemas de tamanho finito está relacionado com a dimensão fractal  $d_q$  associada a uma dada autofunção da seguinte maneira.

Como já foi visto no capítulo 2, dada a equação 11, o *GIPR* pode ser escrito de forma contínua pela equação 12:

$$GIPR(q) = \int_{\Omega} dx |\psi(x)|^{2q} \propto L^{-d_q(q-1)},$$

onde  $d_q$  é a dimensão fractal associada à autofunção,  $\Omega$  denota a região de integração de extensão  $L$ .

Também já foi visto que, de modo geral, pode-se perceber uma relação direta entre o *IPR* e a dimensão fractal do autovetor  $\psi$ , a partir do coeficiente angular da reta gerada pelo ajuste de curva do tipo  $y = b - ax$  da seguinte maneira: dada uma dimensão fractal  $d_q$ , a dimensão fractal é dada pelo coeficiente angular  $a = (q - 1)d_q$ , ou seja,  $d_q = \frac{a}{q - 1}$ .

Para se investigar a dimensão fractal dos autovetores dos sistemas gerados por potenciais caóticos, pensou-se inicialmente em investigar os sistemas formados pelas sequências aleatória, periódica e peneperiódicas. Isso se justifica pela gama de informações já existentes sobre essas sequências, que estão sendo usadas como parâmetro comparativo para todo o trabalho com as sequências caóticas.

Assim, considerando que a literatura (CASTELLANI et al., 1986) (MIRLIN A. D.; EVERS, 2000) (PRIGODIN V.N.; ALTSHULER, 1998) geralmente considera sequências aleatórias nos resultados envolvendo análise de dimensão fractal dos sistemas, e considerando que os resultados obtidos para as sequências caóticas poderiam carecer

de uma comparação, dividiu-se o trabalho em duas partes.

## 6.1 Dimensão fractal para seqüências aleatória, periódica e peneperiódicas

Para as seqüências aleatória, periódica e peneperiódicas, inicialmente, buscou-se compreender as diferenças entre variados  $q$ 's na equação 12. Assim, numa primeira fase, gerou-se variados gráficos em escala logarítmica para cada uma das seqüências envolvidas com o objetivo de comparação e percepção das diferenças. Para esses gráficos, retirou-se o coeficiente angular do ajuste de curva do tipo  $b - ax$  utilizando-se regressão linear.

O gráfico abaixo apresenta dois diferentes valores de  $q$ 's para a seqüência periódica. Observe que ambos os gráficos apresentam curva logarítmica similar.

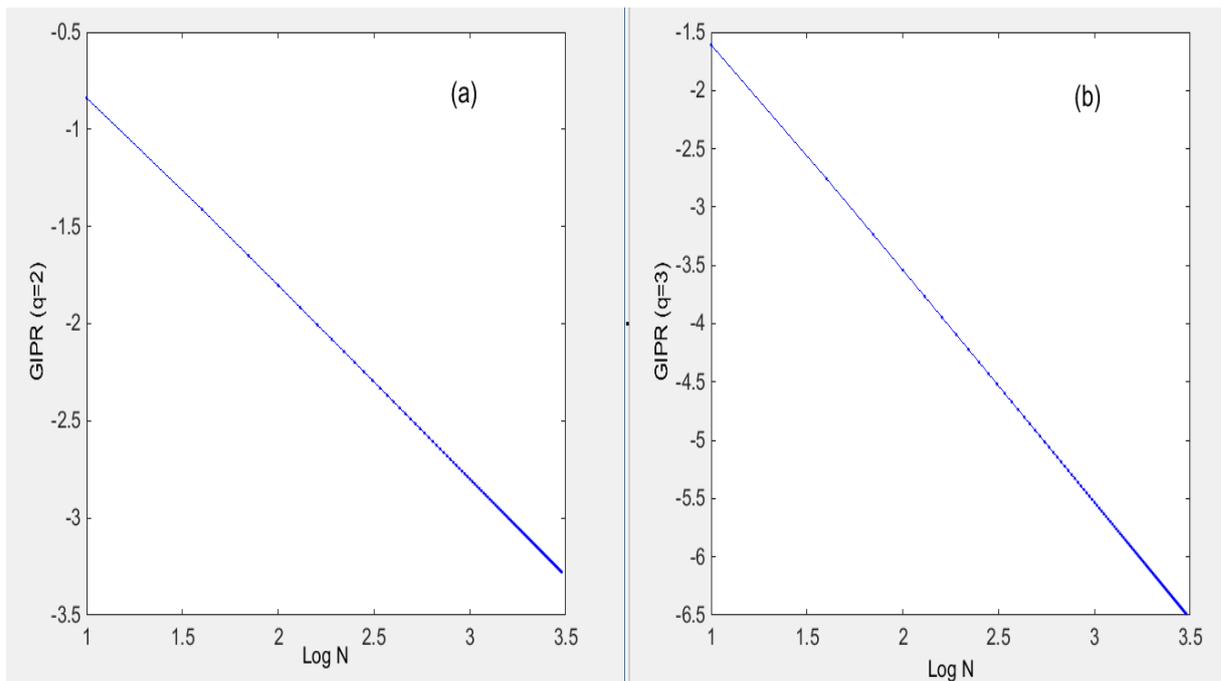


Figura 38 – Seqüência periódica: (a) Gráfico em escala logarítmica envolvendo o tamanho do sistema e o  $GIPR$  com  $q = 2$ . Para este gráfico, pelo ajuste de curvas, obteve-se coeficiente angular  $a = -0.9938$ , com precisão de 100%. (b) Gráfico em escala logarítmica envolvendo o tamanho do sistema e o  $GIPR$  com  $q = 3$ . Para este gráfico, pelo ajuste de curvas, obteve-se coeficiente angular  $a = -1.988$ , com precisão de 100%.

Para este primeiro tipo de análise, a dimensão fractal  $d_q$  é calculada manualmente utilizando-se a relação  $d_q = \frac{a}{q - 1}$ . Para ambos os casos, a dimensão fractal ficou

próximo de um,  $d_q \approx 1$ .

O mesmo procedimento foi realizado com a sequência aleatória: variou-se os  $q$ 's e obteve-se indiretamente a dimensão fractal do sistema. Porém, aqui, precisou-se fazer médias para suavizar a curva. Utilizou-se média de 50 curvas para o ajuste de curvas. A figura abaixo mostra o sistema com  $q = 2$  e  $q = 3$ .

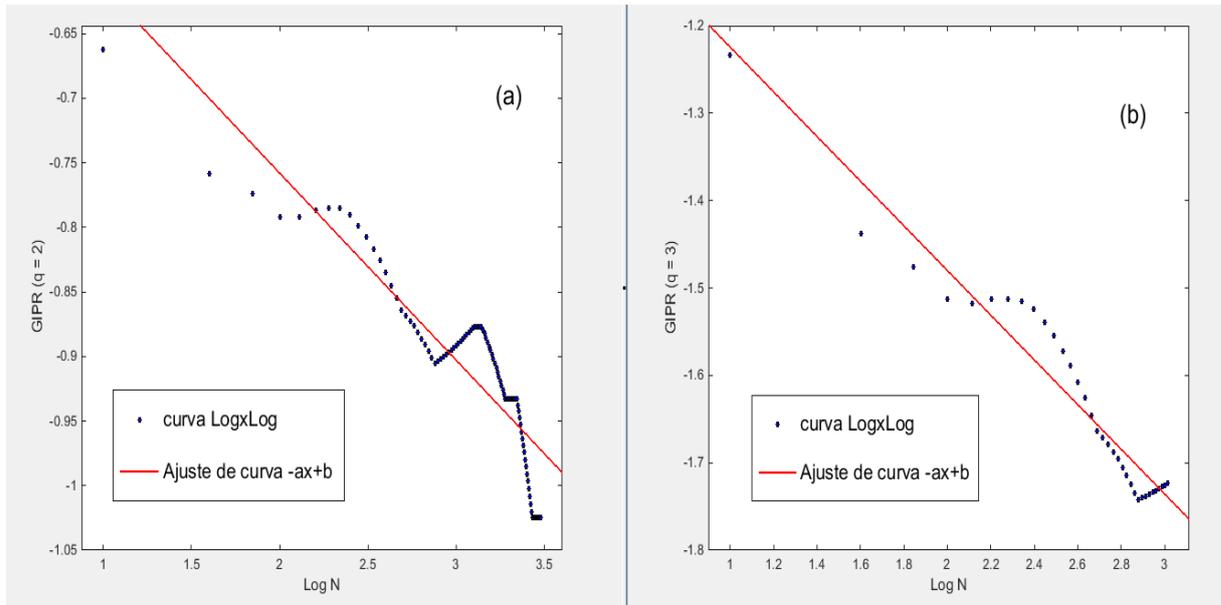


Figura 39 – Sequência aleatória: (a) Gráfico em escala logarítmica envolvendo o tamanho do sistema e o  $GIPR$  com  $q = 2$ . Para este gráfico, pelo ajuste de curvas, obteve-se coeficiente angular  $a = -0.1448$ , com precisão de 80%. (b) Gráfico em escala logarítmica envolvendo o tamanho do sistema e o  $GIPR$  com  $q = 3$ . Para este gráfico, pelo ajuste de curvas, obteve-se coeficiente angular  $a = -0.2555$ , com precisão de 93%.

A partir daí, percebeu-se que uma maneira de melhor apresentar os dados era gerando gráficos que estabelecessem uma relação entre a dimensão  $d_q$  do sistema e o coeficiente  $q$  do  $GIPR$ . Para tal, foi construído um algoritmo que retirasse de cada valor de  $q$  o valor de dimensão fractal  $d_q$ , a partir do ajuste de curvas do Matlab e armazenasse-o num vetor. Dessa maneira, foi possível relacionar vários valores de  $q$ 's para análise de forma rápida e bastante visual. O resultado final mostra um gráfico onde é possível perceber a dimensão fractal  $d_q$  para um dado  $q$ .

A figura 40 apresenta a dimensão fractal para variados  $q$ 's para as sequências aleatória e periódica. Observe que para o caso periódico, a dimensão fractal se conserva sempre próxima de um, enquanto para o extremo aleatório, existe uma pequena variação na dimensão fractal na medida em que  $q$  cresce, sempre com valores mais baixos, próximos de 0.1.

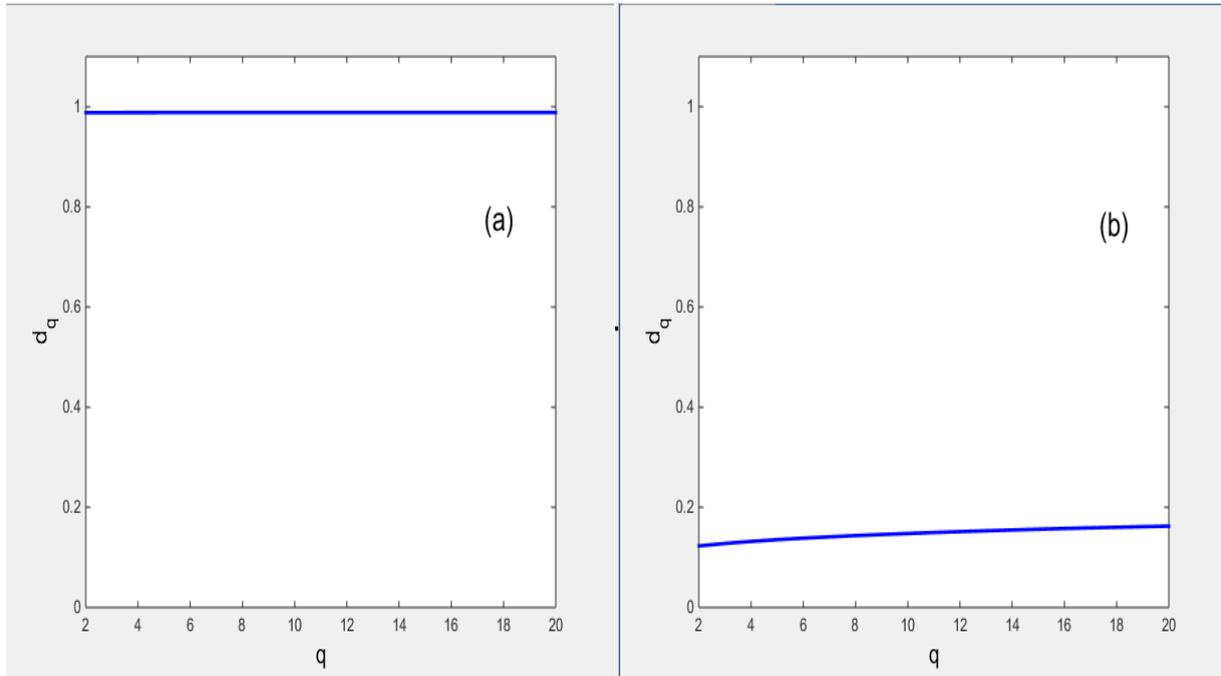


Figura 40 – (a) Curva do valor assintótico da dimensão fractal para diferentes  $q$ 's gerados pela sequência periódica. (b) Curva do valor assintótico da dimensão fractal para diferentes  $q$ 's gerados pela sequência aleatória.

As figuras 41 e 42 apresentam o comportamento assintótico para as sequências peneperiódicas próximas ao extremo periódico (figura 41) e o comportamento assintótico para as sequências peneperiódicas próximas ao extremo aleatório (figura 42).

Analisando-se as figuras 41 e 42, é possível perceber que as curvas de Fibonacci, Thue-Morse e Duplicação de Período apresentaram comportamento multifractal bem definido. É mais claro percebê-lo na sequência duplicação de período e Fibonacci, mas mesmo de maneira sutil, o decaimento da curva Thue-Morse também acusa esse comportamento. Esse resultado é compatível com a análise espectral e de autovetores já obtida anteriormente (OLIVEIRA, 2012).

As curvas Rudin-Shapiro e Dobra de Papel apresentaram comportamento similar à curva assintótica de dimensão fractal gerada pela sequência aleatória. Segundo Cuevas e colaboradores (CUEVAS et al., 2002), a dimensão fractal para  $q = 2$  é a mais importante do sistema e recebe o nome de dimensão típica. Observe que quando  $q$  cresce, o comportamento da curva tende a ser uma constante. Porém, quando se analisa a dimensão típica, é possível perceber que todas as curvas geradas por sequências semelhantes ao resultado obtido pela sequência periódica têm dimensões típicas muito próximas de um, enquanto os valores para a dimensão típica estão abaixo de  $d_2 = 1$

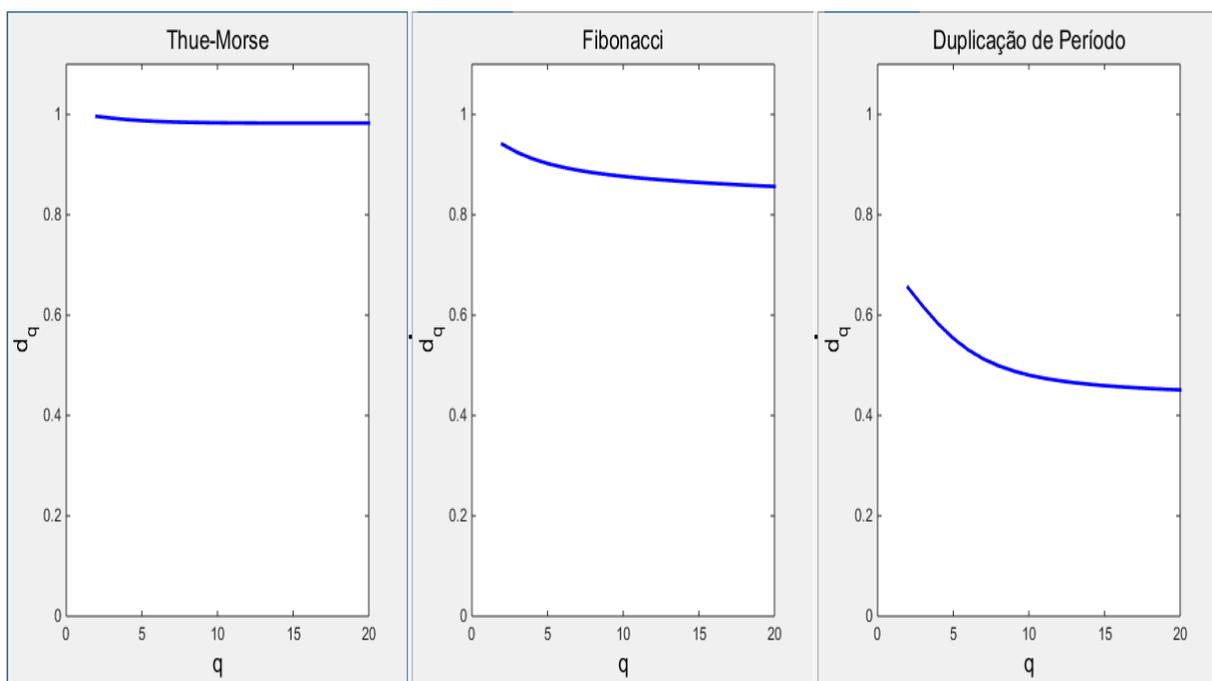


Figura 41 – Quadro comparativo para as seqüências peneperiódicas. Em cada gráfico, pode-se ver a relação  $d_q \times q$ .

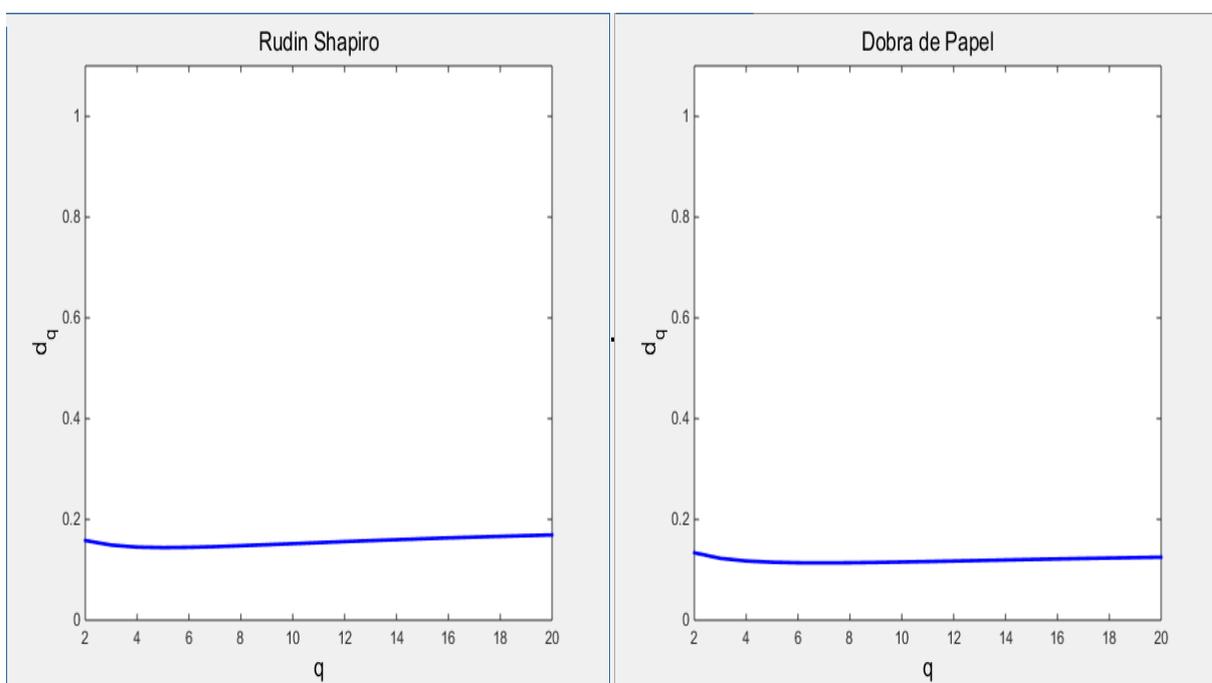


Figura 42 – Quadro comparativo para as seqüências peneperiódicas. Em cada gráfico, pode-se ver a relação  $d_q \times q$ .

para os casos próximos ao extremo aleatório.

