



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

***PESO DE DRUDE EM ANÉIS
UNIDIMENSIONAIS COM POTENCIAIS DE
SUBSTITUIÇÃO E ATRAVESSADOS POR FLUXO
MAGNÉTICO.***

Fabiano Oliveira Prado

São Carlos
2002

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

***PESO DE DRUDE EM ANÉIS
UNIDIMENSIONAIS COM POTENCIAIS DE
SUBSTITUIÇÃO E ATRAVESSADOS POR FLUXO
MAGNÉTICO.***

Fabiano Oliveira Prado

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal de São Carlos, como parte dos requisitos para a obtenção do Título de Mestre em Física.

Orientador:

Prof. Dr. Giancarlo Queiroz Pellegrino

São Carlos

2002

**Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da
Biblioteca Comunitária da UFSCar**

P896pd

Prado, Fabiano Oliveira.
Peso de Drude em anéis unidimensionais com potenciais de substituição e atravessados por fluxo magnético / Fabiano Oliveira Prado. -- São Carlos : UFSCar, 2008.
65 f.

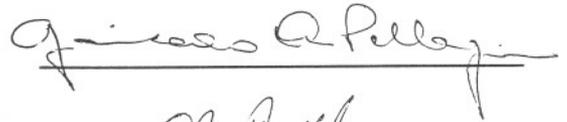
Dissertação (Mestrado) -- Universidade Federal de São Carlos, 2002.

1. Quase-cristais. 2. Sequência. I. Título.

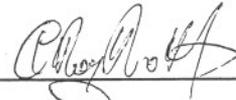
CDD: 530.413 (20^a)

Encerrada a sessão secreta, o presidente informou o resultado. Nada mais havendo a tratar, foi encerrada a sessão, e para constar, eu, Benedito Wilson de Oliveira, lavrei a presente ata, que assino com os membros da Banca Examinadora.

Prof. Dr. Giancarlo Queiroz Pellegrino
Presidente



Prof. Dr. César Rogério de Oliveira
Membro



Prof. Dr. Ladir Cândido da Silva
Membro



Sr. Benedito Wilson de Oliveira
Secretário do PPG-FIS



Dedico este trabalho aos meus pais.

Agradecimentos

Primeiramente agradeço ao Gian por ter me orientado de maneira diligente e paciente, em seguida devo agradecer ao professor Miled pela constante motivação e proveitosas discussões. Agradeço a ajuda dos amigos William, Hélio e Fabrício pelo apoio técnico na confecção deste trabalho. À minha companheira Flávia pela compreensão, paciência e apoio. Finalmente agradeço à CAPES por financiar estes dois anos de trabalho. Obrigado Santo Expedito!

Resumo

No presente trabalho, através do cálculo do peso de Drude estudamos a capacidade de condução a temperaturas finitas, em anéis unidimensionais com potenciais dados por seqüências de diferentes graus de desordem e atravessados por fluxo magnético independente do tempo. Neste contexto, utilizamos o modelo *tight-binding* na resolução da equação de Schrödinger, o que permite inserir os potenciais, dados por seqüências de substituição, de maneira simples. Estudamos quatro casos em que esse potencial seja dado por seqüências não periódicas. Os resultados são comparados com os dois casos limites de organização, a saber, as seqüências periódica e desordenada. Observa-se que o grau de desordem apresentado por estes potenciais reflete-se nas propriedades de transporte exibidas pelo sistema em cada caso, embora de maneira não trivial se considerada uma hierarquia de desordem baseada na transformada de Fourier das seqüências. Descreve-se também a influência da temperatura, frente à influência dos potenciais, na capacidade de condução.

Palavras-chave: seqüências de substituição, *tight-binding*, corrente persistente, peso de Drude, anéis unidimensionais, fluxo magnético, condução elétrica.

Abstract

In the present work the Drude weight is calculated to study the capacity of conduction at finite temperatures in one-dimensional rings with the potential given by the sequences of different degrees of randomness and threaded by a time independent magnetic flux. In this context, the tight-binding approximation is used to solve the Schrödinger equation, also permitting the potentials, given by substitution sequences, to be implemented in a simple way. We study four situations in which the potential is given by periodic and random sequence. The transport properties exhibited by the system in each case are to reflect the degree of randomness presented by these potentials, although in a nontrivial manner if one considers a hierarchy of disorder based on the Fourier transform of the sequences. The role played by temperature in the capacity of conduction, as compared with the role played by the potentials, is also described.

Keywords: substitution sequences, tight-binding, persistent current, Drude weight, one-dimensional rings, electric conduction.

Lista de Figuras

2.1	Fluxo magnético atravessando o anel	3
2.2	Espectro de energia do sistema	5
3.1	Representação dos sítios do anel	11
3.2	Seqüência Thue-Morse	12
3.3	Seqüência duplicação de período	13
3.4	Seqüência Rudin-Shapiro	13
3.5	Seqüência <i>paper-folding</i>	13
3.6	Transformada de Fourier	14
3.7	Transformada de Fourier	15
4.1	Achatamento da curvatura das bandas.	18
4.2	Peso de Drude (preenchimento 1/2)	19
4.3	Peso de Drude (preenchimento 1/4).	20
4.4	Peso de Drude (preenchimento 1/2).	21
4.5	Peso de Drude (preenchimento 1/4)	22
4.6	Propriedade da seqüência Rudin-Shapiro.	24
4.7	Duplo ajuste do caso Rudin-Shapiro.	24
5.1	Espaçamento entre níveis (preenchimento 1/2)	36
5.2	Espaçamento entre níveis (preenchimento 1/4)	44
6.1	Casos limites do comportamento condutor.	61
6.2	Hierarquia de desordem das seqüências de substituição.	62
6.3	Propriedade da seqüência Thue-Morse.	63

Sumário

1	Introdução	1
2	Propriedades Gerais em Anéis Unidimensionais Atravessados por Fluxo Magnético	3
2.1	Conexão com as propriedades de Bloch	4
2.2	Correntes Persistentes	5
2.3	Peso de Drude	6
3	A Discretização do Anel	8
3.1	Modelo Tight-Binding	8
3.2	Seqüências de Substituição	10
3.2.1	Definição	11
3.2.2	Uma Hierarquia de Desordem	14
4	Resultados a Temperatura Nula	17
4.1	Auto-energias	17
4.2	Peso de Drude	17
4.2.1	O caso da seqüência Rudin-Shapiro	23
5	Temperaturas Finitas	26
5.1	Ensemble canônico	26
5.2	Ensemble grande canônico	27
5.3	Peso de Drude para temperaturas finitas	28
5.4	Resultados para os preenchimentos $1/2$ e $1/4$	29
5.4.1	Preenchimento $1/2$	29
5.4.2	Preenchimento $1/4$	37
5.4.3	Discussão sobre os resultados	45