Como esperado, todas as sequências peneperiódicas apresentaram comportamento intermediário aos obtidos com sequências periódica e aleatória. De acordo com Cuevas (CUEVAS, 2002), os mapas com decaimento crítico apresentam comportamento multifractal bem definido, o que foi comprovado pelos mapas testados.

## 6.2 Dimensão fractal para os mapas caóticos

Usando a mesma proposta de se gerar curvas que explicitem a dimensão fractal a partir do coeficiente  $q$  do  $GIPR$ , foi possível estabelecer quadros comparativos para os mapas caóticos. Em cada mapa, preocupou-se metodicamente em caminhar por todas as janelas de bifurcação, para que fosse possível ver se os mapas apresentavam resultados correspondentes aos seus diagramas de bifurcação, já apresentados anteriormente.

A figura 43 apresenta o primeiro quadro de dimensão fractal para o mapa logístico com variados valores de  $r$ .

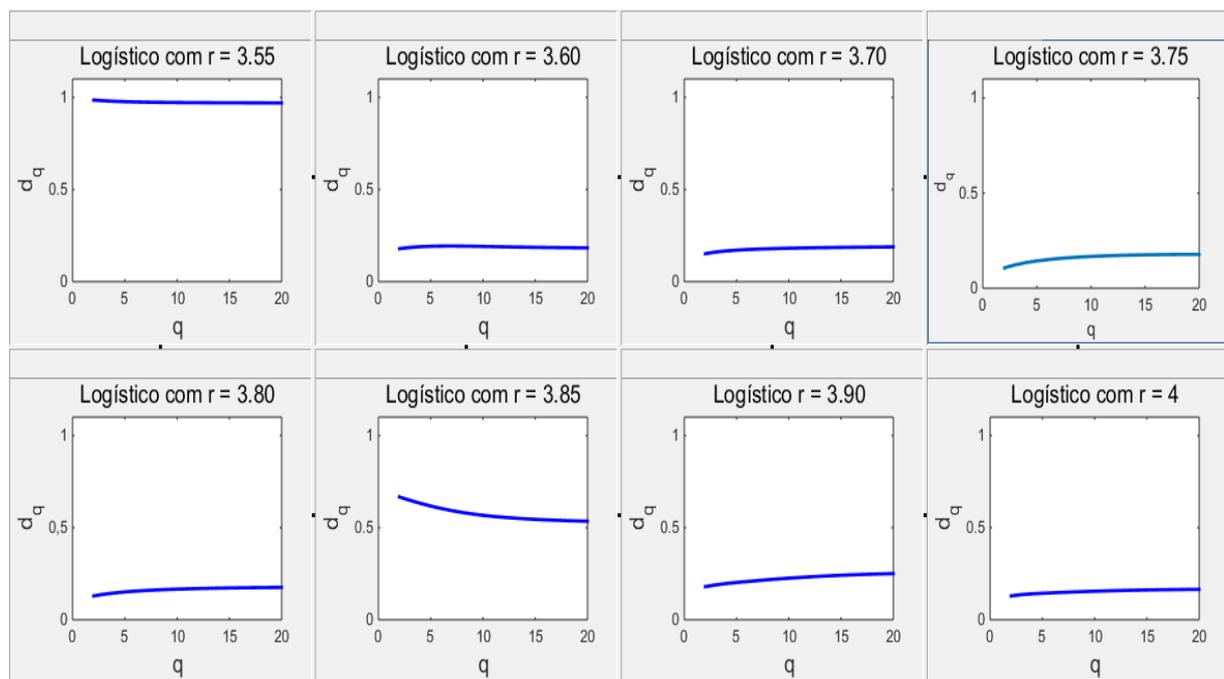


Figura 43 – Quadro comparativo para o mapa logístico. Em cada gráfico, pode-se ver a relação  $d_q \times q$ .

O segundo quadro (figura 44) mostra os resultados obtidos com o mapa da barraca. Neste mapa, a rota para o caos é abrupta em  $r = 0.5$ . Como se pode ver, as curvas assintóticas geradas pelas dimensões fractais mostram claramente (pela proximidade a  $d_q = 1$ ) que essa ruptura entre o periódico e o caótico é respeitada.

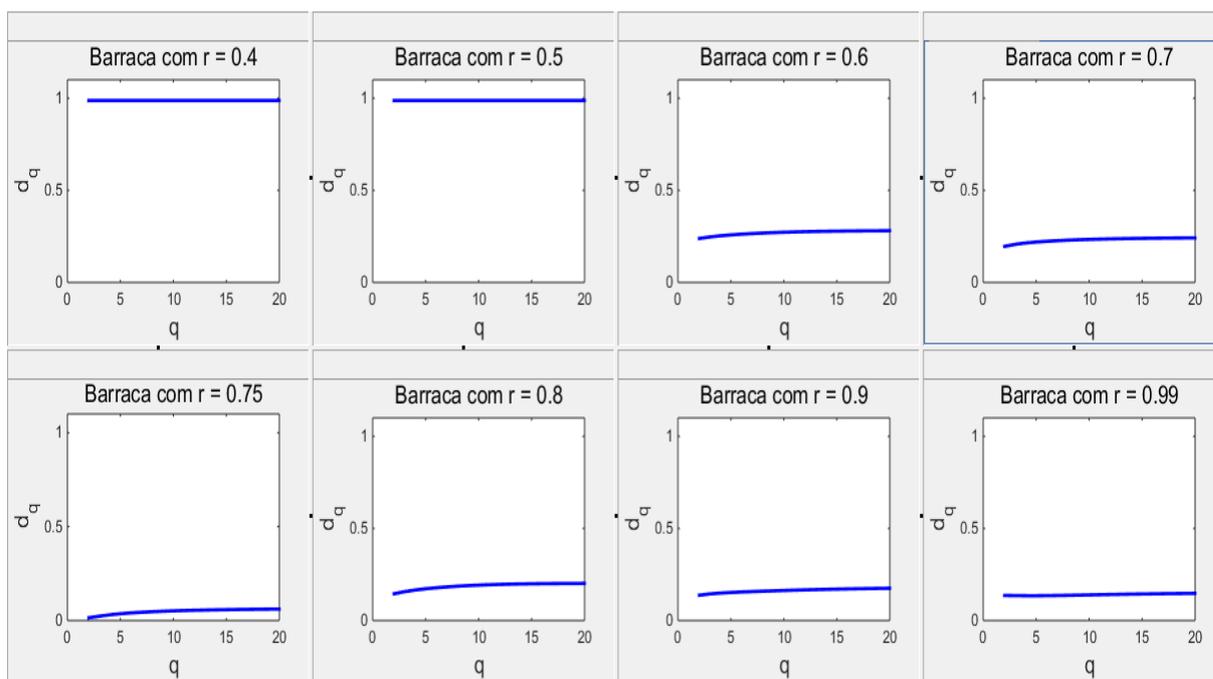


Figura 44 – Quadro comparativo para o mapa da barraca. Em cada gráfico, pode-se ver a relação  $d_q \times q$ .

A figura 45 traz o último quadro de análise da dimensão fractal dos mapas caóticos e mostra os resultados obtidos utilizando-se o mapa gaussiano. Neste mapa, a rota para o caos se dá por bifurcações mas o mapa volta a ter comportamento periódico também por unificações.

Ao se analisar os quadros 43, 44 e 45, percebe-se claramente que o controle do caos é pertinente com relação às dimensões multifractais.

Observa-se que os mapas com ajuste de parâmetro  $r$  com valores que geram comportamento periódico estão estabilizados numa dimensão única, próxima de um. Os valores de parâmetros que levam ao outro extremo apresentam comportamento próximo ao gerado pelo mapa aleatório e esses também não apresentam variação multifractal muito relevante e se estabilizam próximo de 0.2. Porém, os valores de  $r$  que geram comportamentos intermediários apresentam uma variação multifractal, alguns de modo bastante evidente e outros nem tanto. Este comportamento está de acordo com a literatura (CUEVAS, 2002) e fortalece a ideia de que os mapas caóticos são uma boa alternativa aos penepiódicos.

É possível perceber também que, na medida em que  $q$  cresce, a variação de  $d_q$  entre diferentes  $q$ 's fica menor, estabilizando num valor fixo. Isto também está de acordo com a literatura (CUEVAS et al., 2002), onde se estabelece que a dimensão típica  $q = 2$  é considerada a mais importante pois não varia com o tamanho do sistema.

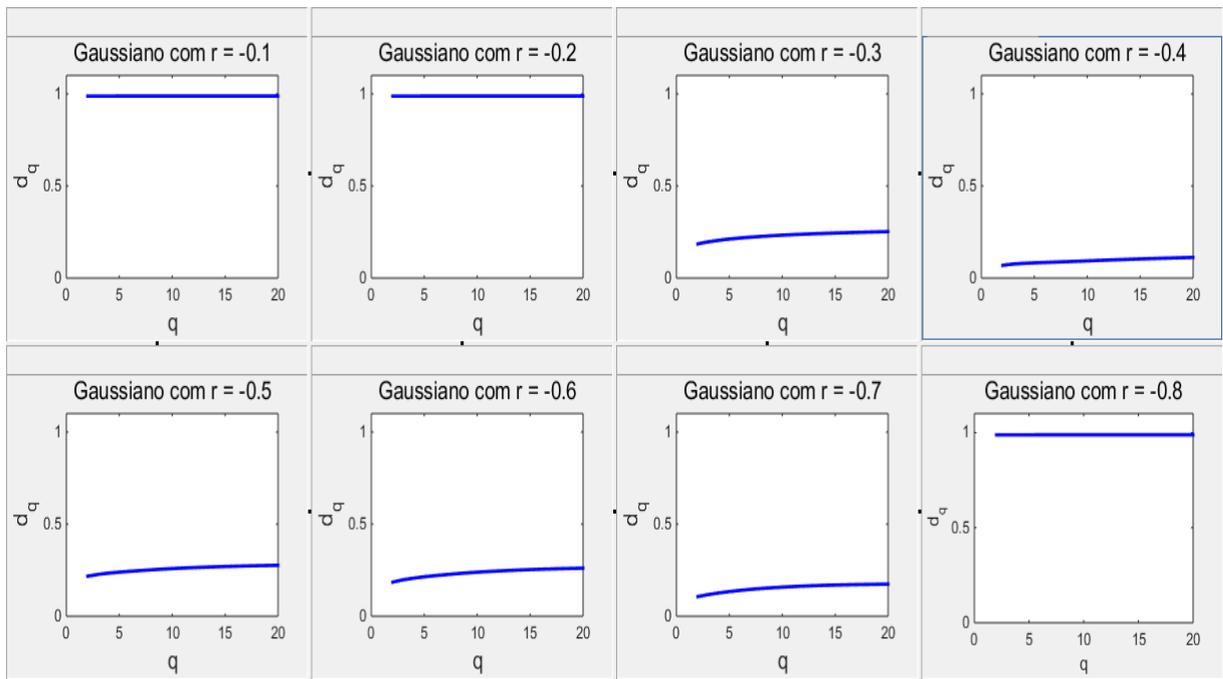


Figura 45 – Quadro comparativo para o mapa gaussiano. Em cada gráfico, pode-se ver a relação  $d_q \times q$ .

# Capítulo 7

## Conclusão

O crescimento de quase-cristais pelo ordenamento de átomos com base em sequências peneperiódicas já está consolidado dentro da física do estado sólido (ASH-CROFT; MERMIN, 1976). Muitos são os trabalhos (ROY; KHAN, 1994) (ROY et al., 1995) (OH; LEE, 1993) (PIÉCHON et al., 1995) (MIZOGUCHI et al., 1997) (RYU et al., 1992) que utilizaram-se da sequência de Fibonacci e Thue-Morse para analisar diferentes aspectos de estruturas construídas com base nessas regras de substituição. Além disso, a utilização do medidor de participação dos sítios na rede,  $|\psi|^2$ , também é vastamente utilizado como ferramenta para determinar se o sistema tem classificação como estendido ou localizado.

O presente trabalho apresenta duas alternativas às já consagradas ferramentas da física do estado sólido: (a) a utilização de mapas caóticos como regra de substituição para o potencial da equação de Schrödinger e (b) a utilização do *IPR* como medidor de participação dos sítios na composição da função de onda  $\Psi$ .

O capítulo 2 apresenta as principais ferramentas matemáticas e físicas utilizadas ao longo deste trabalho e também a maneira com que se acredita poder utilizá-las para investigar novas características e propriedades sobre os potenciais caóticos e sobre o *IPR*.

Os potenciais caóticos apresentam comportamento muito similar ao obtido pelos potenciais gerados por sequências peneperiódicas. Até onde sabemos, a utilização de mapas caóticos como simulador de potencial para a equação de Schrödinger é inédita e foi proposta por César Rogério de Oliveira (OLIVEIRA, 2002). A análise qualitativa e quantitativa sobre esses mapas reforçou ser verdade uma hipótese levantada anteriormente (OLIVEIRA, 2012): os mapas caóticos podem ter o desordenamento controlado por meio do ajuste de seus parâmetros de criação. Essa característica sugere que o pesquisador poderia, hipoteticamente, ajustar o parâmetro da sequência para que o potencial se comportasse da maneira que lhe fosse conveniente, para determinado problema físico.

O capítulo 3 apresenta uma análise qualitativa por meio dos autovalores e autovetores dos mapas caóticos como simulação do potencial da equação de Schrödinger e uma análise quantitativa por meio do  $IPR$  e sua relação com o decaimento de  $|\psi|^2$  para alguns níveis de energia previamente escolhidos.

Inicialmente, uma varredura por todo o conjunto universo de  $r$  foi realizada e tentou-se explorar ao máximo as janelas de periodicidade contidas nos mapas logístico e gaussiano. Neste momento, foi possível caracterizar qualitativamente o espectro e alguns valores determinados de energia para que compreendêssemos o quão importante era a determinação do parâmetro  $r$  para o sistema. Além dos resultados apresentados no capítulo, como material complementar, criou-se arquivos de vídeos de autovetores para determinados valores de  $r$  e das curvas espectrais para todos os possíveis valores de  $r$ . O que se pode perceber é que as janelas de periodicidade estão claramente caracterizadas e consolidam a ideia de que os mapas caóticos podem, de fato, controlar a desordem por meio do ajuste de parâmetro.

Já o  $IPR(n)$  representa uma proposta de alternativa ao decaimento de  $|\psi|^2$ , mais utilizado na literatura. O que pôde-se perceber é que o  $IPR(n)$  apresenta-se como uma ferramenta eficaz para caracterizar os sistemas em localizado - delocalizado e apresenta uma relação importante com a probabilidade apreciável de se encontrar a partícula.

Uma outra proposta de caracterização utilizou o  $Ly_a$ , que representa o inverso do comprimento de localização. Infelizmente, apesar de funcionar bem para os casos próximos ao extremo periódico, não foi possível perceber sua eficácia nos casos caóticos (próximos ao extremo aleatório), o que nos fez concluir que este medidor precisa ser melhor compreendido e aplicado nos nossos sistemas. Apesar disso, as caracterizações qualitativa e quantitativa não deixam dúvida sobre a eficácia dos mapas caóticos para simularem o potencial na equação de Schrödinger e sobre o controle da desordem por meio do ajuste do parâmetro  $r$ .

O capítulo 4 apresenta uma relação entre o  $IPR$  e o expoente de Lyapunov ( $Ly$ ) do mapa. De maneira geral, o  $IPR$  fornece uma medida da participação dos sítios na composição da função de onda e sua distribuição sobre a rede. No extremo aleatório, o decaimento se estabiliza em uma constante positiva  $k > 0$ . Já no extremo periódico, este decaimento é caracterizado pelo tipo  $\frac{1}{N}$  e, conseqüentemente, tende à zero (MONTHUS; GAREL, 2010). Já o expoente de Lyapunov do mapa ( $Ly$ ) é um consagrado medidor de caoticidade do sistema e apresenta valores positivos ( $Ly > 0$ ) para regiões caóticas e valor negativo ou zero ( $Ly \leq 0$ ) para regiões sem caoticidade.

Para a análise quantitativa, utilizou-se o  $IPR$  comparado-o ao expoente de Lyapunov do mapa ( $Ly$ ). É importante ressaltar que o  $IPR$  é calculado para determinado autovetor do sistema (nesta pesquisa, frequentemente o estado fundamental), ou seja, é uma medida do sistema. Já o  $Ly$  é uma medida de caoticidade da sequência. O que

percebeu-se é que existe uma correlação entre esses dois medidores: o *IPR* tende à zero exatamente aonde o *Ly* apresenta-se negativo ou zero e o *IPR* estabiliza-se em constante  $k > 0$  exatamente onde o *Ly* apresenta-se positivo.

O mapa logístico pode apresentar uma generalização mostrada pela equação 13. Para essa generalização, algumas regiões podem apresentar atrator estranho não caótico (SNA), ou seja, regiões com dinâmica complicada mas em que o expoente de Lyapunov (*Ly*) não reconhece caoticidade no sistema. Essas regiões são apresentadas pela figura 30. Para as primeiras análises, considerou-se valores de parâmetros que não geram regiões SNA's. Posteriormente, percebeu-se que o *IPR* apresenta-se sensível a essas regiões. Isso fortalece a ideia de que foi conveniente escolher mapas caóticos que não trouxessem regiões do tipo SNA, uma vez que, então, o *IPR*, como medidor, distingue bem os diversos comportamentos. Resultados da relação entre o *IPR* do estado fundamental do sistema e o *Ly* foram publicados em um artigo científico <sup>1</sup>.

Existem várias maneiras de se analisar o *IPR*. Em trabalhos anteriores (OLIVEIRA, 2012), utilizou-se sempre análises de *IPR* pelo tamanho  $N$  do sistema. No capítulo 5, novas abordagens foram realizadas. Em uma delas, utilizou-se a energia  $E$  do sistema como parâmetro de análise para o *IPR* e essa nova abordagem proporcionou uma análise diferente dos potenciais caóticos, agrupando-os por médias na energia do sistema. A partir disso, foi possível perceber que a singularidade apresentada por Johri & Bhatt (JOHRI; BHATT, 2012) para o modelo de Anderson, também se estende aos potenciais caóticos. Além disso, foi possível iniciar a análise de mapas com um valor de parâmetro  $r$  que gerasse um sistema periódico e, a partir dele, caminhando com valores de  $r$  na direção do caos (pensando no mapa de bifurcações), chegar até o estado caótico, tendo sido possível perceber a formação dessa singularidade na medida em que a variação  $r$  tornava a sequência mais caótica.

O *GIPR* também está relacionado com a dimensão multifractal do sistema, como foi visto no capítulo 6. A análise multifractal do sistema por meio do *GIPR* é apresentada em vários trabalhos (EVERS; MIRLIN, 2000) (MIRLIN A. D.; EVERS, 2000) (PRIGODIN V.N.; ALTSHULER, 1998) que analisam as propriedades de transição entre condutância e isolamento no modelo de Anderson. Sabe-se (CUEVAS et al., 2002) que essas informações têm aplicação em sistemas dinâmicos caóticos, distribuição de probabilidade de crescimento por agregação em difusores limitados, entre outros. Foi possível perceber que a dimensão fractal para sequências periódicas tende a se estabilizar em um valor constante igual a um, enquanto para o extremo aleatório essa dimensão fractal fica em torno de um décimo. Os casos semi-periódicos (gerados por sequências penepériódicas e caóticas), também conhecidos como estados críticos, apresentam dimensões multifractais bem definidas, como previsto pela literatura (CUEVAS, 2002).

---

<sup>1</sup>Cópia deste e demais trabalhos publicados podem ser vistos no anexo B desta tese.

Por fim, pode-se concluir que os mapas caóticos apresentam, de fato, a vantagem de controle de desordem por meio do ajuste de parâmetro dos mapas, o que pode ser um benefício frente às sequências peneperiódicas e podem contribuir com o estudo de ordenamento de átomos e, conseqüentemente, com o estudo de quase-cristais e com a engenharia de novos materiais. Além disso, a utilização do *IPR* e de sua generalização *GIPR* possibilitam estudos relacionados à distribuição multifractal do sistema, ao agrupamento por energia do sistema e aparecimentos de singularidades encontradas no modelo de Anderson, o que pode contribuir para a descoberta de novas propriedades e características para os sistemas e acrescentar novas vantagens além da já observada neste trabalho.

## 7.1 Trabalhos Futuros

A medida em que a pesquisa foi sendo realizada, algumas novas possibilidades surgiram e acredita-se que, de certa forma, darão continuidade ao trabalho aqui apresentado. Espera-se iniciar os trabalhos futuros (desdobramentos deste) pelos seguintes itens:

- Buscar novos mapas caóticos além dos apresentados neste trabalho e verificar sua compatibilidade com os resultados encontrados.
- Compreender melhor como o *Lya* se aplica aos nossos sistemas e tentar buscar sua caracterização também por meio deles.
- Analisar se os mapas caóticos apresentam correlação de curto ou longo alcance e, conseqüentemente, geram sistemas com fronteiras de mobilidade. Compreender melhor essas fronteiras e suas conseqüências para esses tipos de sistemas.
- Compreender melhor as zonas SNA's e verificar a existência dessas regiões para os demais mapas caóticos.
- Caracterizar melhor as regiões SNA's e analisar os sistemas gerados por essas sequências como simulador do potencial da equação de Schrödinger.
- Compreender ou buscar melhor compreensão para a singularidade apresentada por Johri-Bhatt para o modelo de Anderson e também encontrada para as sequências caóticas com parâmetro ajustado para regiões mais caóticas.
- Compreensão, cálculo e comparação do expoente de Hurst (que é, de maneira geral, uma medida de correlação das sequências) dos mapas caóticos com o *IPR* e expoente de Lyapunov *Ly* (CHERAGHCHI et al., 2005).

# Referências

- ALLOUCHE, J.-P. Schrödinger operators with Rudin-Shapiro potentials are not palindromic. **Journal of Mathematical Physics**, v. 38, n. 4, p. 1843–1848, 1997. Citado na página 3.
- ANDERSON, P. W. Absence of diffusion in certain random lattices. **Physical Review**, v. 109, p. 1942–1958, 1958. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 9.
- ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. **Solid State Physics**. Philadelphia: Brooks-Cole, 1976. Citado 3 vezes nas páginas 2, 9 e 57.
- AWADHESH, P.; SURENDRA, S. N.; RAMAKRISHNA, R. Strange nonchaotic attractors. **International Journal of Bifurcation and Chaos**, v. 11, n. 2, p. 291 – 309, 2001. Citado 3 vezes nas páginas xi, 40 e 41.
- AXEL, F.; TERAUCHI, H. High-Resolution X-Ray-Diffraction Spectra of Thue-Morse GaAs-AlAs Heterostructures: Towards a Novel Description of Disorder. **Physical Review Letters**, v. 66, n. 17, p. 2223–2226, 1991. Citado na página 4.
- BELISSÁRIO, R. (Ed.). **Quase-cristais: do descrédito à tecnologia**. 2003. (2317-6660, 1). Disponível em: <[http://cienciaecultura.bvs.br/scielo.php?pid=S0009-67252003000100014&script=sci\\_arttext](http://cienciaecultura.bvs.br/scielo.php?pid=S0009-67252003000100014&script=sci_arttext)>. Citado na página 4.
- BRENNER, N.; FISHMAN, S. Pseudo-randomness and localization. **Nonlinearity**, v. 4, p. 211 – 235, 1992. Citado na página 21.
- CASTELLANI, C.; CASTRO, C. D.; PELITI, L. On the upper critical dimension in Anderson localization. **Journal Physics A**, v. 19, p. L1099 – L1103, 1986. Citado na página 49.
- CHERAGHCHI, H.; FAZELI, S. M.; ESFARJANI, K. Localization-delocalization transition in a one-dimensional system with long-range correlated off-diagonal disorder. **Physical Review B**, v. 72, p. 174207–1 – 174207–8, 2005. Citado na página 60.
- CUEVAS, E. Critical generalized inverse participation ratio distributions. **Physical Review B**, v. 66, p. 233101–1 – 233101–4, 2002. Citado 6 vezes nas páginas 5, 17, 49, 54, 55 e 59.
- CUEVAS, E.; ORTUNO, M.; GASPARIAN, V.; PEREZ-GARRIDO, A. Fluctuations of the correlation dimension at metal-insulator transitions. **Physical Review Letters**, v. 88, p. 016401–1 – 016401–4, 2002. Citado 3 vezes nas páginas 52, 55 e 59.
- DULEA, M.; JOHANSSON, M.; RIKLUND, R. Localization of electrons and electromagnetic waves in a deterministic aperiodic system. **Physical Review B**, v. 45, n. 1, p. 105–114, 1992. Citado na página 3.
- DULEA, M.; JOHANSSON, M.; RIKLUND, R. Trace-map invariant and zero-energy states of the tight-binding Rudin-Shapiro model. **Physical Review B**, v. 46, n. 6, p. 3296–3304, 1992. Citado na página 3.

DULEA, M.; JOHANSSON, M.; RIKLUND, R. Unusual scaling of the spectrum in a deterministic aperiodic tight-binding model. **Physical Review B**, v. 47, n. 14, p. 8547–8551, 1993. Citado na página 3.

EVERS, F.; MIRLIN, A. D. Fluctuations of the Inverse Participation Ratio at the Anderson Transition. **Physical Review Letters**, v. 84, n. 16, p. 3690–3693, 2000. Citado 3 vezes nas páginas 6, 18 e 59.

GONG, L.; WANG, H.; CHENG, W.; ZHAO, S. A measurement of disorder in binary sequences. **Physica A**, v. 422, p. 66–72, 2015. Citado na página 4.

HEAGY, J. F.; HAMMEL, S. M. The birth of strange nonchaotic attractors. **Physics D**, v. 70, p. 140 – 153, 1994. Citado na página 40.

HILBORN, R. C. **Chaos and Nonlinear Dynamics – An Introduction for Scientists and Engineers**. Oxford: Oxford University Press, 2000. Citado 4 vezes nas páginas 5, 10, 11 e 37.

IZRAILEV, F.; KROKHIN, A. A. Localization and the mobility edge in one dimensional potentials with correlated disorder. **Physical Review Letters**, v. 82, n. 20, p. 4062 – 4065, 1999. Citado 3 vezes nas páginas 29, 33 e 35.

IZRAILEV, F. M.; RUFF, S.; TESSIERI, L. Classical representation of the one-dimensional Anderson model. **Journal Physics A**, v. 31, p. 5263 – 5270, 1998. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 25.

JOHRI, S.; BHATT, N. Singular behavior of eigenstates in Anderson’s model of localization. **Physical Review Letters**, v. 109, p. 076402–1 – 076402–5, 2012. Citado 7 vezes nas páginas ix, xi, 5, 16, 43, 48 e 59.

KOHMOTO, M.; SUTHERLAND, B.; TANG, C. Critical wave functions and Cantor-set spectrum of a one-dimensional quasicrystal model. **Physical Review**, v. 35, n. 3, p. 1020 – 1033, 1987. Citado na página 3.

KREYSZIG, E. **Introductory Functional Analysis with Applications**. Daryaganj: Wiley, 1989. Citado 2 vezes nas páginas 2 e 3.

LUDLAM, J. J. **Localisation of the Vibrations of Amorphous Materials**. Tese (Doutorado) — Trinity College, Cambridge, UK, 2004. Citado na página 14.

MERLIN, R.; BAJEMA, K.; CLARKE, R.; JUANG, F.-Y.; BHATTACHARYA, P. K. Quasiperiodic GaAs-AlAs Heterostructures. **Physical Review Letters**, v. 55, n. 17, p. 1768–1770, 1985. Citado 3 vezes nas páginas 2, 3 e 4.

MIRLIN A. D.; EVERS, F. Multifractality and critical fluctuations at the Anderson transition. **Physical Review B**, v. 62, p. 7920–7933, 2000. Citado 3 vezes nas páginas 18, 49 e 59.

MIZOGUCHI, K.; MATSUTANI, K.; NAKASHIMA, S.; DEKORSY, T.; KURZ, H. Observation of coherent acoustic phonons in Fibonacci superlattices. **Physical Review B**, v. 55, n. 15, p. 9336–9339, 1997. Citado 2 vezes nas páginas 4 e 57.

MONTHUS, C.; GAREL, T. Anderson localization of phonons in dimension  $d = 1, 2, 3$ : Finite properties of the inverse participation ratios of eigenstates. **Physical Review B**, v. 81, p. 224208–1–224208–9, 2010. Citado 4 vezes nas páginas 14, 15, 26 e 58.

MURPHY, N. C.; WORTIS, R.; ATKINSON, W. A. Generalized inverse participation ratio as a possible measure of localization for interacting systems. **Physical Review B**, v. 83, p. 184206–1 – 184206–6, 2011. Citado 2 vezes nas páginas 5 e 15.

OH, G. Y.; LEE, M. H. Band-structural and Fourier-spectral properties of one-dimensional generalized Fibonacci lattices. **Physical Review B**, v. 48, n. 17, p. 12465–12477, 1993. Citado 3 vezes nas páginas 4, 10 e 57.

OLIVEIRA, C. R. Não publicado. 2002. Citado 2 vezes nas páginas 4 e 57.

OLIVEIRA, W. F. **Caracterização do Espectro e Autovetores do Operador de Schrödinger com Potenciais Caóticos**. Dissertação (Mestrado) — Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, 2012. Citado 6 vezes nas páginas 4, 15, 19, 52, 57 e 59.

PIÉCHON, F. Anomalous diffusion properties of wave packets on quasiperiodic chains. **Physical Review Letters**, v. 76, n. 23, p. 4372–4375, 1996. Citado na página 4.

PIÉCHON, F.; BENAKLI, M.; JAGANNATHAN, A. Analytical results for scaling properties of the spectrum of the Fibonacci chain. **Physical Review Letters**, v. 74, n. 26, p. 5248–5251, 1995. Citado 3 vezes nas páginas 4, 10 e 57.

PRIGODIN V.N.; ALTSHULER, B. Long-range spatial correlation of eigenfunctions in quantum disordered systems. **Physical Review Letters**, v. 80, p. 1944–1947, 1998. Citado 3 vezes nas páginas 18, 49 e 59.

ROY, C. L.; KHAN, A. Landauer resistance of Thue-Morse and Fibonacci lattices and some related issues. **Physical Review B**, v. 49, n. 21, p. 14979–14983, 1994. Citado 3 vezes nas páginas 4, 10 e 57.

ROY, C. L.; KHAN, A.; BASU, C. A study of Landauer resistance and related issues of the generalized Thue-Morse lattice. **Journal of Physics: Condensed Matter**, v. 7, p. 1843–1853, 1995. Citado 3 vezes nas páginas 4, 10 e 57.

RYU, C. S.; OH, G. Y.; LEE, M. H. Extended and critical wave functions in a Thue-Morse chain. **Physical Review B**, v. 46, n. 9, p. 5162–5168, 1992. Citado 2 vezes nas páginas 3 e 57.

RYU, C. S.; OH, G. Y.; LEE, M. H. Electronic properties of a tight-binding and a Kronig-Penney model of the Thue-Morse chain. **Physical Review B**, v. 48, n. 1, p. 132–141, 1993. Citado na página 10.

SCHECHTMAN D.; GRATIAS, D. C. J. N. Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry. **Physical Review Letters**, v. 53, p. 1951 – 1953, 1984. Citado na página 3.

SOUKOULIS, C. M.; ECONOMOU, E. N. Fractal character of eigenstates in disordered systems. **Physical Review Letters**, v. 52, n. 7, p. 565–568, 1984. Citado na página 3.

STEUER, R.; MOLGEDEY, L.; EBELING, W.; JIMÉNEZ-MONTANO, M. A. Entropy and optimal partition for data analysis. **The European Physical Journal B**, v. 19, p. 265–269, 2001. Citado na página 11.

YANO, C. **Quasicristais reconhecidos**. 2011. Disponível em: <[http://www.cienciahoje.org.br/noticia/v/ler/id/2445/n/quasicristais\\_reconhecidos](http://www.cienciahoje.org.br/noticia/v/ler/id/2445/n/quasicristais_reconhecidos)>. Citado na página 4.

# Anexos

# ANEXO A – Diagramas de Bifurcação

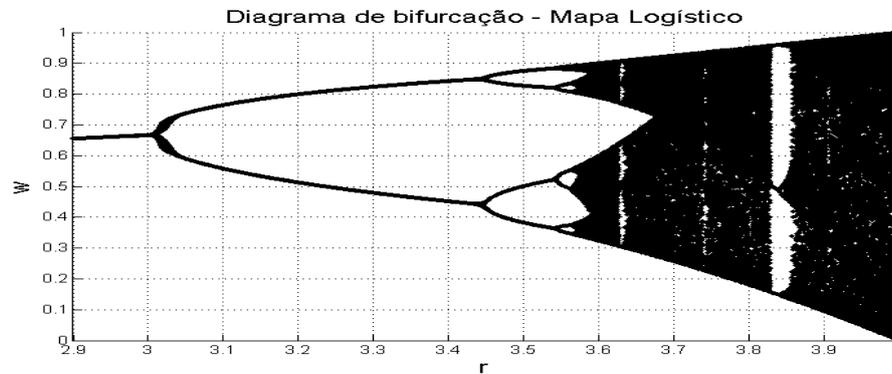


Figura 46 – Mapa de bifurcação para sequência logística.

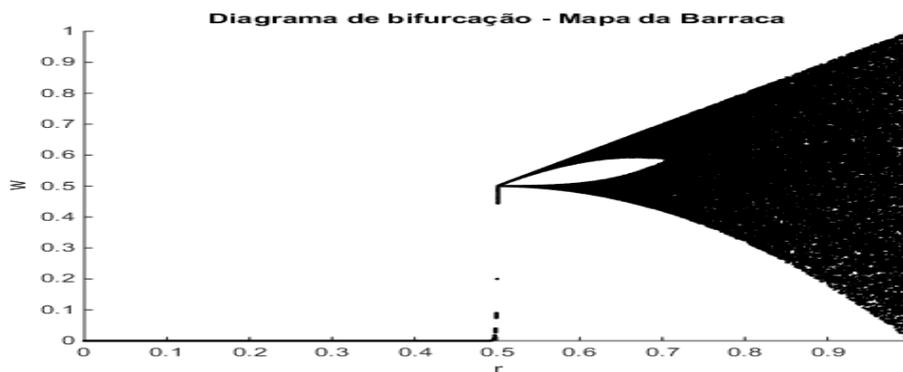


Figura 47 – Mapa de bifurcação para o mapa da barraca.

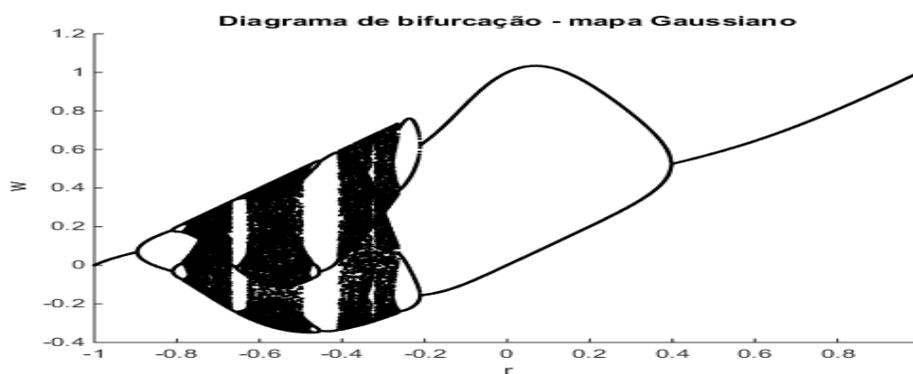


Figura 48 – Mapa de bifurcação para o mapa gaussiano.