5.5	Resultados para os preenchimentos 15/32 e 15/64	46
5.5.1	Preenchimento 15/32	46
5.5.2	Preenchimento 15/64	53
6	Conclusões e perspectivas futuras	61
	Referências Bibliográficas	64

1 *Introdução*

É sabido que a estrutura de um sólido tem grande importância em determinar como os elétrons irão se comportar. Por exemplo, se considerarmos um sólido cristalino, em que o elétron sofre a ação do potencial de maneira periódica, temos a possibilidade de observar fenômenos de condução. Isto se deve, entre outras coisas, ao fato da probabilidade de encontrar o elétron se estender espacialmente por todo o sólido; esta característica se revela como uma das propriedades gerais que a função de onda do elétron em estruturas periódicas apresenta. A importância das estruturas periódicas no comportamento eletrônico foi elucidada quando F. Bloch, em 1928, publicou um trabalho onde é resolvida a equação de Schrödinger para um único elétron considerando que a energia potencial é uma função periódica. Por outro lado, no caso de um sólido que apresenta uma estrutura totalmente desordenada, os elétrons se comportam de maneira completamente diferente; este problema foi primeiramente resolvido em 1958 por P.W. Anderson. Ele mostrou que a função de onda de um elétron que sofre a ação de um potencial espacialmente desordenado se torna localizada espacialmente, o que pode levar à classificação do sistema como um mau condutor. Considerando esses dois resultados como casos limites do comportamento da função de onda eletrônica, acreditamos que exista uma relação entre o tipo de organização estrutural do sólido e as propriedades eletrônicas. Estudaremos essa relação na situação em que o sistema é aperiódico de uma determinada maneira, qual seja, elétrons em um meio que não é periódico e nem completamente desordenado.

O objetivo deste trabalho é observar a influência de estruturas aperiódicas sobre a capacidade de condução, nas situações em que os potenciais aperiódicos são dados pelas seqüências duplicação de período, *paper-folding*, Thue-Morse e Rudin-Shapiro. Primeiramente esse estudo será feito para temperatura nula e posteriormente para temperaturas finitas, sempre comparando os resultados com as duas situações de seqüências em que as propriedades são conhecidas, a saber, os casos das seqüências periódica e desordenada.

Para estudar a capacidade de condução em cada caso de seqüência, utilizaremos o peso de Drude que é um indicador da condutividade, simples de ser calculado, pois consiste de uma soma de segundas derivadas do espectro de energia. Desse modo as propriedades de con-

dução serão obtidas por meio da informação contida no espectro de energia do hamiltoniano do sistema; acreditamos que essa informação seja suficiente para o entendimento da capacidade de condução, considerando-se o modelo e as aproximações adotadas. Portanto não estaremos interessados nas funções de onda do elétron, apesar de serem, também, importantes no entendimento das propriedades de condução.

No capítulo 2 discutiremos algumas propriedades gerais que o sistema apresenta, bem como a quantidade física que iremos calcular durante todo o trabalho. Posteriormente, no capítulo 3, faremos uma aproximação no hamiltoniano que nos permitirá inserir de maneira simplificada as seqüências como energia potencial do sistema, e finalizaremos este capítulo mostrando a construção e classificação quanto ao grau de desordem das seqüências de substituição. Nos capítulos 4 e 5 mostraremos, e discutiremos parcialmente, os resultados a temperatura nula e finita, respectivamente, e finalizaremos com as conclusões a cerca dos resultados mais interessantes, sugerindo novos rumos para a pesquisa.

2 *Propriedades Gerais em Anéis Unidimensionais Atravessados por Fluxo Magnético*

Temos como objetivo explorar o sistema constituído por N_e partículas carregadas (elétrons) não interagentes movendo-se num anel atravessado por um fluxo magnético independente do tempo, sendo que este fluxo atravessa uma superfície limitada no interior do anel como mostrado na figura 2.1. Neste capítulo abordaremos as propriedades da função de onda e da energia associadas aos elétrons. Posteriormente o anel será descrito por N_s sítios caracterizados por um potencial definido pelos valores de uma dada seqüência de números reais $\{V_n\}_{n=1}^{N_s}$ construída por uma regra de iteração. Esta será do tipo que gera seqüência de substituição, como as seqüências Fibonacci, Rudin-Shapiro, duplicação de período, etc. Será dedicada uma seção aos aspectos mais gerais dessas seqüências.

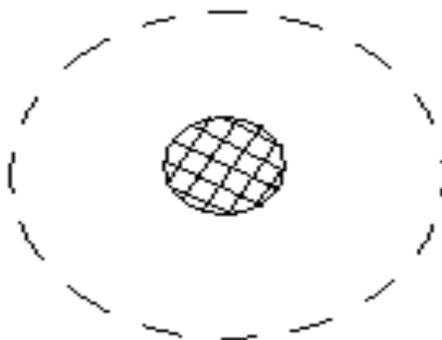


Figura 2.1: Figura ilustrativa do fluxo magnético (área quadriculada) atravessando o anel (linha pontilhada)

A descrição quântica de um sistema de partículas independentes é feita através da equação de Schrödinger de uma única partícula. Como no caso do sistema acima, podemos considerar uma única partícula satisfazendo a equação de Schrödinger independente do tempo

$$\left\{ \frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + V \right\} |\psi\rangle = E|\psi\rangle, \quad (2.1)$$

onde \vec{p} e \vec{A} são, respectivamente, os operadores associados ao momento canônico da partícula e ao vetor potencial que descreve o campo magnético do sistema (1).

2.1 Conexão com as propriedades de Bloch

Neste ponto faremos uma mudança de calibre sobre a equação acima a fim de reduzi-la a uma forma bem conhecida, a saber, a equação de onda de Bloch. Este procedimento nos será útil a fim de entendermos a estrutura dos auto-estados e auto-energias do sistema em questão.

A transformação sobre a equação 2.1 consiste em sair do calibre especificado por \vec{A} para um outro especificado por $\vec{A} + \vec{\nabla}\Lambda$ (2). Cabe ressaltar que Λ , bem como \vec{A} , é uma função da coordenada \vec{x} .