# **ANEXO B – Trabalhos Publicados**

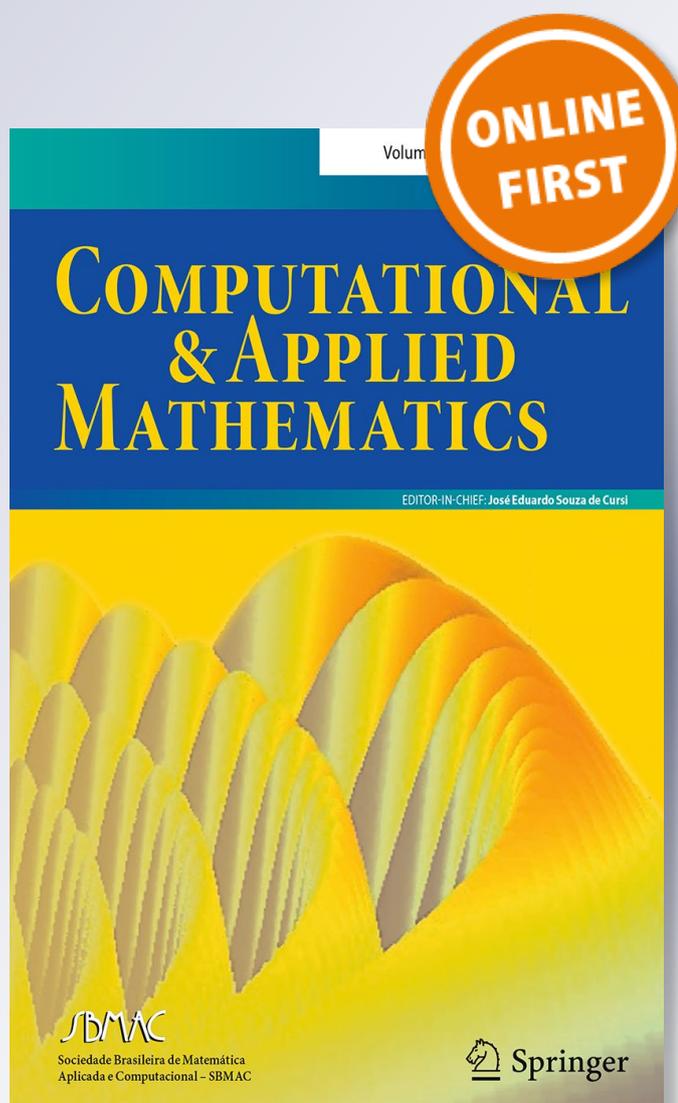
*Chaos-based potentials in the one-dimensional tight-binding model probed by the inverse participation ratio*

**Wesley Florentino de Oliveira & Giancarlo Queiroz Pellegrino**

**Computational and Applied Mathematics**

ISSN 0101-8205

Comp. Appl. Math.  
DOI 10.1007/s40314-017-0561-7



**Your article is protected by copyright and all rights are held exclusively by SBMAC - Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional. This e-offprint is for personal use only and shall not be self-archived in electronic repositories. If you wish to self-archive your article, please use the accepted manuscript version for posting on your own website. You may further deposit the accepted manuscript version in any repository, provided it is only made publicly available 12 months after official publication or later and provided acknowledgement is given to the original source of publication and a link is inserted to the published article on Springer's website. The link must be accompanied by the following text: "The final publication is available at [link.springer.com](http://link.springer.com)".**



## Chaos-based potentials in the one-dimensional tight-binding model probed by the inverse participation ratio

Wesley Florentino de Oliveira<sup>1,3</sup> ·  
Giancarlo Queiroz Pellegrino<sup>2</sup> 

Received: 11 September 2017 / Revised: 14 December 2017 / Accepted: 18 December 2017  
© SBMAC - Sociedade Brasileira de Matemática Aplicada e Computacional 2017

**Abstract** Chaos-based potentials are defined and implemented in the one-dimensional tight-binding model as a way of simulating disorder-controlled crystalline lattices. In this setting, disorder is handled with the aid of the chaoticity parameter. The inverse participation ratio (IPR) probes the response of the system to three different such potentials and shows consistent agreement with results given by the Lyapunov exponent  $L_y$ : the greater  $L_y(r)$  for the chaotic sequence as a function of the chaoticity parameter  $r$ , the greater the asymptotic value  $IPR(r)$  for the large-system ground state.

**Keywords** Aperiodic potentials · Tight-binding model · Inverse participation ratio · Lyapunov exponent

**Mathematics Subject Classification** Primary 81Q99

### 1 Introduction

Growing crystalline structures and new materials which would show previously desired properties—or avoid undesired ones—is a long-standing task. As a particular characteristic,

---

Communicated by Jose Alberto Cuminato.

✉ Giancarlo Queiroz Pellegrino  
giancarloqpellegrino@cefetmg.br  
Wesley Florentino de Oliveira  
wesley.florentino@ifnmg.edu.br

<sup>1</sup> Programa de Pós-graduação em Modelagem Matemática e Computacional, CEFET-MG-Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG, Brazil

<sup>2</sup> Departamento de Matemática, CEFET-MG-Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, Belo Horizonte, MG, Brazil

<sup>3</sup> Present Address: Departamento de Ensino, IFNMG-Instituto Federal do Norte de Minas Gerais, Pirapora, MG, Brazil

disorder is an inherent and mostly uncontrolled feature of natural materials. It is acceptedly one of the main responsible facts for resistivity, be it electrical, thermal, or signal resistivity; and its very notion is based on the randomness of its occurrence. Contrary to common sense, controlled disorder can be made an interesting property, although perhaps difficult to achieve. The advent of quasicrystals made a notable step towards disorder control, due to the possibility of using binary substitution sequences to guide deposition-based crystalline growth. Although disorder was not fully controlled, it could be classified as an ascending feature for different quasicrystals, i.e., different substitution sequences. Remarkably, the early and well-known chaotic maps can give rise to binary sequences where the disorder is controlled by their chaoticity parameter and even measured by their associated Lyapunov exponent. Here, such chaos-based sequences are constructed from three known maps—logistic, tent, and Gaussian maps—and used as potentials in the one-dimensional Schrödinger equation. It is seen that a system simulated in this way not only responds unambiguously to more or less disorder in the potential but also allows for a disorder control in an experimental realization.

*Outline.* The remainder of this article is organized as follows. Section 2 states the main ideas, scope, and objectives of this work. In Sect. 3, there appear the necessary definitions and model. Section 4 brings results and comments. In Sect. 5, we discuss the consistency of our proposals in comparison with results known for disordered potentials. A short Sect. 6 concludes this article.

## 2 Theory

Aperiodic sequences of different types have recently been used to simulate disordered one-dimensional crystalline structures, as potentials entering the Schrödinger equation. One of the main purposes of this effort is to simulate the physics of quasicrystals, which can be viewed as intermediate systems between the well-understood cases of periodic and disordered lattices. The latter ones are fairly well described by Bloch theorem and Anderson localization phenomenon, respectively. In the case of periodic potentials, the eigensolutions of the Schrödinger operator can be chosen to exhibit periodic absolute values (Ashcroft and Mermin 1976), thus providing good conducting properties. At the other extreme, one-dimensional disordered potentials afford localized probability densities and, in this way, insulating properties (Anderson 1958).

In the context of one-dimensional systems, quasicrystal issues have been addressed using almost-periodic substitution sequences to mimic the ordering of the atoms in a crystalline lattice (DiVincenzo and Steinhardt 1991; Axel and Gratias 1995). Substitution sequences and the properties of the Schrödinger operator have been extensively studied both from the theoretical (Queffélec 1987; Luck 1989; Dulea et al. 1992b, 1993; Ryu et al. 1992; Oh and Lee 1993; Piéchon et al. 1995; Oliveira and Pellegrino 1999) and the experimental (Merlin et al. 1985; Todd et al. 1986; Axel and Terauchi 1991; Mizoguchi et al. 1997) points of view. Some examples of these sequences are the early Fibonacci substitution sequence, as well as Thue–Morse, period-doubling, paper-folding, Rudin–Shapiro sequences, and others (Axel and Gratias 1995). The main interests in these studies are the physical transport properties (Dulea et al. 1992a; Iochum et al. 1992; Ryu et al. 1993; Roy and Khan 1994; Katsanos et al. 1995; Roy et al. 1995; Piéchon 1996; Roche and Mayou 1997; Salejda and Szyzszak 1998; Pellegrino 2001) and the mathematical spectral types (Queffélec 1987; Bovier and Ghez 1995; Allouche 1997) of the corresponding Schrödinger operators.

The almost-periodic sequences cited above have no definite period and appear as intermediate cases between periodic and disordered structures. Although these substitution sequences could be classified in a hierarchy of ascending disorder (Pellegrino 2001; Steuer et al. 2001; Gong et al. 2015), this is a static classification, since each sequence is generated by a fixed iteration rule. It would be greatly desirable both for the physical and mathematical possibilities to have a variable disorder, eventually controlled by a continuous variation of a parameter. This is the main purpose of this article. We start exploring here the properties of the Schrödinger operator triggered by a new type of possibly disorder-controlled potential, which will be based on iteration maps appearing in Chaos Theory (Hilborn 2000) (hereafter called chaotic potentials).<sup>1</sup> As it is well known those maps are not periodic in the chaotic region, and chaoticity can be controlled by a continuous parameter  $r$  and measured by a Lyapunov exponent (Hilborn 2000).

To that end, our main probing tool will be the Inverse Participation Ratio (IPR) of a given eigenvector of the Schrödinger operator. This ratio is a real number defined and used in Solid State Theory to characterize localization–delocalization transitions and their consequences to the transport properties (Evers and Mirlin 2000; Ludlam 2004; Monthus and Garel 2010; Murphy et al. 2011). It will be seen that IPR for the ground-state eigenvector, as a function of the chaoticity parameter, shows very good agreement with the structure of chaotic regions and periodicity windows characteristic of these chaotic maps. In this way, one could seek to control the effects of the disorder in the potential sequence appearing in the Schrödinger operator just by varying the chaoticity parameter.

### 3 Definitions and model

#### 3.1 The tight-binding model

We consider here the time-independent Schrödinger operator in the tight-binding approximation

$$(H\psi)_n = \psi_{n+1} + \psi_{n-1} + V_n\psi_n, \quad (1)$$

where one assumes the potential  $V$ , created by a lattice of atoms placed at positions  $n$ , to be concentrated in the regions close to the atoms, being negligible in the regions between them (Ashcroft and Mermin 1976; Oliveira and Pellegrino 1999). In this approximation, the eigenfunctions are given by the values  $\psi_n$  at sites  $n$ , when subjected to a potential with values  $V_n$ . In this model, one easily switches different potentials just by choosing appropriate sequences of real numbers  $\{V_n\}_{n=1}^{\infty}$ .

#### 3.2 Chaotic sequences and potentials

The sequences to be used as potentials in Eq. (1) will be obtained from three iteration maps  $w_{n+1} = f_r(w_n)$  commonly encountered in Chaos Theory (Hilborn 2000), namely

- the logistic map

$$w_{n+1} = r w_n (1 - w_n) \quad r \in [3.4, 4.0] \quad (2)$$

- the tent map

$$w_{n+1} = r \left( 1 - 2 \left| w_n - \frac{1}{2} \right| \right) \quad r \in [0.4, 1.0] \quad (3)$$

<sup>1</sup> To the best of the authors' knowledge, this was first proposed by C. R. de Oliveira (personal communication, 2002).

- the Gaussian map

$$w_{n+1} = e^{-bw_n^2} + r \quad r \in [-1, 0.1] \quad (4)$$

In all these maps,  $r$  is a continuous parameter which controls in a sense the chaoticity of the map. In the expressions above, the intervals are chosen to cover the regions of chaos and periodicity of the maps. For the sake of the point we want to make, plots for these maps will appear in the next section along with our results. It suffices to state here that, for  $r$  in the chaotic regions, these sequences neither have definite period nor are completely random, once they are constructed with fixed rules. Chaoticity, which will give us the desired disorder, is incremented by going deeper into the chaotic region and is measured by the corresponding Lyapunov exponent (Hilborn 2000)

$$\text{Ly}(r) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \ln |f'_r(w_n)|. \quad (5)$$

To allow an easier comparison with results found in the literature for almost-periodic substitution potentials, and also to set an experimental perspective based on crystal growing (Axel and Terauchi 1991), we take here binary chaotic potentials as given by

- $V_n = 1$  if  $w_n \leq 0.5$  and  $V_n = 2$  if  $w_n > 0.5$  in the cases of logistic and tent maps;
- $V_n = 1$  if  $w_n \leq 0$  and  $V_n = 2$  if  $w_n > 0$  in the case of the Gaussian map.

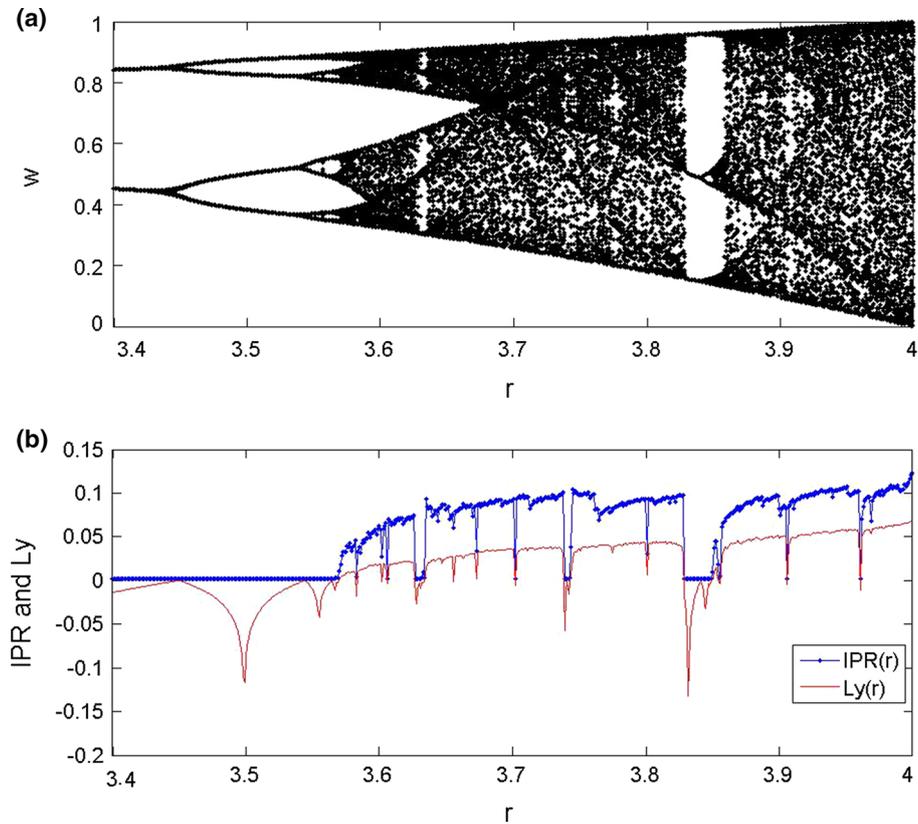
The Lyapunov exponent, as given by Eq. (5), is not directly applicable to these binary sequences (Steuer et al. 2001; Gong et al. 2015). It is, however, remarkable the fact that the Inverse Participation Ratio, to be defined in the following, captures indeed the features of that exponent even after the transposition to the corresponding binary sequence. Details of this accordance will be seen in the next section.

### 3.3 Inverse participation ratio

Perhaps the most conspicuous effect of a one-dimensional random potential is the localization of the wavefunctions, solutions of the Schrödinger equation, within finite regions in space (Anderson 1958; Kramer and MacKinnon 1993). At the other extreme, periodic potentials give rise to wavefunctions which are extended over the lattice (Ashcroft and Mermin 1976). The Inverse Participation Ratio of a given wavefunction, defined as a function of the system size  $N$  by

$$\text{IPR}(N) = \left[ \frac{\sum_{n=1}^N |\psi_n|^4}{\left(\sum_{n=1}^N |\psi_n|^2\right)^2} \right]^{-1}, \quad (6)$$

reflects the regions where the wavefunction has appreciable amplitudes and, therefore, its distribution over the lattice (Evers and Mirlin 2000; Ludlam 2004; Monthus and Garel 2010; Murphy et al. 2011). In this way, one can verify that  $\text{IPR}(N)$  tends to zero as  $1/N$  for large enough system sizes  $N$  in the case of periodic potentials. For the random case,  $\text{IPR}(N)$  attends a constant value  $k > 0$  as  $N$  goes to infinity (Ludlam 2004; Monthus and Garel 2010). Aperiodic potentials, such as the almost-periodic substitution potentials, are expected to fall between these extreme cases (Oliveira and Pellegrino 2014). The large- $N$  values of  $\text{IPR}(N)$  could, therefore, probe the effect of a greater or smaller disorder in the potentials; the higher the asymptotic value of  $\text{IPR}(N)$ , the greater the disorder of the potential. Here, we take the eigenvector associated with the lowest energy eigenvalue for the Schrödinger operator and calculate its large- $N$  value for IPR. This asymptotic value, being a function of the parameter



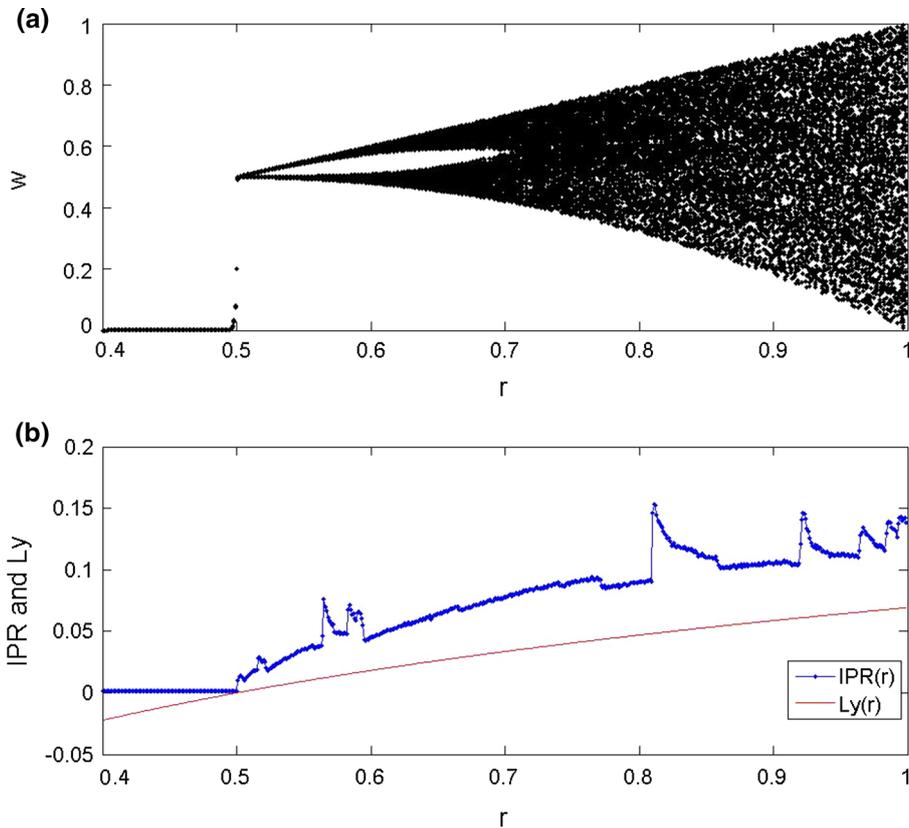
**Fig. 1** Logistic map. **a** Bifurcation diagram for  $r \in [3.4, 4.0]$ . **b**  $IPR(r)$  and  $Ly(r)$  multiplied by 0.1 for better viewing

$r$ , will be denoted here simply  $IPR(r)$ . This will be our probing tool in order to see whether chaotic potentials, as defined here, could provide a way in which disorder is implemented in a more controlled procedure, as compared to other known aperiodic potentials.