Se a escolha do calibre for tal que $\vec{\nabla}\Lambda = -\vec{A}$, a Eq. 2.1 reduz-se a

$$\left\{ \frac{\vec{p}^2}{2m} + V \right\} |\varphi\rangle = E|\varphi\rangle. \quad (2.2)$$

Note que o vetor potencial é eliminado da equação e o novo estado $|\varphi\rangle$ adquire uma fase sempre que completar uma volta sobre o anel (3), isto é

$$\langle x+L|\varphi\rangle = \exp\left(\frac{ie}{\hbar c}\phi\right) \langle x|\varphi\rangle. \quad (2.3)$$

O resultado acima é uma consequência da transformação de calibre efetuada anteriormente e, devido à nova forma apresentada por 2.2, podemos fazer uma conexão com os estados de Bloch. De fato, isto é possível visto que a energia potencial é periódica, tratando-se de um anel, satisfazendo a condição $V(x+L) = V(x)$ em que L é o comprimento do anel. Esta periodicidade apresentada pelo potencial garante propriedades aos auto-estados e auto-energias do sistema. Veremos a seguir algumas destas propriedades.

De acordo com o teorema de Bloch (4) as auto-funções da equação de onda 2.2, cujo potencial é periódico, são o produto de uma onda plana $\exp(ikx)$ por uma função $u_k(x)$ que tem a periodicidade do anel, ou seja

$$\langle x|\varphi\rangle = u_k(x) \exp(ikx). \quad (2.4)$$

Um auto-estado na forma da equação 2.4 é chamado de uma função de Bloch. Podemos utilizar o resultado do teorema de Bloch para descrever o auto-estado em $x+L$

$$\langle x+L|\varphi\rangle = \exp(ikL) \langle x|\varphi\rangle. \quad (2.5)$$

Fazendo uma comparação entre as equações 2.5 e 2.3 chegamos a uma relação para o vetor de onda de Bloch em termos do fluxo magnético (5)

$$k = \left(\frac{2\pi}{L} \right) \left(\frac{e}{hc} \right) \phi = \left(\frac{2\pi}{L} \right) \frac{\phi}{\phi_0}. \quad (2.6)$$

Então, podemos concluir que o Hamiltoniano $\frac{1}{2m} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + V$ sofre uma transformação de calibre $\vec{A} \rightarrow \vec{A} + \vec{\nabla} \Lambda$, onde $\vec{\nabla} \Lambda = -\vec{A}$, tal que as auto-funções no novo calibre têm as propriedades da função de Bloch e o vetor de onda tem a forma dada por 2.6.

Com relação aos auto-valores de energia pode-se determiná-los através das equações 2.2 e 2.5, tal que para um dado vetor de onda surge um espectro discreto de energias e, por outro lado, o auto-valor é uma função periódica e diferenciável do vetor de onda com período $\frac{\phi}{\phi_0} = 1$ (6). Essas propriedades apresentadas pela energia caracterizam as chamadas estruturas de bandas mostradas na figura 2.2.

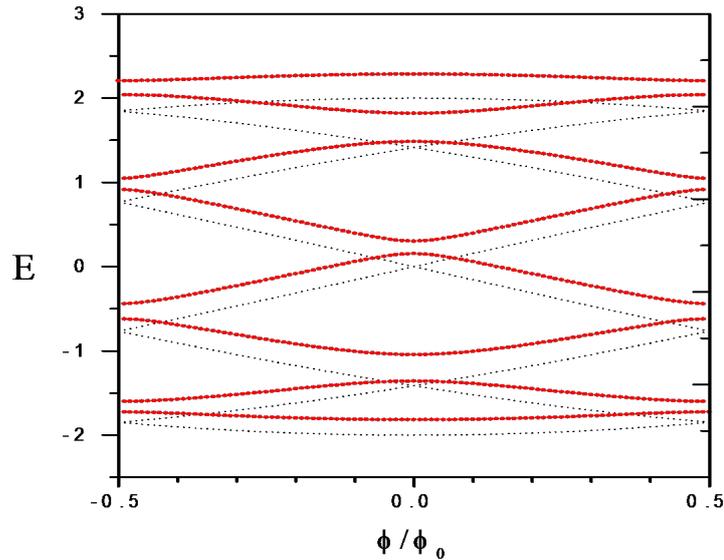


Figura 2.2: Espectro de energia do elétron dentro de um anel constituído de oito sítios para um caso de potencial não nulo. As linhas pontilhadas mostram o espectro de energia do elétron para o caso de potencial nulo.

2.2 Correntes Persistentes

A informação contida na estrutura de bandas terá grande importância no restante deste trabalho. Começaremos a utilizar este tipo de informação para explicar um fenômeno que ocorre em anéis atravessados por um fluxo magnético, que é chamado de corrente persistente. Cada banda de energia $E_n(\phi)$ ocupada deve carregar uma corrente I_n na presença de um fluxo

magnético não nulo atravessando o anel. Como previsto por Büttiker, Imry e Landauer (5, 7) esta corrente será dada por

$$I_n(\phi) = -a \frac{\partial E_n}{\partial \phi}, \quad (2.7)$$

que persiste mesmo em situação de fluxo constante. No caso de M_{oc} níveis ocupados, estas correntes persistentes somam-se de modo a se ter

$$I(\phi) = -a \sum_{n=1}^{M_{oc}} \frac{\partial E_n}{\partial \phi}. \quad (2.8)$$

Evidentemente esta expressão se aplica à situação de temperatura nula, em que as N_e partículas independentes preenchem os M_{oc} níveis mais baixos.

2.3 **Peso de Drude**

Podemos obter uma outra informação através da estrutura de bandas do sistema, chamado de peso de Drude, que está relacionada com as propriedades de condução do anel. Em 1964, Kohn notou que uma caracterização quantitativa da capacidade de condução de um dado estado quântico de sistemas como o que se considera neste trabalho pode ser feita usando-se a derivada segunda das bandas de energia com relação ao vetor da rede (8). Neste trabalho Kohn mostrou que por meio de um cálculo de densidade de corrente induzida por um campo, $J = \sigma E$, resulta que a condutividade σ é proporcional a $\frac{\partial^2 E_n}{\partial k^2}$. No nosso caso, esse assim chamado peso de Drude resulta ser

$$D = bN \sum_{n=1}^{M_{oc}} \frac{\partial^2 E_n}{\partial \phi^2}. \quad (2.9)$$

A observação de D como função do comprimento N_s do anel fornece um critério para decidir se o sistema é condutor ou isolante. Para isolante $D(N_s) \rightarrow 0$ quando $N_s \rightarrow \infty$, ao passo que para sistemas metálicos $D(N_s)$ tende a um valor constante, não nulo, naquele limite. Cabe ressaltar aqui que as interpretações acerca do peso de Drude e de seu comportamento assintótico estão relacionadas com a soma do inverso das massas efetivas associadas a cada nível ocupado pelas partículas. Em situação onde a partícula possui energia potencial periódica, é sabido que a massa efetiva dessa partícula é inversamente proporcional à segunda derivada da energia com relação ao vetor de onda da rede, então para o caso unidimensional podemos escrever

$$\frac{1}{m_n^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E_n}{\partial k^2}, \quad (2.10)$$

onde m_n^* é a massa efetiva da partícula que ocupa o nível E_n de energia e k é o vetor de onda

da rede cristalina unidimensional. Vimos anteriormente, pela equação 2.6, que o vetor de onda é proporcional ao fluxo magnético que atravessa o anel unidimensional, ou seja, pode-se trocar na última equação o vetor de onda pelo fluxo magnético, o que produzirá

$$\frac{1}{m_n^*} = \frac{L^2 \phi_0^2}{4\pi^2 \hbar^2} \frac{\partial^2 E_n}{\partial \phi^2}, \quad (2.11)$$

ou seja, D é proporcional à soma dos inversos das massas efetivas de cada nível ocupado. Este resultado proporciona uma interpretação intuitiva do comportamento assintótico do peso de Drude em função do tamanho do anel, relacionando a capacidade de condução do sistema com o inverso da massa efetiva.

3 A Discretização do Anel

3.1 Modelo Tight-Binding

Nesta seção faremos com que a equação de Schrödinger se torne discreta. O primeiro passo é definir coordenadas discretas que serão representadas por uma base completa ortonormal de sítios e em seguida projetar a equação de Schrödinger nesta nova base. Este procedimento, juntamente com algumas definições apropriadas, nos leva ao que é freqüentemente chamado em física do estado sólido como aproximação *tight-binding*.

Discretizaremos a coordenada x do anel unidimensional de modo que sua posição seja descrita por um conjunto finito $\{x_n\}_{n=1}^{N_s}$ de números reais. Esta discretização corresponde às possíveis posições em que se pode encontrar a partícula, que denominamos como os sítios da rede. Então, podemos rotular os sítios da rede por meio do conjunto de inteiros $\{n\}_{n=1}^{N_s}$, possibilitando a definição de uma base de sítios $\{|n\rangle\}_{n=1}^{N_s}$. Dessa forma a condição de contorno para o anel pode ser definida como $|N_s + 1\rangle \equiv |1\rangle$.

Para deduzir o hamiltoniano discretizado associado ao sistema descrito no capítulo anterior, utilizaremos a equação 2.1 desligando o fluxo magnético, isto é, vamos impor que \vec{A} seja zero e posteriormente consideraremos a existência do fluxo magnético atravessando o anel. Sendo assim podemos projetar a equação de Schrödinger, na base de sítios, ou seja

$$\sum_{n=1}^{N_s} |n\rangle \langle n| H |\psi\rangle = \sum_{n=1}^{N_s} |n\rangle \langle n| \left[\frac{1}{2m} \vec{p}^2 + V \right] |\psi\rangle = \sum_{n=1}^{N_s} |n\rangle \langle n| E |\psi\rangle. \quad (3.1)$$

A segunda igualdade da equação acima pode ser reescrita, o que leva a

$$\sum_{n=1}^{N_s} |n\rangle \langle n| \left[\frac{1}{2m} \vec{p}^2 + V \right] |\psi\rangle = \sum_{n=1}^{N_s} |n\rangle \left[\langle n| \frac{1}{2m} \vec{p}^2 |\psi\rangle + \langle n| V |\psi\rangle \right], \quad (3.2)$$

onde a parte cinética $\langle n| \frac{1}{2m} \vec{p}^2 |\psi\rangle$ é uma segunda derivada discreta atuando em $\langle n| \psi\rangle$, ou seja,

$$\langle n | \frac{1}{2m} \vec{p}^2 | \psi \rangle = -\lambda \langle n | \psi \rangle'' . \quad (3.3)$$

A segunda derivada discretizada sobre $\langle n | \psi \rangle$ é representada por $\langle n | \psi \rangle''$ e $\lambda = \frac{\hbar^2}{2m}$. Cabe, agora, escolher uma derivada discreta apropriada, tal que permita recuperar a aproximação tight-binding. Com este propósito utilizaremos expansões em série de Taylor para $\langle n+1 | \psi \rangle$ e $\langle n-1 | \psi \rangle$ como mostradas abaixo:

$$\langle n+1 | \psi \rangle = \langle n | \psi \rangle + \langle n | \psi \rangle' + \frac{1}{2} \langle n | \psi \rangle'' + \frac{1}{6} \langle n | \psi \rangle''' + O(\langle n | \psi \rangle'''') \quad (3.4)$$

$$\langle n-1 | \psi \rangle = \langle n | \psi \rangle - \langle n | \psi \rangle' + \frac{1}{2} \langle n | \psi \rangle'' - \frac{1}{6} \langle n | \psi \rangle''' + O(\langle n | \psi \rangle'''') . \quad (3.5)$$

Somando as duas expressões acima, obtemos

$$\langle n | \psi \rangle'' = \langle n+1 | \psi \rangle + \langle n-1 | \psi \rangle - 2\langle n | \psi \rangle - 2O(\langle n | \psi \rangle'''') \quad (3.6)$$

e, finalmente, desprezando os termos de ordem igual ou superior às derivadas quartas chegamos à relação desejada

$$\langle n | \psi \rangle'' = \langle n+1 | \psi \rangle + \langle n-1 | \psi \rangle - 2\langle n | \psi \rangle . \quad (3.7)$$

Levando em conta as equações 3.1, 3.2 e 3.3, juntamente com a nova definição de derivada segunda, podemos escrever

$$\sum_{n=1}^{N_s} |n\rangle \langle n | H | \psi \rangle = \sum_{n=1}^{N_s} |n\rangle [(V_n + 2)\langle n | \psi \rangle - \langle n+1 | \psi \rangle - \langle n-1 | \psi \rangle] , \quad (3.8)$$

em que definimos $\lambda = 1$ para simplificar. Inserindo a relação de completeza $\sum_{m=1}^{N_s} |m\rangle \langle m| = 1$ na equação acima podemos obter os elementos de matriz do Hamiltoniano, ou seja,

$$H_{n,m} = \langle n | H | m \rangle = -(\langle n+1 | m \rangle + \langle n-1 | m \rangle) + W_n \langle n | m \rangle , \quad (3.9)$$

onde $W_n = V_n + 2$. A equação acima é conhecida, em física do estado sólido, como aproximação tight-binding. Os elementos de matriz não diagonais descrevem o possível tunelamento da partícula ao sítio vizinho. Fazendo uso de operadores de translação do tipo $\exp(-\frac{i}{\hbar} \vec{p}) |n\rangle = |n+1\rangle$ e voltando a considerar que o fluxo magnético é diferente de zero, ou seja, $\vec{p} \Rightarrow \vec{p} - \frac{e\vec{A}}{c}$

onde o vetor potencial é dado por $\vec{A} = \frac{\phi}{2\pi R} \hat{\phi}$, podemos escrever os elementos de matriz como

$$H_{n,m} = \langle n|H|m \rangle = -(z \delta_{n+1,m} + z^* \delta_{n-1,m}) + W_m \delta_{n,m}. \quad (3.10)$$

onde $z = \exp\left(i \frac{2\pi}{N} \frac{\phi}{\phi_0}\right)$.