#### 4 Results

In Figs. 1, 2 and 3, we show in plots (a) the original chaotic maps for different values of  $r$ , prior to the conversion into binary sequences. In plots (b), there appear the Lyapunov exponents for the original sequences and the average asymptotic large- $N$  values  $IPR(r)$  for the corresponding binary sequences. In all these plots, we use sequences of size  $N = 1000$  and in the calculation of  $IPR(r)$  we take averages over the results for 500 realizations of the sequences with different initial seeds  $w_0$ .

In plots (a), we see the characteristic features of these chaotic maps, with regions of chaos and, eventually, windows of periodicity. We have chosen these three maps due to their different routes to chaos. The logistic map undergoes a sequence of period-doublings for its fixed points until entering a region of chaos at  $r \approx 3.6$ . This chaotic behavior is observed up to  $r = 4.0$ , with periodicity windows appearing at precise values of  $r$ . For the



**Fig. 2** Tent map. **a** Bifurcation diagram for  $r \in [0.4, 1.0]$ . **b**  $IPR(r)$  and  $Ly(r)$  multiplied by 0.1 for better viewing

tent map, the behavior is quite different, the sequence entering directly the chaotic region without passing a period-doubling transition. Finally, for the Gaussian map, we see the period-doubling transition to chaos, as in the case of the logistic map, but also a period-undoubling transition back to periodicity. The corresponding plots in (b) show that  $IPR(r)$  accompanies this structure, with positive values for  $r$  in the chaotic regions and vanishing values for  $r$  in the periodicity windows.

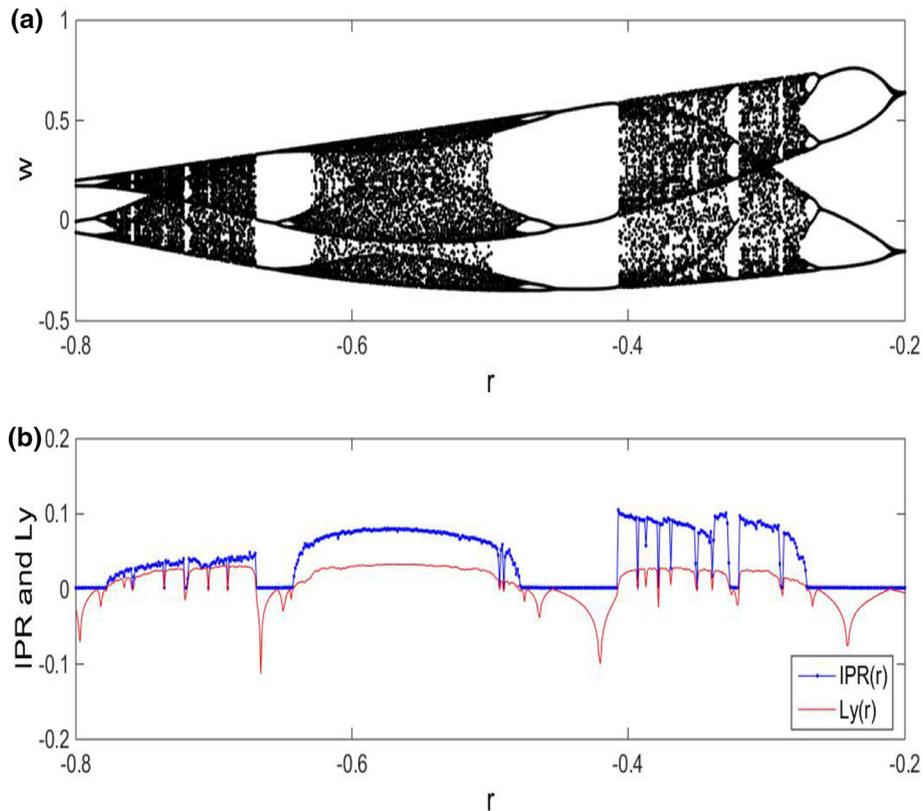
This agreement is in fact remarkably emphasized by the comparison between  $IPR(r)$  and the Lyapunov exponent  $Ly(r)$ , both shown in plots (b). Expression (5) yields corresponding forms for the Lyapunov exponents associated with the original maps studied here (Eqs. 2–4):

- for the logistic map

$$Ly(r) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \ln |r(1 - 2w_n)| \tag{7}$$

- for the tent map

$$Ly(r) = \ln |2r| \tag{8}$$



**Fig. 3** Gaussian map. **a** Bifurcation diagram for  $r \in [-1.0, -0.1]$ . **b**  $IPR(r)$  and  $Ly(r)$  multiplied by 0.1 for better viewing

- for the Gaussian map

$$Ly(r) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \ln |2bw_n e^{-bw_n^2}| \quad (9)$$

In the regions where  $Ly(r) \leq 0$ ,  $IPR(r)$  vanishes as well, pointing out a periodicity window. On the other hand,  $Ly(r)$  is positive in the regions of chaotic behavior, a feature captured by  $IPR(r)$ . Moreover, one can see that  $IPR(r)$  increases smoothly as the maps undergo the bifurcation process, and drops down abruptly when the maps enter a periodicity window. This behavior can be seen, for example, at  $r \approx 3.83$  for the logistic map, or at  $r \approx -0.4$  for the Gaussian map. On the other hand, one observes some abrupt jumps in the IPR curve for the tent map, which are apparently not associated with a particular behavior of the corresponding map. The wavefunction for these values of the chaoticity parameter, however, shows accordingly a more localized distribution. This is suggestive of a consistent estimative, via  $IPR(r)$ , of the response of the system to the disorder of the potential. In references (Pellegrino 2001; Gong et al. 2015), it is pointed out that different approaches in order to produce a hierarchy of disorder for aperiodic sequences frequently end at inconsistent results.

We stress the fact that this consistent agreement between  $Ly(r)$  and  $IPR(r)$  is seen here despite the conversion of the original sequences into binary ones,  $Ly(r)$  being directly calculated for the former and  $IPR(r)$  being indirectly calculated for the ground state generated by the latter ones. This agreement is found also for the excited states, with the same overall behavior of  $IPR$ . In the next section, we give more details on this point.

## 5 Discussion

Much work on disordered potentials in one-dimensional tight-binding models has been done in the last decades. Since the potentials proposed here are less studied, we compare our results with those ones known for disordered potentials, in order to check for the consistency of  $IPR$  as indicative of the effects of randomness.

The correlation between the ratio  $IPR$  and the Lyapunov exponent  $Ly$  of the sequences which generate these chaotic potentials is clearly seen in Fig. 4, where we plot the varying of  $IPR(r)$  with  $Ly(r)$ . In fact, wherever  $Ly > 0$  one has  $IPR > 0$ . Also,  $IPR$  increases on average with the increase of  $Ly$ . For logistic and Gaussian potentials, the many-valued character of  $IPR$  is due to the periodicity windows in the original maps, where  $Ly$  goes back to negative values and reincreases with the next period-doubling process, followed by  $IPR$  which goes back to zero and reincreases jointly. In this respect, the tent map shows a neat single-valued aspect, since there are no periodicity windows above the chaos threshold. In a situation where one would seek controlled disordered, the corresponding tent potential could be a good choice.

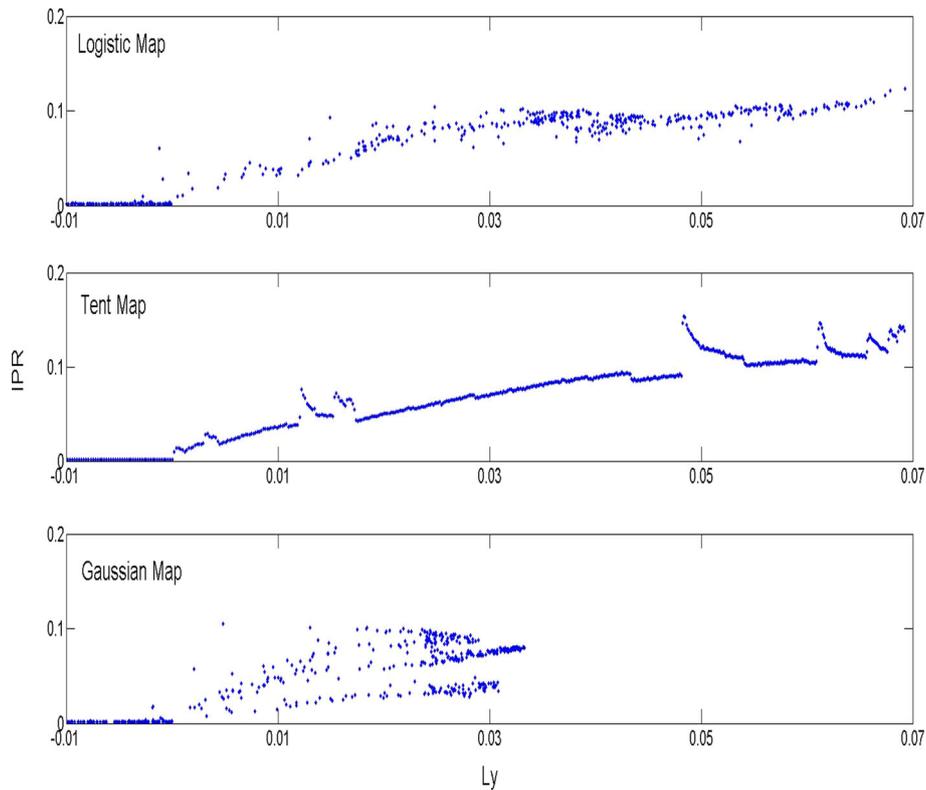
For potentials with increasing randomness, the energy-band structure seen for periodic potential is gradually destroyed. It is known that, in this process, the eigenstates associated with band-edge energies are more localized than those associated with band-center energies. This delocalization feature is also captured by the inverse participation ratio, eigenstates with greater  $IPR$  being more localized. We verified that this agreement is found for the excited states all along the spectrum, and we illustrate it with the logistic potential in the chaotic region ( $r = 4$ ). In Fig. 5, we show the inverse participation ratio  $IPR$  for all the eigenstates. The central region of the spectrum has on average eigenstates with lower values for  $IPR$ . From these results, we choose three eigenstates ( $k = 101, 510, 511$ ), and plot in Fig. 6 the corresponding probability densities  $|\psi_k|^2$  over the lattice. It is seen that even small variations of  $IPR$  indicate corresponding variations in the localization length of states.

In this work, chaotic maps were intentionally chosen due to their intricate dynamics, which provided the desired disorder, and to the positive Lyapunov exponents in chaotic regions, which provided the desired control. Nonetheless, there is a whole class of systems, so-called strange nonchaotic attractors (SNA) (Grebogi et al. 1984), which present a fractal nature, with complicated dynamics, but for which all the Lyapunov exponents are either zero or negative. It would be interesting to test the behavior of the participation ratio  $IPR$  for tight-binding solutions generated by binary sequences built from such attractors. In what follows, as an example, we take the quasiperiodically forced logistic map (Heagy and Hammel 1994; Prasad et al. 1997, 2001) given by

$$w_{n+1} = r [1 + \epsilon \cos(2\pi\theta_n)] w_n (1 - w_n) \quad (10)$$

$$\theta_{n+1} = \theta_n + \phi \pmod{1}, \quad (11)$$

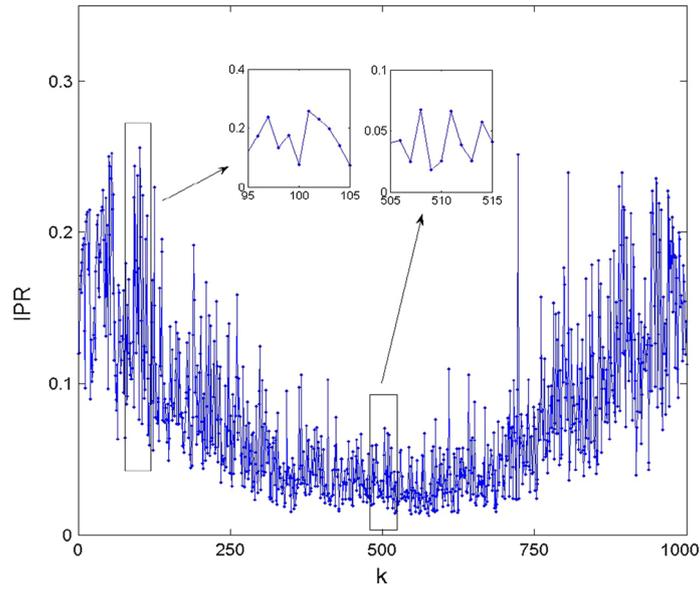
where  $\phi$  is an irrational number (we take the golden mean  $\phi = (\sqrt{5} - 1)/2$ ), and the usual restriction  $0 \leq r \leq 4$  imposes  $0 \leq \epsilon \leq (4/r - 1)$ . It was shown that for  $\epsilon' =$



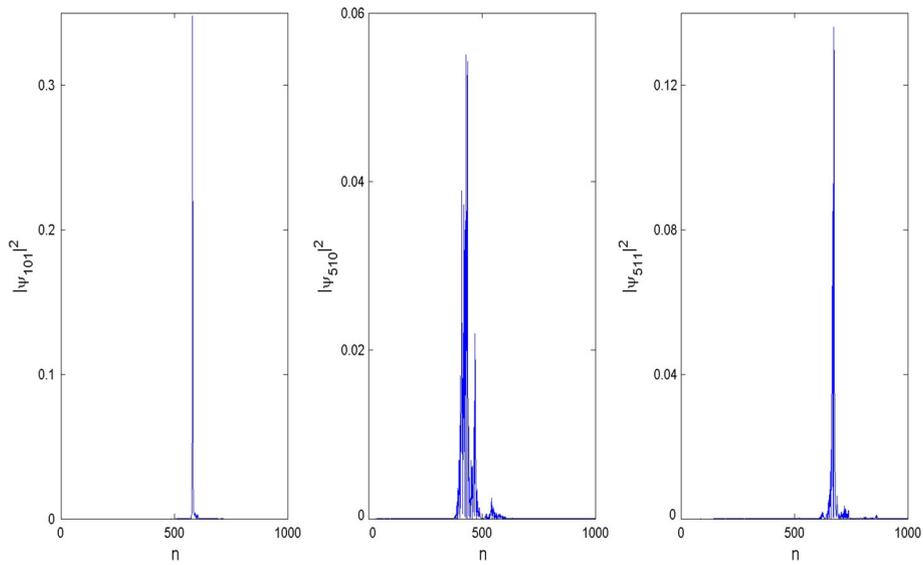
**Fig. 4** Correlation between Ly and IPR, both obtained as functions of the chaoticity parameter  $r$

$r \in (4 - r) = 0.95$  this system has an SNA behavior in the approximate interval  $2.75 \leq r \leq 3$ . For  $r$  far below this interval, one has (quasi)periodic dynamics, which becomes more and more complicated as  $r$  approaches the SNA region. For  $r > 3$ , one has two regions of chaotic behavior separated by a narrow (quasi)periodic region around  $r \approx 3.4$ . In Fig. 7, we can see that the inverse participation ratio  $IPR(r)$  signals all these features. We take as an example a center-band delocalized eigenstate,  $\psi_{300}$ .  $IPR(r)$  presents small values for  $r$  in the periodic region near  $r = 2$  and attains increasing values as  $r$  approaches the SNA region and the dynamics becomes more complicated. Even in the SNA region, where the (largest) Lyapunov exponent  $Ly(r) = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \ln |r [1 + \epsilon \cos(2\pi\theta_n)] (1 - 2w_n)|$  oscillates slightly around zero,  $IPR(r)$  correctly points the intricateness of the dynamics, with a corresponding localization process of the eigenstate (not shown here). It could be interesting to note that this result corroborates in a sense the choice of chaotic maps as a recipe for controlled disorder since, then, the vanishing IPR in periodic regions clearly distinguishes it from the chaos-given disordered behavior with  $IPR(r) > 0$ .

Finally, we just mention that, although it is known that the strength of the potential influences the localization properties of the eigenstates, the inverse participation ratio consistently keeps the agreement seen in the cases presented here. We have checked this consistency for different values of the potential amplitude  $V_n$  in the interval  $[0, 1]$ .



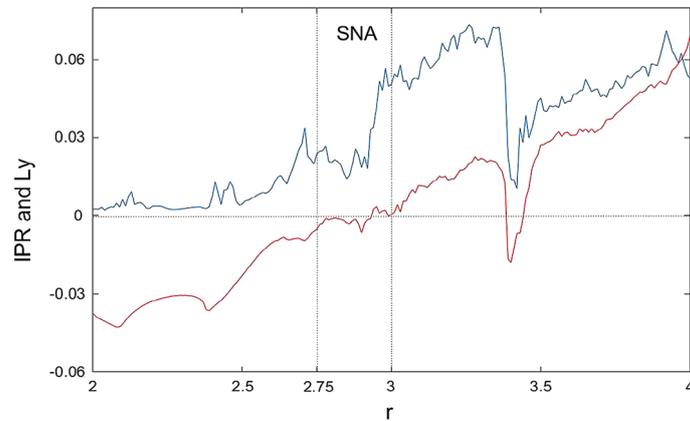
**Fig. 5** Inverse participation ratio of all the eigenstates  $\psi_k$  for the logistic potential with  $r = 4.0$ . In the boxes, there appear the choices used in Fig. 6



**Fig. 6** Logistic map. Probability density distributions over the lattice sites  $n$  for the eigenstates  $\psi_{101}$ ,  $\psi_{510}$ , and  $\psi_{511}$

## 6 Conclusion

In this work, we have proposed the use of new binary sequences, based on three different chaotic maps, as a way of introducing variable-disordered potentials in the Schrödinger



**Fig. 7** Forced logistic map.  $IPR(r)$  and  $Ly(r)$  multiplied by 0.1 for better viewing. Dotted guiding lines mark zero for  $IPR$  and  $Ly$ , and the approximate SNA region

operator. We have seen that the large- $N$  value of the Inverse Participation Ratio ( $IPR(r)$ ) for the ground-state of the Schrödinger operator, as a function of the chaoticity parameter  $r$ , correctly indicates the windows of periodicity and the regions of chaos pointed out by the Lyapunov exponents  $Ly(r)$ . Moreover, we have seen in Figs. 1, 2 and 3b that  $IPR(r)$  follows the increasing (decreasing) behavior of  $Ly(r)$ , providing a measure of chaoticity and disorder for the binary sequences, where the Lyapunov exponent is not directly applicable.

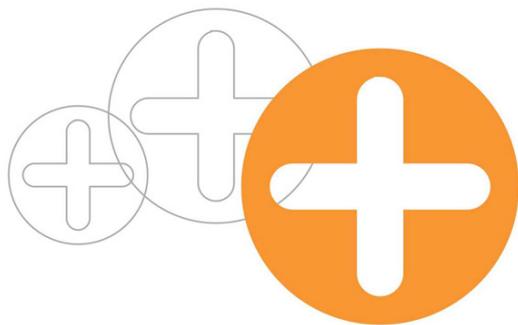
Finally, we mention that the techniques of growing superlattices by epitaxy (Axel and Terauchi 1991) could in principle be applicable to the chaotic potentials considered in this work. Experimental, and eventually technological, exploration of systems based on these chaotic potentials could then be considered.

**Acknowledgements** The authors thank sincerely Luciano Coutinho dos Santos and Luiz Argel Poveda Calvino for discussions on nonchaotic attractors. Also, the authors thank very much the anonymous Referees for their invaluable advice.

## References

- Allouche J-P (1997) Schrödinger operators with Rudin–Shapiro potentials are not palindromic. *J Math Phys* 38(4):1843–1848
- Anderson PW (1958) Absence of diffusion in certain random lattices. *Phys Rev* 109:1942–1958
- Ashcroft NW, Mermin ND (1976) *Solid state physics*. Brooks-Cole, Pacific Grove
- Axel F, Gratias D (eds) (1995) *Beyond quasicrystals*. Les Editions de Physique and Springer-Verlag
- Axel Françoise, Terauchi Hiraku (1991) High-resolution X-ray-diffraction spectra of Thue–Morse GaAs–AlAs heterostructures: towards a novel description of disorder. *Phys Rev Lett* 66(17):2223–2226
- Bovier Anton, Ghez Jean-Michel (1995) Remarks on the spectral properties of tight-binding and Kronig–Penney models with substitution sequences. *J Phys A Math Gen* 28:2313–2324
- DiVincenzo DP, Steinhardt P (eds) (1991) *Quasicrystals: the state of the art*. World Scientific Publishing Co.,
- Dulea Mihnea, Johansson Magnus, Riklund Rolf (1992a) Localization of electrons and electromagnetic waves in a deterministic aperiodic system. *Phys Rev B* 45(1):105–114
- Dulea Mihnea, Johansson Magnus, Riklund Rolf (1992b) Trace-map invariant and zero-energy states of the tight-binding Rudin–Shapiro model. *Phys Rev B* 46(6):3296–3304
- Dulea Mihnea, Johansson Magnus, Riklund Rolf (1993) Unusual scaling of the spectrum in a deterministic aperiodic tight-binding model. *Phys Rev B* 47(14):8547–8551

- Evers F, Mirlin AD (2000) Fluctuations of the inverse participation ratio at the Anderson transition. *Phys Rev Lett* 84(16):3690–3693
- Gong L, Wang H, Cheng W, Zhao S (2015) A measurement of disorder in binary sequences. *Phys A* 422:66–72
- Grebogi Celso, Ott Edward, Pelikan Steven, Yorke James A (1984) Strange attractors that are not chaotic. *Phys D* 13:261–268
- Heagy JF, Hammel SM (1994) The birth of strange nonchaotic attractors. *Phys D* 70:140–153
- Hilborn RC (2000) *Chaos and nonlinear dynamics—an introduction for scientists and engineers*. Oxford University Press, Oxford
- Iochum B, Raymond L, Testard D (1992) Resistance of one-dimensional quasicrystals. *Phys A* 187:353–368
- Katsanos DE, Evangelou SN, Xiong SJ (1995) Quantum electron dynamics in periodic and aperiodic sequences. *Phys Rev B* 51(2):895–904
- Kramer Bernhard, MacKinnon Angus (1993) Localization: theory and experiment. *Rep Prog Phys* 56:1469–1564
- Luck JM (1989) Cantor spectra and scaling of gap widths in deterministic aperiodic systems. *Phys Rev B* 39(9):5834–5849
- Ludlam Jonathan J (2004) *Localisation of the Vibrations of Amorphous Materials*, Ph.D. thesis, Trinity College, Cambridge, UK
- Merlin R, Bajema K, Clarke Roy, Juang F-Y, Bhattacharya PK (1985) Quasiperiodic GaAs-AlAs heterostructures. *Phys Rev Lett* 55(17):1768–1770
- Mizoguchi Kohji, Matsutani Kei, Nakashima Shinichi, Dekorsy Thomas, Kurz Heinrich (1997) Observation of coherent acoustic phonons in Fibonacci superlattices. *Phys Rev B* 55(15):9336–9339
- Monthus C, Garel T (2010) Anderson localization of phonons in dimension  $d = 1, 2, 3$ : Finite properties of the inverse participation ratios of eigenstates. *Phys Rev B* 81:224208-1–224208-9
- Murphy NC, Wortis R, Atkinson WA (2011) Generalized inverse participation ratio as a possible measure of localization for interacting systems. *Phys Rev B* 83:184206-1–184206-6
- Oh GY, Lee MH (1993) Band-structural and Fourier-spectral properties of one-dimensional generalized Fibonacci lattices. *Phys Rev B* 48(17):12465–12477
- Oliveira CR, Pellegrino GQ (1999) Quantum return probability for substitution potentials. *J Phys A Math Gen* 32:L285–L292
- Oliveira WF, Pellegrino GQ (2014) Characterization of spectrum and eigenvectors of the Schrödinger operator with chaotic potentials. *Trends Appl Comput Math* 15(2):203–209
- Pellegrino Giancarlo Queiroz (2001) Persistent current and Drude weight in one-dimensional rings with substitution potentials. *J Phys Condens Matter* 13:8121–8134
- Piéchon Frédéric (1996) Anomalous diffusion properties of wave packets on quasiperiodic chains. *Phys Rev Lett* 76(23):4372–4375
- Piéchon Frédéric, Benakli Mourad, Jagannathan Anuradha (1995) Analytical results for scaling properties of the spectrum of the Fibonacci chain. *Phys Rev Lett* 74(26):5248–5251
- Prasad Awadhesh, Mehra Vishal, Ramaswamy Ramakrishna (1997) Intermittency route to strange nonchaotic attractors. *Phys Rev Lett* 79(21):4127–4130
- Prasad Awadhesh, Negi Surendra Singh, Ramaswamy Ramakrishna (2001) Strange nonchaotic attractors. *Int J Bifurcation Chaos* 11(2):291–309
- Queffélec M (1987) *Substitution dynamical systems—spectral analysis*. Lecture Notes in Mathematics, vol. 1924, Springer-Verlag
- Roche S, Mayou D (1997) Conductivity of quasiperiodic systems: a numerical study. *Phys Rev Lett* 79(13):2518–2521
- Roy CL, Khan Arif (1994) Landauer resistance of Thue–Morse and Fibonacci lattices and some related issues. *Phys Rev B* 49(21):14979–14983
- Roy CL, Khan Arif, Basu Chandan (1995) A study of Landauer resistance and related issues of the generalized Thue–Morse lattice. *J Phys Condens Matter* 7:1843–1853
- Ryu CS, Oh GY, Lee MH (1992) Extended and critical wave functions in a Thue–Morse chain. *Phys Rev B* 46(9):5162–5168
- Ryu CS, Oh GY, Lee MH (1993) Electronic properties of a tight-binding and a Kronig–Penney model of the Thue–Morse chain. *Phys Rev B* 48(1):132–141
- Salejda Włodzimierz, Szyszyk Paweł (1998) The Landauer conductance of generalised Fibonacci superlattices. Numerical results. *Phys A* 252:547–564
- Steuer R, Molgedey L, Ebeling W, Jiménez-Montano MA (2001) Entropy and optimal partition for data analysis. *Eur Phys J B* 19:265–269
- Todd J, Merlin R, Clarke Roy, Mohanty KM, Axe JD (1986) Synchrotron X-ray study of a Fibonacci Superlattice. *Phys Rev Lett* 57(9):1157–1160



XX ENMC  
ENCONTRO NACIONAL DE  
MODELAGEM COMPUTACIONAL

VIII ECTM  
ENCONTRO DE CIÊNCIA E  
TECNOLOGIA DE MATERIAIS



16 a 19 de Outubro de 2017  
Instituto Politécnico - Universidade do Estado de Rio de Janeiro  
Nova Friburgo - RJ

## SEQUÊNCIAS PENEPERIÓDICAS NO OPERADOR DE SCHRÖDINGER UNIDIMENSIONAL: UMA ANÁLISE MULTIFRACTAL

Wesley Florentino de Oliveira - wesley.florentino@ifnmg.edu.br

Giancarlo Queiroz Pellegrino - giancarlo@des.cefetmg.br

Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais - CEFET-MG. Belo Horizonte, MG, Brasil.

**Abstract.** *O presente trabalho apresenta uma análise multifractal dos estados fundamentais de sistemas obtidos a partir de potenciais gerados por sequências penepериódicas na equação de Schrödinger unidimensional independente do tempo. As dimensões fractais são geradas a partir de uma relação direta com o Inverso do Número de Participação Generalizado, o GIPR e são comparadas a partir das curvas obtidas por potenciais periódico e aleatório. É possível perceber que o resultado é compatível com o obtido na literatura e que as curvas assintóticas de dimensão fractal apresentam comportamento intermediário aos obtidos pelos casos extremos. Acredita-se que essa compatibilidade com a literatura existente seja um bom sinal quanto à utilidade desta análise para se obter informações do sistema.*

**Keywords:** *Dimensão multifractal, Sequências penepериódicas, Quase-cristais.*

### 1. INTRODUÇÃO

Uma maneira de se gerar quase-cristais unidimensionais consiste no ordenamento dos átomos da rede cristalina utilizando-se regras de iteração. De modo geral, a ideia consiste em simular o potencial da equação de Schrödinger unidimensional independente do tempo a partir de sequências numéricas, mais precisamente, as penepериódicas. Essas sequências apresentam uma regra de criação bem definida mas não possuem período finito (Latado, 2011). Muitos artigos (Merlin et al., 1985) (Mizoguchi et al., 1997) (Oh & Lee, 1993) (Schechtman & Gratias & Cahn, 1984) (Steuer et al., 2001) (Todd et al., 1986) apresentam estudos sobre as propriedades de condutividade dos materiais gerados por tais sequências e muito se sabe sobre as características gerais desses materiais.

A maneira mais usual de se analisar as propriedades da rede unidimensional gerada pelos potenciais penepериódicos é a partir da análise do decaimento da densidade de probabilidade  $|\psi|^2$ . No extremo periódico, temos um material com estrutura ordenada que apresenta boa condutividade e um decaimento de  $|\psi|^2$  não persistente. Em outras palavras, a partícula tem probabilidade considerável de ser encontrada em toda a extensão da rede (Ashcroft & Mermin, 1976). Já no extremo aleatório, temos uma estrutura não-ordenada que apresenta comportamento isolante e apresenta um decaimento de  $|\psi|^2$  do tipo exponencial, ou seja, a partícula

está confinada em uma região finita da rede (Anderson, 1958). As sequências peneperiódicas apresentam comportamento intermediário e decaimento do tipo algébrico.

Uma alternativa ao decaimento de  $|\psi|^2$  como instrumento de análise é o Inverso do Número de Participação (IPR) em função do tamanho do sistema  $N$ . Esta medida nos dá a participação dos sítios na função de onda  $\Psi$  e é calculada a partir da seguinte definição

$$IPR(N) = \rho^{-1} = \frac{\sum_{i=1}^N |\psi_i|^4}{\left(\sum_{i=1}^N |\psi_i|^2\right)^2} \quad (1)$$

Segundo Cecile Monthus (Monthus & Garel, 2010), o IPR de potenciais periódicos decai para zero enquanto o IPR de potenciais aleatórios estabiliza em uma constante positiva. Já é sabido que o IPR é uma boa alternativa ao decaimento de  $|\psi|^2$  (Oliveira, 2012) e muitos trabalhos o utilizam como um classificador para os materiais gerados por sequências peneperiódicas (Murphy et al., 2011) (Monthus & Garel, 2010) (Evers & Mirlin, 2000).

Uma generalização também utilizada para o IPR é dada por

$$GIPR(N) = \rho_q^{-1} = \frac{\sum_{i=1}^N |\psi_i|^{2q}}{\left(\sum_{i=1}^N |\psi_i|^2\right)^q} \quad (2)$$

e chamada de GIPR. Observe que para se obter a definição 1, basta substituir  $q = 2$  na equação 2. O GIPR traz características específicas do sistema (Murphy et al., 2011).

Uma das importantes contribuições feitas pelo GIPR é a análise fractal dos autovetores do sistema. No modelo de Anderson, as autofunções podem ser vistas como distribuições multifractais, com suas várias dimensões  $d_q$ . Sabe-se (Cuevas, 2002) que o GIPR está relacionado com a dimensão fractal  $d_q$  associada a uma autofunção da seguinte maneira:

$$GIPR(q) = \int_{\Omega} d^d r |\psi(r)|^{2q} \propto L^{-d_q(q-1)} \quad (3)$$

Onde  $d_q$  é a dimensão fractal associada à autofunção e  $\Omega$  denota a região d-dimensional com dimensão linear  $L$ .

De modo geral, pode-se perceber que a relação direta entre o GIPR e a dimensão fractal do autovetor  $\psi$ , a partir do coeficiente angular da reta gerada pelo ajuste de curva do tipo  $b - ax$ , é dada da seguinte maneira: a dimensão fractal  $d_q$  é dada pelo coeficiente angular  $a = (q - 1)d_q$  (ou  $d_q = \frac{a}{q-1}$ ).

O presente trabalho tem como objetivo analisar as dimensões fractais associadas aos autovetores de sistemas gerados por potenciais peneperiódicos na equação de Schrödinger unidimensional independente do tempo. Essa análise pode ajudar a compreender as propriedades de transmissão dessas estruturas e contribuir indiretamente para o estudo dos quase-cristais.

A seguir apresentam-se os resultados obtidos por simulação numérica a partir de algoritmo compilado em Matlab.

## 2. RESULTADOS

De um modo geral, pensou-se em analisar a dimensão fractal para diferentes  $q$ 's individualmente. Posteriormente, pensou-se em criar uma curva que apresente a relação entre os valores

de diferentes  $q$ 's e a dimensão fractal  $d_q = \frac{a}{q-1}$ . Analisou-se os extremos periódico e aleatório para se ter parâmetro comparativo para as sequências peneperiódicas.

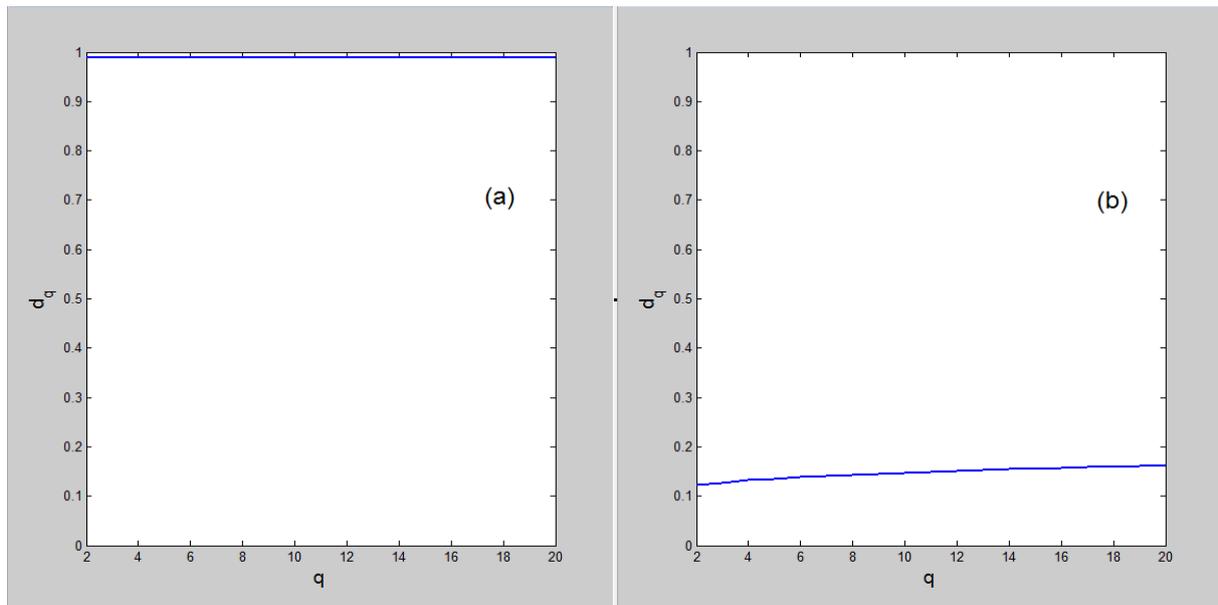


Figure 1- (a) Curva assintótica da dimensão fractal  $d_q$  para sequência periódica. (b) Curva assintótica da dimensão fractal para curva aleatória.

Observe na figura 1 que as curvas estão bem distanciadas com relação aos valores da dimensão fractal. A curva de dimensão fractal gerada pela sequência periódica tem valores próximos de um, enquanto a curva de dimensão fractal gerada pela sequência aleatória apresentam valores que variam dentro de 0.1 e 0.2.

Para as sequências peneperiódicas, foi possível perceber que as curvas de Fibonacci, Thue-Morse e Duplicação de Período apresentaram comportamento similar à curva assintótica de dimensão fractal gerada por potencial periódico, como é possível ver na figura 2. Esse resultado é compatível com a análise espectral e de autovetores já obtida (Oliveira, 2012).

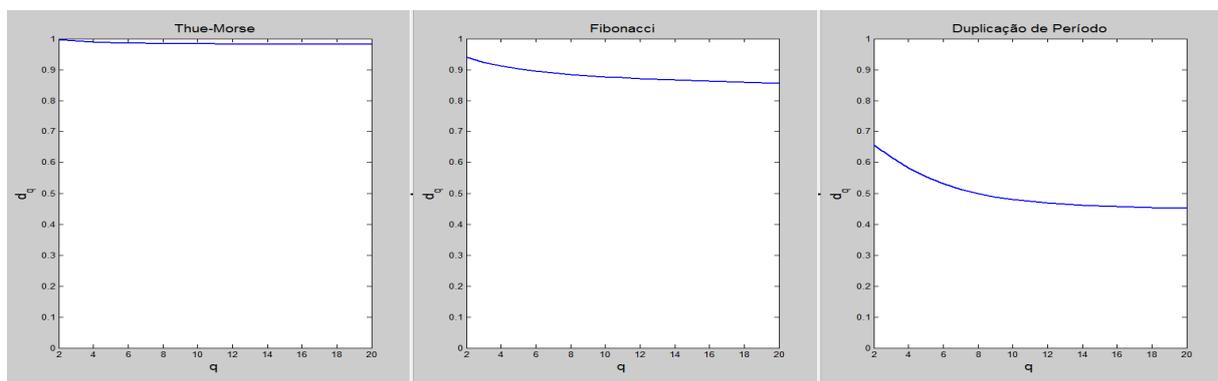


Figure 2- Curva assintótica da dimensão fractal para as sequências de Fibonacci, Thue-Morse e Duplicação de Período.

Já as curvas Rudin-Shapiro e Dobra de Papel apresentaram comportamento similar à curva

assintótica de dimensão fractal gerada pela sequência aleatória, como pode ser visto na figura 3.