Dessa forma podemos representar matricialmente o hamiltoniano:

$$\begin{pmatrix} W_1 & z & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & z^* \\ z^* & W_2 & z & 0 & 0 & \dots & & 0 \\ 0 & z^* & W_3 & z & 0 & \dots & & 0 \\ 0 & 0 & z^* & \cdot & \cdot & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdot & \cdot & \cdot & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \cdot & \cdot & \cdot & 0 \\ 0 & & & & & & \cdot & z \\ z & 0 & 0 & \dots & 0 & z^* & W_{N_s} \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

notando que a energia potencial passa a ser representada por um conjunto discreto $\{W_n\}_{n=1}^{N_s}$. Desta maneira os N_s auto-valores $E(\phi)$ e os correspondentes auto-estados $|\psi_E\rangle$ podem ser obtidos através da diagonalização da matriz 3.11 para diferentes tamanhos de anel e diferentes valores de fluxo magnético.

O modelo permite, de modo simples, a inclusão da energia potencial como um conjunto discreto de números, conforme é mostrado esquematicamente pela figura 3.1. Esse fato vem ao encontro de um dos propósitos deste trabalho, a saber, o estudo de potenciais dados por seqüências de substituição. Na próxima seção, serão discutidos aspectos dessas seqüências.

3.2 Seqüências de Substituição

Na seção anterior apresentamos um hamiltoniano cuja energia potencial é dada por um conjunto discreto de números reais, o qual será uma seqüência de substituição. Esta seção é dedicada a definir e discutir aspectos de tais seqüências de números (9).

3.2.1 Definição

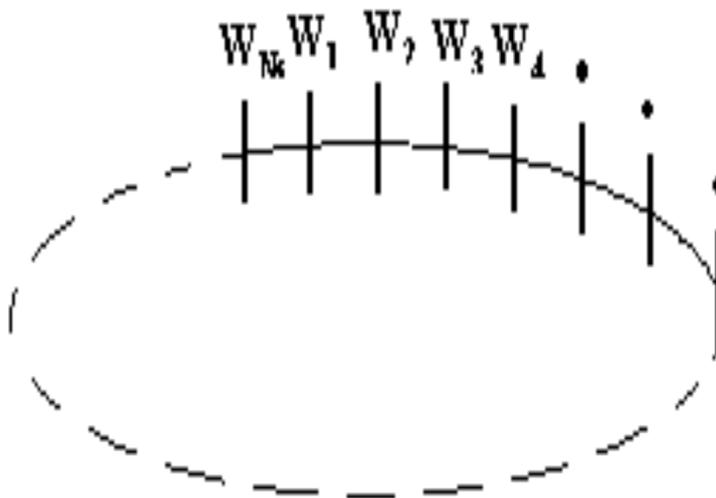


Figura 3.1: representação esquemática dos sítios do anel, caracterizado pelo conjunto $\{W_n\}$ de energias potenciais.

As seqüências que usaremos são construídas por meio de um alfabeto de duas letras $\{a, b\}$ e uma regra de substituição específica para cada seqüência:

$$a \longrightarrow ab \quad b \longrightarrow ba \quad \text{Thue-Morse (TM)}$$

$$a \longrightarrow ab \quad b \longrightarrow aa \quad \text{duplicação de período (PD)}$$

Por exemplo, no caso da seqüência Thue-Morse, começamos a construir a seqüência com apenas a letra a . Em seguida substituímos a letra a por ab , conforme a regra acima, dando origem à nova palavra que agora passa a ter duas letras. Realizando o mesmo procedimento com a nova palavra, substituímos as letras a e b por, respectivamente, ab e ba , o que leva a $abba$. Fazendo novas iterações, para o caso da Thue-Morse, iremos obter

$$abbabaabbaababba\dots$$

Podemos começar com uma das letras e aplicando sucessivamente as regras de substituição geramos o que é chamado de seqüência pene-periódica ou *almost-periodic* (10). Por exemplo, seguindo a prescrição da seqüência duplicação de período obtemos

$$abaaabababaaabaa\dots$$

Também usaremos outras duas seqüências, a saber, Rudin-Shapiro (RS) e *paper-folding*

(PF) que são construídas através de um alfabeto de quatro letras $\{a', b', c', d'\}$, com as regras

$$a' \longrightarrow a'b' \quad b' \longrightarrow a'c' \quad c' \longrightarrow d'b' \quad d' \longrightarrow d'c' \quad \text{Rudin-Shapiro (RS)}$$

$$a' \longrightarrow a'b' \quad b' \longrightarrow c'b' \quad c' \longrightarrow a'd' \quad d' \longrightarrow c'd' \quad \text{paper-folding (PF)}$$

e as identificações $a', b' \longrightarrow a$ e $c', d' \longrightarrow b$ em ambos os casos. Como exemplo, mostramos abaixo os primeiros elementos da seqüência RS:

$$aaabaabaaaabbb\dots$$

O comprimento de todas as seqüências na m -ésima iteração é $N_s = 2^m$. A energia potencial será definida, em cada sítio n , tomando-se $V_n = 0$ se a n -ésima letra na seqüência é a e $V_n = \gamma$ caso seja b , onde $0 < \gamma \leq 1$.

Tais seqüências de substituição podem ser geradas de uma maneira alternativa. A idéia é criar a seqüência da $(m + 1)$ -ésima iteração a partir de uma copia da seqüência associada à m -ésima iteração e em seguida copiar esta mesma seqüência, porém, com algumas inversões de letras. Para tornar claro este novo algoritmo de geração das seqüências, desenvolveremos a idéia para as quatro seqüências que estamos interessados neste trabalho.

Primeiramente consideremos o caso da seqüência Thue-Morse. Se começarmos a seqüência com a letra a , o primeiro passo para construir a próxima iteração é copiar a seqüência anterior, ou seja, repetir a letra a . Em seguida, repetir de maneira invertida a seqüência anterior, ou seja, copiar no lugar da letra a , a letra b . Este procedimento deve ser feito com a nova seqüência de comprimento dois; este algoritmo é mostrado conforme o esquema abaixo:

$$\begin{array}{c} a \\ a \ b \\ ab \ ba \\ abba \ baab \\ abbabaab \ baababba \\ abbabaabbaababba \ abbabaabbaababba \end{array}$$

Figura 3.2: Construção intuitiva da seqüência Thue-Morse .

Para o caso da seqüência duplicação de período temos que primeiramente copiar a seqüência anterior e depois repeti-la invertendo apenas a última letra, isto é:

a
 a b
 ab aa
 abaa abab
 abaaabab abaaabaa
 abaaababababaaabaa abaaababababaaabab

Figura 3.3: Modo intuitivo de gerar a seqüência duplicação de período

A seqüência Rudin-Shapiro é gerada copiando-se a última seqüência gerada e em seguida repetindo sua primeira metade e invertendo a segunda metade como é mostrado abaixo:

a
 a a
 aa ab
 aaab aaba
 aaabaaba aaabbbab
 aaabaabaaaabbbab aaabaababbbaaaba

Figura 3.4: Geração da seqüência Rudin-Shapiro por meio de um algoritmo alternativo

Para formar a $(m + 1)$ -ésima iteração, no caso da seqüência *paper-folding*, copia-se duas vezes seguidas a m -ésima seqüência gerada realizando a inversão da $2^{(m-1)}$ -ésima letra na segunda cópia, o que produzirá o esquema abaixo:

a
 a a
 aa ba
 aaba abba
 aabaabba aabbabba
 aabaabbbaaabbabba aabaabbbaabbabba

Figura 3.5: Construção da seqüência *paper-folding* por meio de uma regra alternativa

Como será visto mais adiante, utilizaremos essas quatro seqüências entre os comprimentos $N_s = 16$ e $N_s = 1024$. O uso das seqüências de substituição do tipo *almost-periodic* como definição da energia potencial é conveniente no contexto de sistemas desordenados, tendo em vista a situação de não-periodicidade e correlação não-perfeita apresentada por tais seqüências.

3.2.2 Uma Hierarquia de Desordem

Cabe, neste ponto, classificar essas seqüências não-periódicas com relação ao grau de desordem das mesmas. Tentaremos identificar uma possível hierarquia de desordem entre as quatro seqüências calculando as transformadas de Fourier de cada uma delas. O critério a ser seguido para determinar se uma seqüência é mais desordenada que a outra é verificar, a partir do espectro de Fourier, os padrões que apresentam menos freqüências, em outras palavras, identificar os espectros com picos de freqüência mais pronunciados. A partir desta análise, interpretaremos como seqüências menos desordenadas aquelas que apresentarem mais freqüências destacadas, vistas no espectro de Fourier.

Sendo feitas essas observações, podemos concluir que as seqüências duplicação de período e *paper-folding* são as mais ordenadas pois apresentam um conjunto de freqüências bem pronunciadas como é mostrado nos gráficos abaixo:

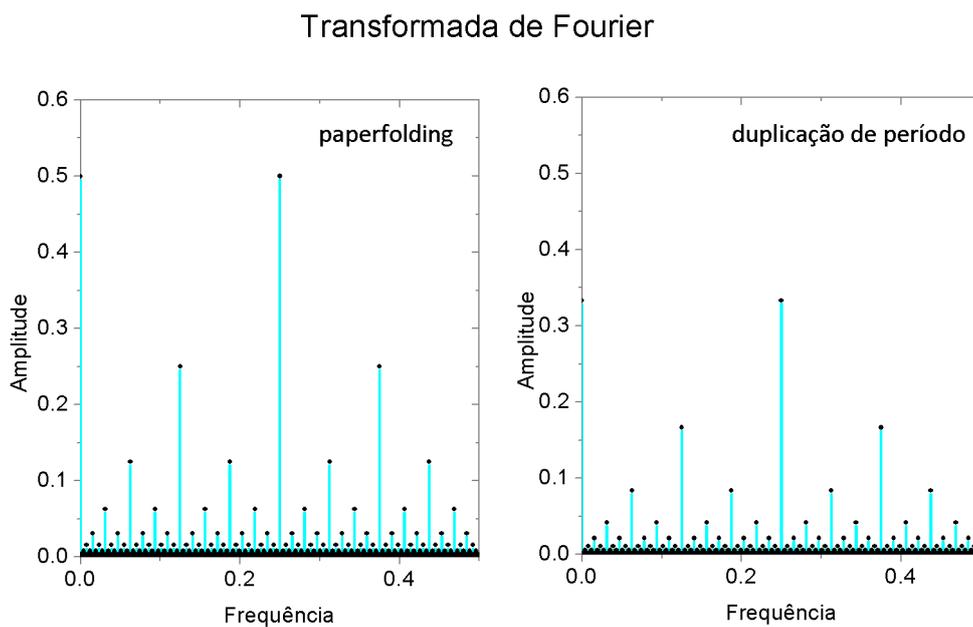


Figura 3.6: Transformada de Fourier das seqüências duplicação de período e *paper-folding*

Por outro lado a seqüência Rudin-Shapiro tem uma transformada de Fourier, mostrada abaixo, que apresenta todas as suas freqüências com o mesmo peso, ou seja, não existem picos bem pronunciados, o que impossibilita identificar algum tipo de estrutura periódica dentro da seqüência. Dessa forma, acreditamos que a seqüência Rudin-Shapiro é a que se aproxima mais do caso totalmente desordenado.

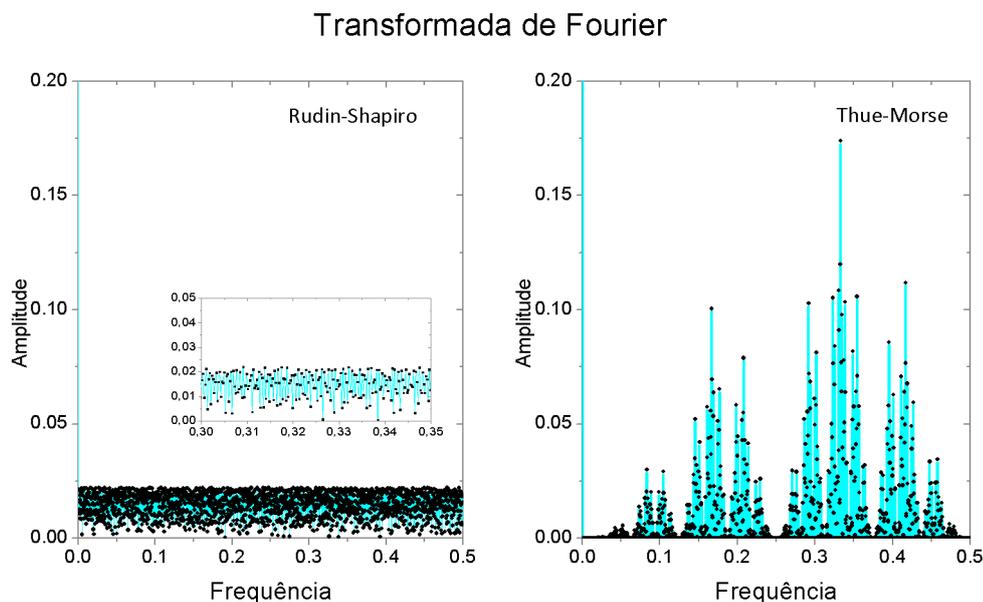


Figura 3.7: Transformada de Fourier das seqüências Rudin-Shapiro e Thue-Morse.