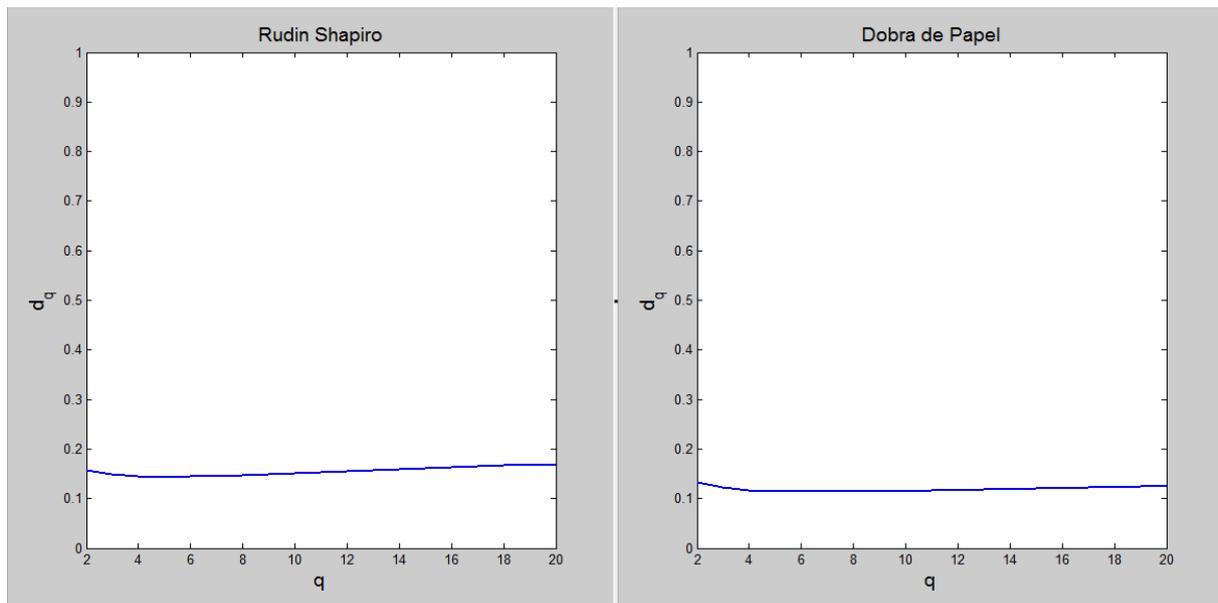


Figure 3- Curva assintótica da dimensão fractal  $d_q$  para as sequências Rudin-Shapiro e Dobra de Papel.

Observe que, como esperado, todas as sequências penepериódicas apresentaram comportamento intermediário às sequências periódica e aleatória. Além disso, esse resultado é compatível com os obtidos em estudos anteriores (Oliveira, 2012).

### 3. CONCLUSÃO

Como pode-se perceber, a dimensão fractal dos autovetores de um sistema apresenta uma classificação bem ordenada e coerente com a literatura já existente. É possível classificar as curvas de autofunções com potenciais penepериódicos a partir dos extremos periódico e aleatório e, assim, criar uma escala. Segundo Cuevas (Cuevas et al, 2002), uma dimensão importante para o sistema é a encontrada em  $q = 2$ . Essa dimensão é conhecida como dimensão típica, e pode trazer informações importantes sobre o sistema. Observou-se que o extremo periódico apresenta dimensão típica igual a  $d_2 = 1$  e que, no outro extremo, a dimensão típica para as curvas de potencial aleatório apresenta valores  $d_2 < 1$ .

Sabe-se que a dimensão fractal está diretamente relacionada com o GIPR pela equação 3 a partir de um ajuste de curvas de grandezas logarítmicas, por meio do coeficiente angular da reta ajustada  $d_q = \frac{a}{q-1}$ .

A dimensão multifractal é objeto de estudo de vários trabalhos (Evers & Mirlin, 2000) (Mirlin & Evers, 2000) (Prigodin & Altshuler, 1998) que analisam as propriedades de transição entre condutância e isolamento no modelo de Anderson. Sabe-se (Cuevas et al, 2002) que essas informações têm aplicação em sistemas dinâmicos caóticos, distribuição de probabilidade de crescimento por agregação em difusores limitados, entre outros.

Ainda não se sabe ao certo que tipo de informações as dimensões fractais podem fornecer dos sistemas gerados por sequências penepериódicas, uma vez que os trabalhos se concentram

mais nos sistemas gerados por sequências aleatórias. Acredita-se que a coerência destes resultados com os já conhecidos pela literatura indicam um bom sinal de confiabilidade para as informações encontradas.

Além disso, espera-se utilizar as sequências peneperiódicas que já são bastante estudadas para nortear um estudo sobre mapas caóticos como simuladores de potenciais para a equação de Schrödinger. Muito já foi feito neste trabalho com mapas caóticos (Oliveira, 2012) (Oliveira & Pellegrino, 2013) (Oliveira & Pellegrino, 2014) (Oliveira & Pellegrino, 2016) e a análise multifractal para esses mapas é uma proposta de trabalho futuro para esse resultado aqui apresentado.

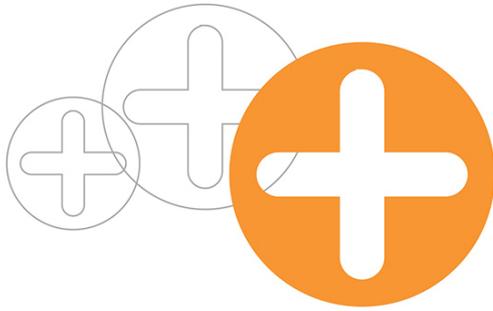
## REFERENCES

- Anderson, P.W. (1958), Absence of diffusion in certain random lattices. *Physical Review*, 109, 1942-1958.
- Ashcroft, N.W.; Mermin, N.D. (1976), “*Solid State Physics*”, 1<sup>o</sup> ed., Rinehart & Winston, Philadelphia.
- Cuevas, E. (2002), Critical generalized inverse participation ratio distributions. *Physical Review B*, 66, 233101-1 - 233101-4.
- Cuevas, E.; Ortuño, M.; Gasparian, V.; Pérez-Garrido, A. (2002), Fluctuations of the correlation dimension at metal-insulator transitions. *Physical Review Letters*, 88, 016401-1 - 016401-4.
- Evers, F.; Mirlin, A. D.; (2000), Fluctuations of the inverse participation ratio at the Anderson transition. *Physical Review Letters*, 84, 3690-3693.
- Latado, P.S. (2011), “*Propriedades Espectrais do Operador de Schrödinger Unidimensional em Sistemas com Potencial Peneperiódico*”, Dissertação de Mestrado, PPGMMC/CEFET-MG, Belo Horizonte.
- Merlin, R.; Bajema, K.; Clarke, R.; Juang F.-Y.; Bhattacharya, P. K. (1985), Quasiperiodic GaAs-AlAs heterostructures. *Physical Review Letters*, 17, 1768-1770.
- Mizoguchi, K.; Matsutani K.; Nakashima, S.; Dekorsy, T.; Kurz, H. (1997), Observation of coherent acoustic phonons in Fibonacci superlattices. *Physical Review B*, 15, 9336-9339.
- Mirlin, A. D.; Evers, F. (2000), Multifractality and critical fluctuations at the Anderson transition. *Physical Review B*, 62, 7920-7933.
- Monthus, C.; Garel T. (2010), Anderson localization of phonons in dimension  $d=1, 2, 3$ : Finite-size properties of the inverse participation ratios of eigenstates. *Physical Review B*, 81, 224208-1 - 224208-9.
- Murphy, N.C.; Wortis, R.; Atkinson, W.A. (2011), Generalized inverse participation ratio as a possible measure of localization for interacting systems. *Physical Review B*, 83, 184206-1 - 184206-6.
- Oh, G.Y.; Lee M.H. (1993), Band-structural and Fourier-spectral properties of one-dimensional generalized Fibonacci lattices. *Physical Review B*, 17, 12465-12477.
- Oliveira, W.F. (2012), “*Caracterização do Espectro e Autovalores do Operador de Schrödinger com Potenciais Caóticos*”, Dissertação de Mestrado, PPGMMC/CEFET-MG, Belo Horizonte.
- Oliveira, W.F.; Pellegrino, G.Q. (2013), “Quase-Cristais Gerados por Potenciais Caóticos”, *III Encontro Regional de Matemática Aplicada e Computacional*, Ilhéus, vol I, 1-4.
- Oliveira, W.F.; Pellegrino, G.Q. (2014), Characterization of spectrum and eigenvectors of the Schrödinger operator with chaotic potentials. *Tendências em Matemática Aplicada e Computacional*, 15, 203-209.
- Oliveira, W.F.; Pellegrino, G.Q. (2016), “Caracterização do Espectro e Autovalores do Operador de Schrödinger para o potencial Logístico”, *XIX Encontro Nacional de Modelagem Computacional e VII Encontro de Ciência e Tecnologia dos Materiais*, João Pessoa, vol I, 1-7.
- Prigodin, V.N.; Altshuler, B.L. (1998), Long-range spatial correlation of eigenfunctions in quantum disordered systems. *Physical Review Letters*, 80, 1944-1947.
- Schechtman, D.; Gratias, D.; Cahn, J.W. (1984), Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry. *Physical Review Letters*, 53, 1951-1953.
- Steuer, R.; Molgedey, L.; Ebeling, W.; Jiménez-Montano, M. A. (2001), Entropy and optimal partition for data analysis. *The European Physical Journal B*, 19, 265-269.
- Todd, J.; Merlin R.; Clarke, R.; Mohanty, K.; Axe, J. D. (1986), Synchrotron x-ray study of a Fibonacci superlattice. *Physical Review Letters*, 57, 1157-1160.

## ALMOST PERIODIC SEQUENCES IN THE ONE-DIMENSIONAL SCHRÖDINGER OPERATOR: A MULTIFRACTAL ANALYSIS

**Abstract.** *This work presents a multifractal analysis of the ground state for systems obtained from quantum potentials generated as almost periodic sequences and triggered in the time-independent one-dimensional Schrödinger equation. Fractal dimensions are generated from a direct relation with the Generalized Inverse Participation Ratio (GIPR), and they are compared with results obtained for periodic and random potentials. It is possible to see that the results are compatible with the ones found in the literature and that the asymptotic curves for the fractal dimensions fall between those extreme cases. We believe that this agreement with literature signals the efficiency of this analysis in obtaining information from these systems.*

**Keywords:** *Multifractal dimension, penepriodic sequences, quasi-crystals.*



## CARACTERIZAÇÃO DO ESPECTRO E AUTOVETORES DO OPERADOR DE SCHRÖDINGER PARA O POTENCIAL LOGÍSTICO

**Wesley Florentino de Oliveira**<sup>1,2</sup> - wesley.florentino@ifnmg.edu.br

**Giancarlo Queiroz Pellegrino**<sup>3</sup> - giancarlo@des.cefetmg.br

<sup>1</sup>Programa de Pós-graduação em Modelagem Matemática e Computacional - PPGMMC/CEFET-MG

<sup>2</sup>Instituto Federal do Norte de Minas Gerais, Campus Pirapora - Pirapora, MG, Brasil

<sup>3</sup>Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais, CEFET-MG - Belo Horizonte, MG, Brasil

**Abstract.** *Sequências semiperiódicas têm sido usadas para gerar estruturas quase-cristalinas como simuladoras de potenciais para a equação de Schrödinger. Muitos estudos já foram realizados utilizando-se sequências penepериódicas (Fibonacci, Rudin-Shapiro, Thue-Morse, dobra de papel, etc.). O presente trabalho propõe a utilização de mapas caóticos como alternativa de desordem controlada para o potencial da equação de Schrödinger, em simulações da estrutura cristalina em sólidos; apresenta também uma análise qualitativa do espectro e autovetores para o mapa logístico, bem como sugere algumas vantagens desse mapa com relação às sequências penepериódicas.*

**Keywords:** *Equação de Schrödinger, quase-cristais, mapa logístico.*

### 1. INTRODUÇÃO

A cristalografia tem sido estudada por físicos, engenheiros e matemáticos. Esse ramo da física tem contribuído de forma significativa para a engenharia de novos materiais. A descoberta dos quase-cristais na década de 80 (Schechtman & Gratias & Cahn, 1984) fez com que muitas pesquisas se voltassem para o estudo das propriedades desse tipo de material. Uma das maneiras de se gerar essas estruturas quase-cristalinas consiste na utilização de sequências quase-periódicas para simular o potencial da equação de Schrödinger unidimensional independente do tempo. Muitos trabalhos foram realizados (Oh & Lee, 1993) (Merlin et al., 1985) (Todd et al., 1986) (Mizoguchi et al., 1997) utilizando-se sequências penepериódicas como simulador para este potencial.

Uma maneira de se resolver a equação de Schrödinger unidimensional independente do tempo utiliza o modelo *tight-binding*. Este por sua vez, considera que o elétron se move numa rede unidimensional em que cada sítio  $n$  da rede é ocupado por um átomo que gera um potencial.

O presente trabalho propõe a utilização de mapas caóticos para simular o potencial da equação de Schrödinger independente do tempo. Os mapas caóticos recebem esse nome por advirem da teoria do caos. Existem vários mapas que podem simular o potencial, mas para esse

trabalho optou-se em apresentar um estudo qualitativo detalhado do mapa logístico. Apresentar-se-á uma caracterização espectral e de autofunções para diferentes valores de parâmetro do mapa logístico, mostrando que a utilização desses mapas em substituição às sequências peneperiódicas apresentam algumas vantagens (Oliveira, 2012).

O artigo apresenta uma breve revisão dos elementos matemáticos e do mapa logístico; uma seção de resultados e posterior análise dos mesmos e, finalmente, as conclusões e propostas de trabalhos futuros.

## 2. METODOLOGIA

Apresenta-se aqui, de maneira sucinta, as principais ferramentas matemáticas utilizadas para o desenvolvimento do trabalho. Detalhes podem ser obtidos consultando-se as referências citadas ao longo do texto.

### 2.1 Modelo *tight-binding* para resolução da equação de Schrödinger

Uma maneira de resolver numericamente a equação de Schrödinger unidimensional independente do tempo é utilizando-se o modelo *tight-binding* de aproximação discreta para o hamiltoniano da equação. Neste contexto, o método unidimensional é descrito pelo operador

$$(H\psi)_n = \psi_{n+1} + \psi_{n-1} + V_n\psi_n, \quad (1)$$

em que  $\psi_n$  é a amplitude da função de onda no sistema.

### 2.2 Mapa logístico

Os mapas caóticos recebem esse nome por advirem da teoria do caos. Existem vários mapas caóticos com diferentes rotas para o caos (Hilborn, 2000). Para o presente trabalho, utilizou-se apenas o mapa logístico, que apresenta rota para o caos através de bifurcações. O mapa logístico é construído de forma iterativa e apresenta a seguinte regra de construção:

$$w_{n+1} = rw_n(1 - w_n), \quad (2)$$

Onde  $r \in [0, 4]$  é um parâmetro a ser definido,  $w_n$  é a semente inicial da sequência e  $n$  é a posição do termo na sequência. Para o presente trabalho, utilizou-se sequências binárias  $V_n$  formadas pela seguinte regra: (a) se  $w_n \leq 0.5$ , então  $V_n = 1$ ; (b) se  $w_n > 0.5$  então  $V_n = 2$ . Essa é considerada (Steuer et al., 2001) a melhor maneira de se transformar a sequência logística em uma sequência binária.

A Fig. 1 mostra a variação do parâmetro  $r$  dentro dos limites pré-estabelecidos e a distribuição dos pontos fixos da sequência. Observe que a rota para o caos por meio de bifurcações é claramente exibida. Além disso, pode-se perceber janelas de periodicidade dentro das zonas caóticas. Essas janelas serão importantes para mostrar que é possível controlar a caoticidade da sequência por meio do ajuste do parâmetro  $r$ .

Acredita-se que a utilização dos mapas caóticos como alternativa às sequências peneperiódicas é inédita e foi inicialmente proposta por César R. de Oliveira (2002). Além de apresentarem as mesmas características espectrais e de autofunções das sequências peneperiódicas, os mapas logísticos apresentam um interessante diferencial: é possível controlar a desordem da sequência

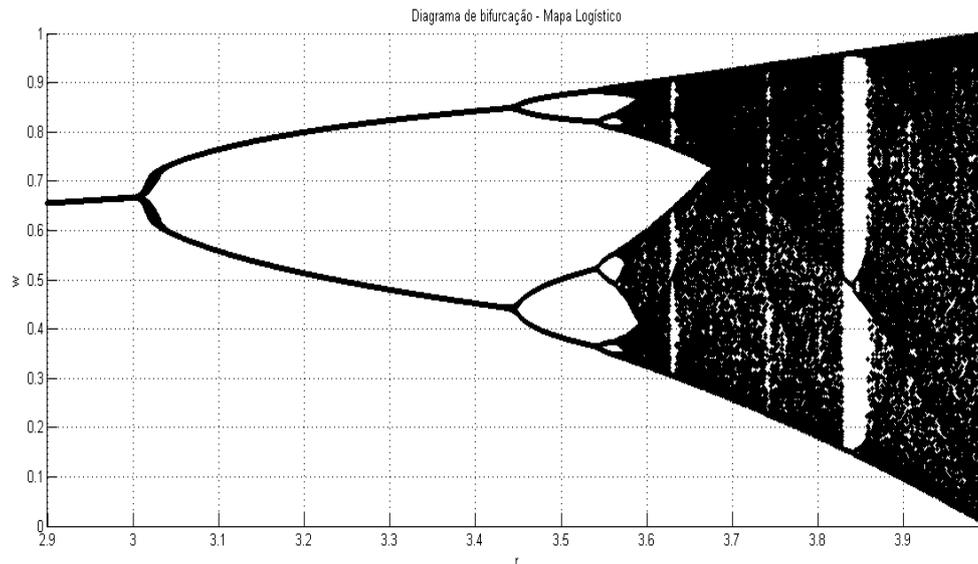


Figure 1- Mapa de bifurcação para sequência logística. Observe que o mapa se inicia em  $r = 2.9$ , pois os valores anteriores do parâmetro  $r$  apresentam apenas um estado estacionário e não serão relevantes para este trabalho.

por meio do controle de caoticidade. Na prática, isso possibilitaria ao pesquisador definir previamente se gostaria de um material que se aproximasse de um bom condutor ou bom isolante, mediante as necessidades do trabalho que esteja executando.

### 2.3 Teoremas de Bloch e de Anderson

O Teorema de Bloch (Ashcroft & Mermin, 1976) garante que se as sequências utilizadas no modelo *tight-binding* são periódicas, então a função de onda  $\psi$  é classificada como sem decaimento. Isso significa que a partícula tem probabilidade considerável de ser encontrada em toda a rede, o que sugere um bom condutor (elétrico, térmico, etc).

O espectro da equação de Schrödinger com potencial periódico também é bem característico e apresenta um (ou mais) *gap(s)* que está(ão) relacionado(s) diretamente com o número de termos do período da sequência. Além disso, as curvas apresentam crescimento suave ao longo de todo o gráfico.