A seqüência Thue-Morse tem características intermediárias em relação aos dois casos apresentados acima, ou seja, o padrão apresentado pelo espectro de Fourier da seqüência Thue-Morse se encontra entre as seqüências duplicação de período, *paper-folding* e Rudin-Shapiro, como é mostrado pela figura acima. Desse modo podemos classificar a seqüência Thue-Morse, com relação ao seu grau de desordem, como seqüência com características intermediárias entre os dois casos apresentados acima.

Como foi visto, o resultado acima foi obtido de maneira puramente intuitiva, sem nenhuma demonstração rigorosa. Mas existem formas matematicamente rigorosas para obter essa hierarquia de desordem entre as seqüências: pode-se quantificar o grau de desordem através do cálculo da medida espectral da função de auto-correlação mostrada abaixo:

$$C(r) = \frac{\sum_{n=1}^N \alpha_n \alpha_{n+r}}{\sum_{n=1}^N |\alpha_n|^2}, \quad (3.12)$$

onde o conjunto $\{\alpha_n\}_{n=1}^M$ é a seqüência de substituição a ser analisada, com $M \geq N + r$.

Realizando o procedimento mencionado acima para cada uma das seqüências, podemos classificá-las por ordem crescente de aleatoriedade da seguinte forma:

periódico / (PD/PF) / TM / RS / desordenado.

Colocamos as seqüências PD e PF entre parênteses pois suas características, reveladas tanto pela medida espectral da função de auto-correlação como pela análise de Fourier, são muito semelhantes. Esperamos que as diferenças quanto ao grau de aleatoriedade dos potenciais, representados pelas seqüências, produzam diferentes tipos espectrais para os níveis de energia, e desta forma expliquem a maior ou menor dificuldade de movimentação das partículas. Ou seja, esperamos que quanto maior a desordem do potencial, menor será a capacidade de transporte (11).

Um dos propósitos deste trabalho é investigar a influência do grau de desordem dos potenciais, representados por cada seqüência, nas propriedades de condução através do cálculo do peso de Drude, e também sua importância frente à influência de temperaturas não nulas.

4 *Resultados a Temperatura Nula*

Nos capítulos anteriores expusemos explicitamente o problema e especulamos acerca de um possível resultado, a saber, as propriedades de condução devem depender da hierarquia de desordem apresentada pelos potenciais. Então, neste capítulo, confrontaremos esta conjectura com alguns resultados obtidos através da diagonalização da matriz 3.11 para as diferentes situações de energia potencial, dadas pelas quatro seqüências de substituição, em situação de temperatura nula. Como metodologia compararemos esses resultados com os obtidos para dois casos de seqüências, a saber, periódica e desordenada.

4.1 Auto-energias

Foram obtidos os espectros de energia para os quatro casos de energias potenciais por meio da diagonalização numérica do hamiltoniano 3.11. Como as auto-energias apresentam estruturas de bandas, conforme foi discutido no capítulo 2, elas foram calculadas dentro da primeira zona de Brillouin para cem valores diferentes de fluxo. Além disso os espectros de energia foram obtidos em função de dois parâmetros, a saber, o tamanho do anel (16 a 1024 sítios) e a amplitude da energia potencial.

Como característica geral das auto-energias temos que o crescimento dos parâmetros (tamanho do anel e amplitude da energia potencial) diminui a curvatura das bandas de energia, conforme é ilustrado pelos gráficos da figura 4.1.

Veremos nas seções seguintes que o achatamento das curvaturas do espectro de energia está relacionado com a dificuldade de transporte do sistema, visto que o peso de Drude se trata de uma soma das segundas derivadas de cada banda.

4.2 Peso de Drude

Primeiramente definiremos duas configurações, de quantidade de partículas, que iremos utilizar nos cálculos do peso de Drude. Vamos considerar que os elétrons ocupem metade e