A Fig. 2 apresenta um exemplo de densidade de probabilidade para um autovetor do hamiltoniano com potencial periódico, classificada como sem decaimento e o espectro gerado pela equação de Schrödinger com potencial periódico, no modelo *tight-binding*.

Por outro lado, o Teorema de Anderson garante (Anderson, 1958) que a utilização de sequências aleatórias para simulação do potencial da equação de Schrödinger confina a partícula em uma região finita da rede. Ou seja, o material é classificado como um mau condutor.

O Espectro também apresenta comportamento característico de uma curva crescente não-suavizada e pode ou não conter *gaps*.

A Fig. 3 mostra a densidade de probabilidade de um dado autovetor do hamiltoniano da equação de Schrödinger com potencial aleatório e o espectro gerado pela resolução da mesma equação.

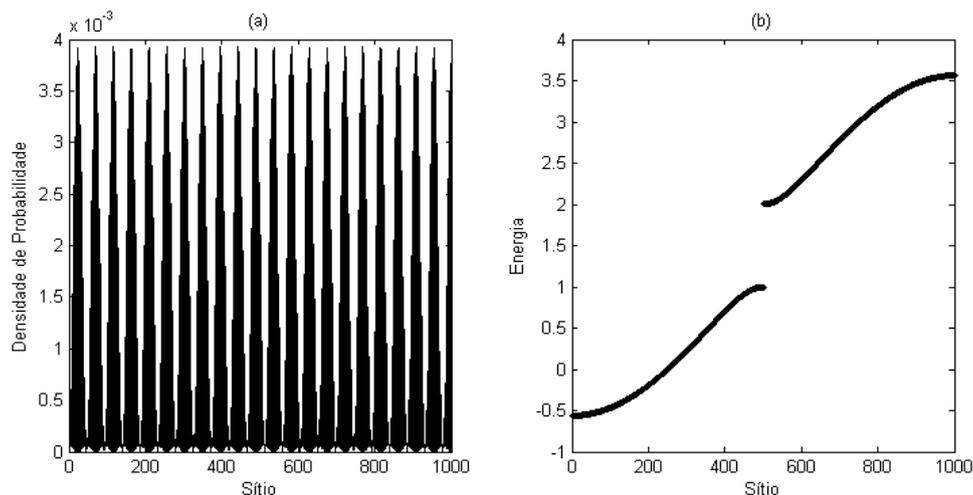


Figure 2- (a) Curva de densidade de probabilidade  $|\psi|^2$  para um autovetor do hamiltoniano com potencial periódico. (b) Espectro de energias do mesmo sistema.

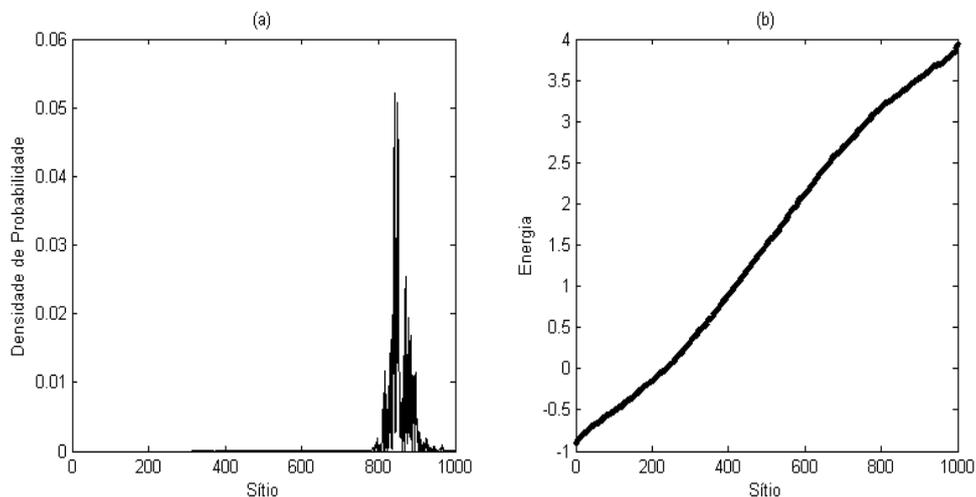


Figure 3- (a) Curva de densidade de probabilidade  $|\psi|^2$  para um autovetor do hamiltoniano com potencial aleatório. (b) Curva espectral gerada pelos autovalores do mesmo sistema.

### 3. RESULTADOS

Para analisar o mapa logístico, realizou-se um extenso estudo do espectro e dos autovetores gerados pela resolução da equação de Schrödinger pelo modelo *tight-binding*. Observou-se cuidadosamente cada janela de periodicidade e a transição delocalização-localização das densidades de probabilidades das autofunções. Assim, apresenta-se nesse trabalho, valores de parâmetro  $r$  relevantes para a compreensão e percepção das diferentes zonas de caoticidade do mapa logístico.

Dividiu-se a análise (qualitativa) em dois quadros: (a) quadro de curvas espectrais e (b) quadro de autofunções para o estado fundamental do sistema. Em ambos os casos, é importante observar as Figs. 2 e 3, que são consideradas os limiares que direcionam a análise.

O primeiro quadro mostra a evolução das curvas espectrais de diferentes auto-sistemas com

potenciais logísticos. O quadro foi organizado com parâmetro  $r$  crescente para que se perceba a evolução da curva ao longo do mapa de bifurcações. Tomou-se o cuidado especial de se incluir valores de  $r$  nas principais janelas de periodicidade (ver também Apêndice A).

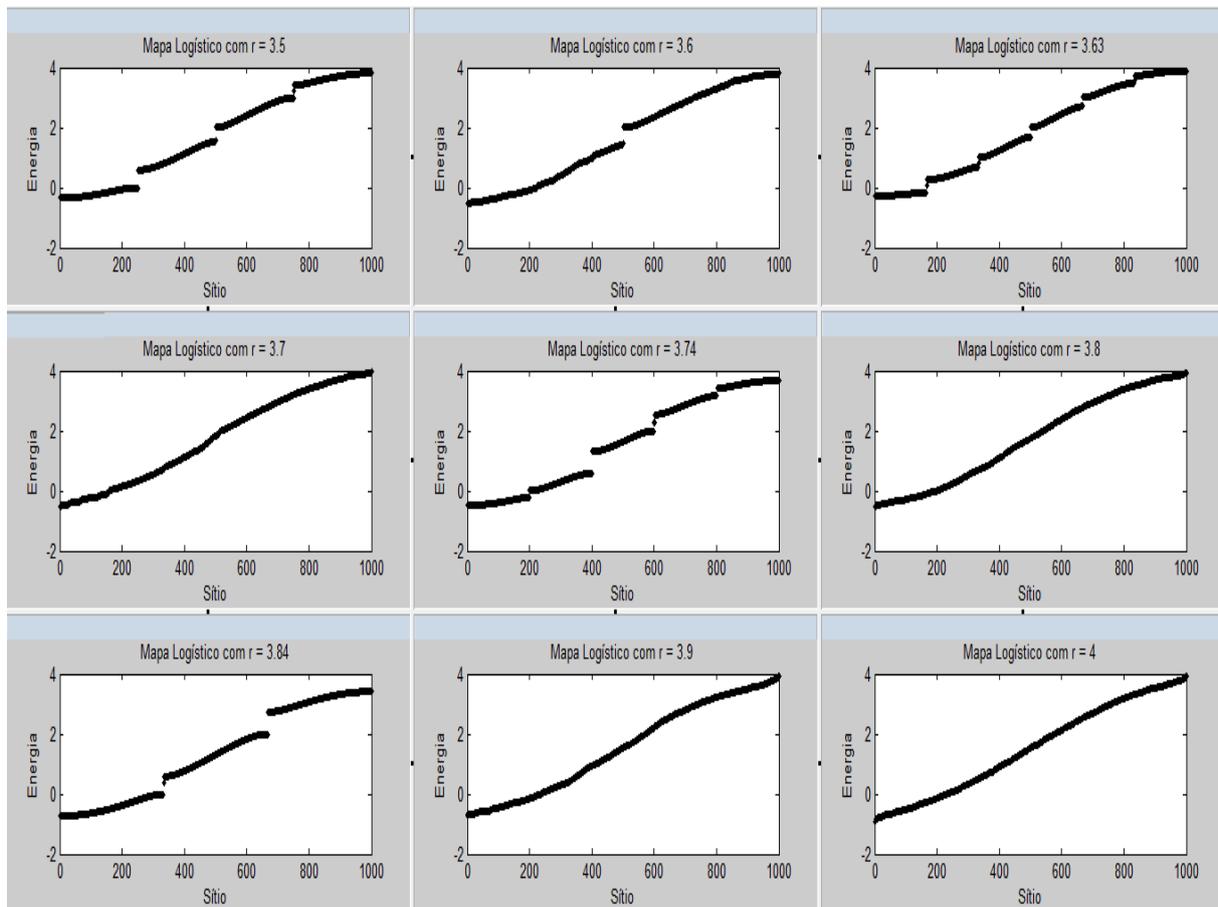


Figure 4- Quadro comparativo de curvas espectrais da equação de Schrödinger com potencial logístico para diferentes valores do parâmetro  $r$ .

Observe que, se analisarmos a Fig. 1, percebemos que os parâmetros  $r = 3.63$ ,  $r = 3.74$  e  $r = 3.84$  encontram-se nas janelas de periodicidade do mapa. Observe que tanto nessas janelas, quanto para  $r = 3.5$ , o espectro possui a mesma característica de bandas observada na Fig. 2. Já para os demais valores de  $r$ , a curva espectral se assemelha à mostrada na Fig. 3. Observe que quanto maior o valor de  $r$ , mais próximo do resultado obtido com a sequência aleatória (exceto pelas janelas de periodicidade).

Já o segundo quadro trata dos autovetores do sistema. Para todos os casos, exibiu-se o estado fundamental e também ordenou-se de forma crescente com relação ao parâmetro  $r$ . Os autovetores correspondem aos mesmos auto-sistemas exibidos no quadro anterior.

Observe que os mesmos valores de  $r$  que apresentaram espectro semelhante ao caso periódico, apresentam densidade de probabilidade estendida para o estado fundamental do sistema. O mesmo acontece para os demais valores de  $r$ , que apresentam densidade de probabilidade bem localizada.

Esse é um importante diferencial do mapa logístico: é possível controlar a desordem do sistema a partir do ajuste do parâmetro  $r$  da sequência. Isso pode ser um ganho com relação às

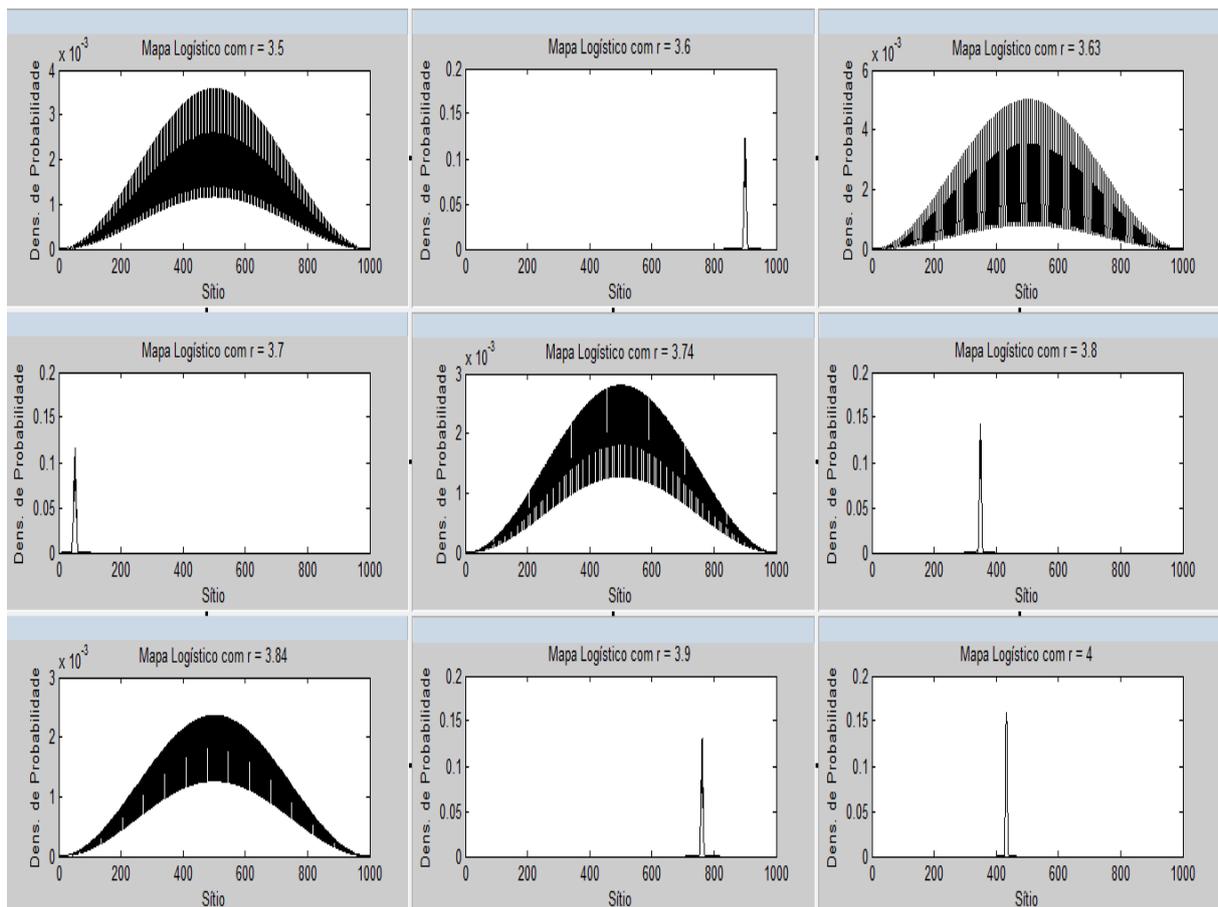


Figure 5- Quadro comparativo de autovetores do estado fundamental da equação de Schrödinger com potencial logístico e diferentes valores de  $r$ .

seqüências penepериódicas (que apresentam um comportamento invariável), pois o pesquisador poderia ajustar a seqüência de acordo com o problema físico em que estivesse trabalhando.

#### 4. CONCLUSÕES E TRABALHOS FUTUROS

Desde a criação do primeiro quase-cristal baseado na seqüência de Fibonacci, na década de 80, muito se tem estudado sobre essas estruturas. Uma maneira de se gerar quase-cristais utiliza seqüências de substituição para simular o potencial na equação de Schrödinger e várias pesquisas se voltaram para o uso de seqüências penepериódicas.

As Figs. 4 e 5 mostram curvas espectrais e de autovetores para diferentes auto-sistemas com potencial logístico. Foi possível perceber que as zonas de periodicidade exibidas na Fig. 1 são respeitadas e fazem o comportamento do sistema se aproximar do extremo periódico. A caracterização espectral da Fig. 4 também deixa claro que, na medida em que aumentamos o valor do parâmetro  $r$ , as curvas espectrais se tornam mais próximas da obtida com potencial aleatório (com exceção das janelas de periodicidade).

O presente trabalho apresentou uma alternativa às seqüências penepериódicas. Os mapas caóticos apresentam comportamento similar às seqüências penepериódicas e ainda trazem a possibilidade de controle da desordem por meio do ajuste de seus parâmetros. Para o pre-

sente trabalho, apresentou-se apenas resultados qualitativos envolvendo o mapa logístico, mas resultados quantitativos com o mapa logístico e outros mapas vêm sendo estudados por nós e apresentam interessantes e novos aspectos. Estes resultados serão publicados oportunamente.

## REFERENCES

- Anderson, P.W. (1958), Absence of diffusion in certain random lattices. *Physical Review*, 109, 1942-1958.
- Ashcroft, N.W.; Mermin, N.D. (1976), “*Solid State Physics*”, 1<sup>o</sup> ed., Rinehart & Winston, Philadelphia.
- Hilborn, R.C. (2000), “*Chaos and Nonlinear Dynamics*”, 2<sup>o</sup> ed., Oxford University Press, Oxford.
- Merlin, R.; Bajema, K.; Clarke, R.; Juang F.-Y.; Bhattacharya, P. K. (1985), Quasiperiodic GaAs-AiAs heterostructures. *Physical Review Letters*, 17, 1768-1770.
- Mizoguchi, K.; Matsutani K.; Nakashima, S.; Dekorsy, T.; Kurz, H. (1997), Observation of coherent acoustic phonons in Fibonacci superlattices. *Physical Review B*, 15, 9336-9339.
- Oh, G.Y.; Lee M.H. (1993), Band-structural and Fourier-spectral properties of one-dimensional generalized Fibonacci lattices. *Physical Review B*, 17, 12465-12477.
- Oliveira, C.R. (2002). Comunicação pessoal.
- Oliveira, W.F. (2012), “*Caracterização do Espectro e Autovetores do Operador de Schrödinger com Potenciais Caóticos*”, Dissertação de Mestrado, PPGMMC/CEFET-MG, Belo Horizonte.
- Schechtman, D.; Gratias, D.; Cahn, J.W. (1984), Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry. *Physical Review Letters*, 53, 1951-1953.
- Steuer, R.; Molgedey, L.; Ebeling, W.; Jiménez-Montano, M. A. (2001), Entropy and optimal partition for data analysis. *The European Physical Journal B*, 19, 265-269.
- Todd, J.; Merlin R.; Clarke, R.; Mohanty, K.; Axe, J. D. (1986), Synchrotron x-ray study of a Fibonacci superlattice. *Physical review Letters*, 9, 1157-1160.

## APPENDIX A

Para análise e conclusões apresentadas neste artigo, foi realizada uma extensa caracterização dos mapas espectrais e autovetores do mapa logístico. Parte desse estudo produziu uma sequência de quadros em arquivo .avi que mostra a evolução dos autovalores e autovetores para diferentes valores de  $r$ . Este material complementar está disponível no link: [http://www.dfm.cefetmg.br/site/sobre/corpo\\_docente\\_teste\\_DRI/Giancarlo\\_Pellegrino/materiais\\_diposniveis.html](http://www.dfm.cefetmg.br/site/sobre/corpo_docente_teste_DRI/Giancarlo_Pellegrino/materiais_diposniveis.html)

### CHARACTERISATION OF SPECTRUM AND EIGENVECTORS OF THE SCHRÖDINGER OPERATOR FOR THE LOGISTIC POTENTIAL

**Abstract.** *Semi-periodic sequences have been used to generate quasi-crystalline structures as potential in the Schrödinger equation. Many studies have been conducted using almost periodic sequences (Fibonacci, Rudin-Shapiro, Thue-Morse, paper-folding, etc.). This paper proposes the use of chaotic maps as a disorder-controlled alternative for the potential of the Schrödinger equation in simulations of the crystal structure in solids; it presents as well a qualitative analysis of the spectrum and eigenvectors for the logistic map, and suggests some advantages of this map relative to almost periodic sequences.*

**Keywords:** *Schrödinger equation, quasi-crystals, logistic map.*