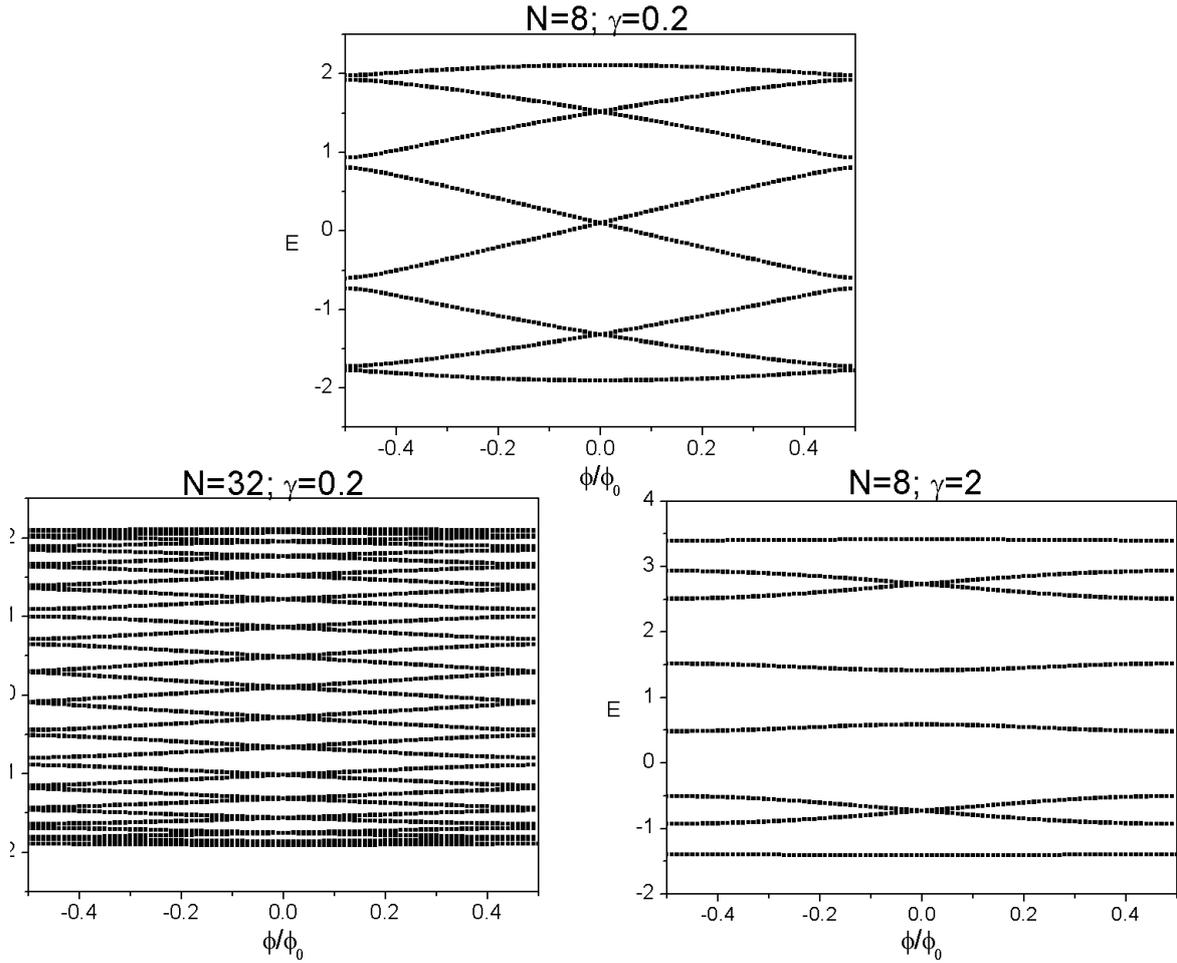


Figura 4.1: Figura ilustrando o achatamento das curvaturas das bandas em função do tamanho do anel e amplitude de potencial.

um quarto dos níveis permitidos no espectro de energia; chamaremos essas duas configurações de preenchimentos $1/2$ e $1/4$. Esses preenchimentos têm sido bastante estudados no contexto da aproximação tight-binding para sistemas unidimensionais com ou sem interação entre as partículas por configurarem duas situações distintas e de grande interesse: para o preenchimento $1/2$ há uma transição metal-isolante, enquanto o preenchimento $1/4$ descreve a situação metálica (12).

O peso de Drude foi calculado para o valor de fluxo que minimiza a energia do estado fundamental do sistema. Este procedimento foi primeiramente proposto por Bouzerar, Poilblanc e Montambaux (12), baseados no argumento de Shastry e colaboradores (13) de que essa quantidade descreve uma situação de equilíbrio entre as partículas carregadas. Portanto o peso de Drude deve ser calculado no valor de ϕ onde a energia do estado fundamental do sistema seja mínima; no nosso caso este valor é $\phi_{\min}/\phi_0 = \pm 0.5$ como demonstrado por Nakano (14). Desse modo o peso de Drude será calculado da forma mostrada pela relação

$$D = N \left(\sum_{n=1}^{M_{oc}} \frac{\partial^2 E_n}{\partial \phi^2} \right) \Big|_{\phi=\phi_{\min}}. \quad (4.1)$$

Antes de apresentar os resultados para os quatro casos de seqüências de substituição, mostraremos os pesos de Drude obtidos para os dois casos extremos de ordenamento de seqüência, isto é, os casos em que a seqüência é periódica e desordenada. Escolhemos como seqüência periódica binária a mais simples possível (*ababababababab...*) e por meio de uma rotina geradora de números aleatórios construímos a seqüência desordenada binária. As figuras 4.2 e 4.3 mostram como círculos cheios os pesos de Drude, em função do tamanho do anel N_s e em várias amplitudes de potencial, calculados para as seqüências periódica e desordenada nas duas situações de preenchimento propostas acima (o significado das curvas será explicado mais adiante).

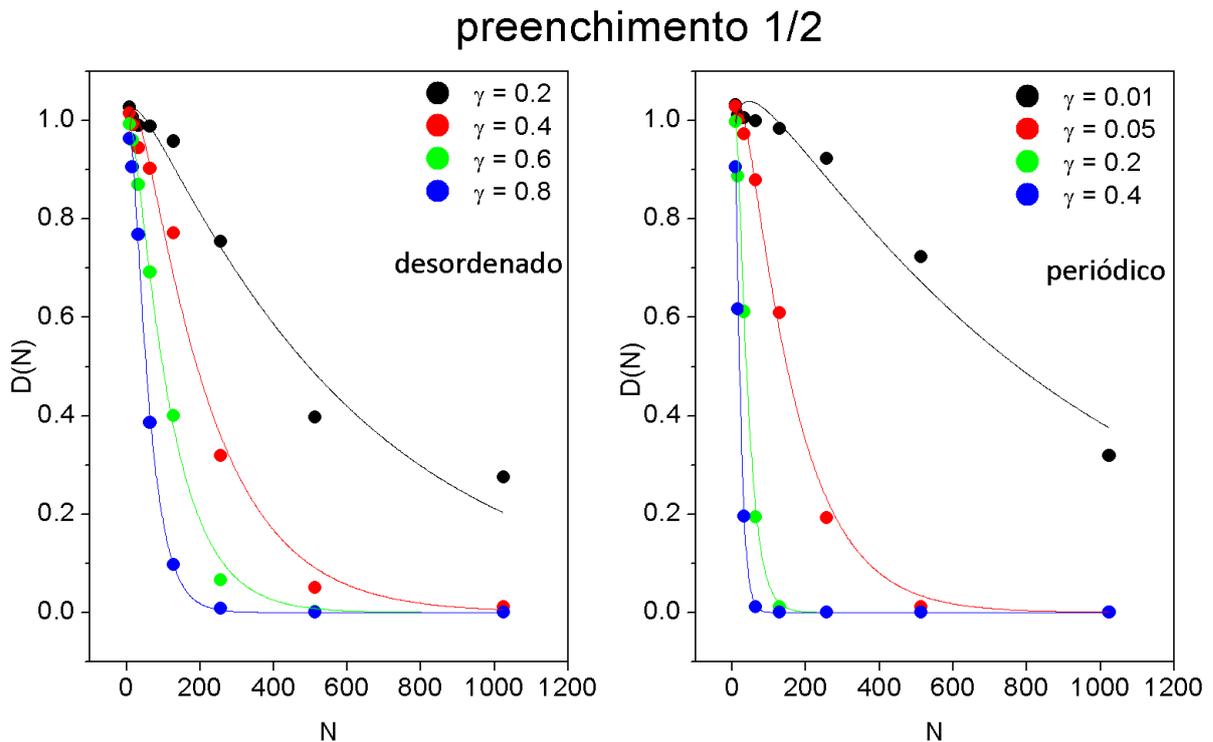


Figura 4.2: Peso de Drude (preenchimento 1/2) para os casos das seqüências periódica e desordenada.

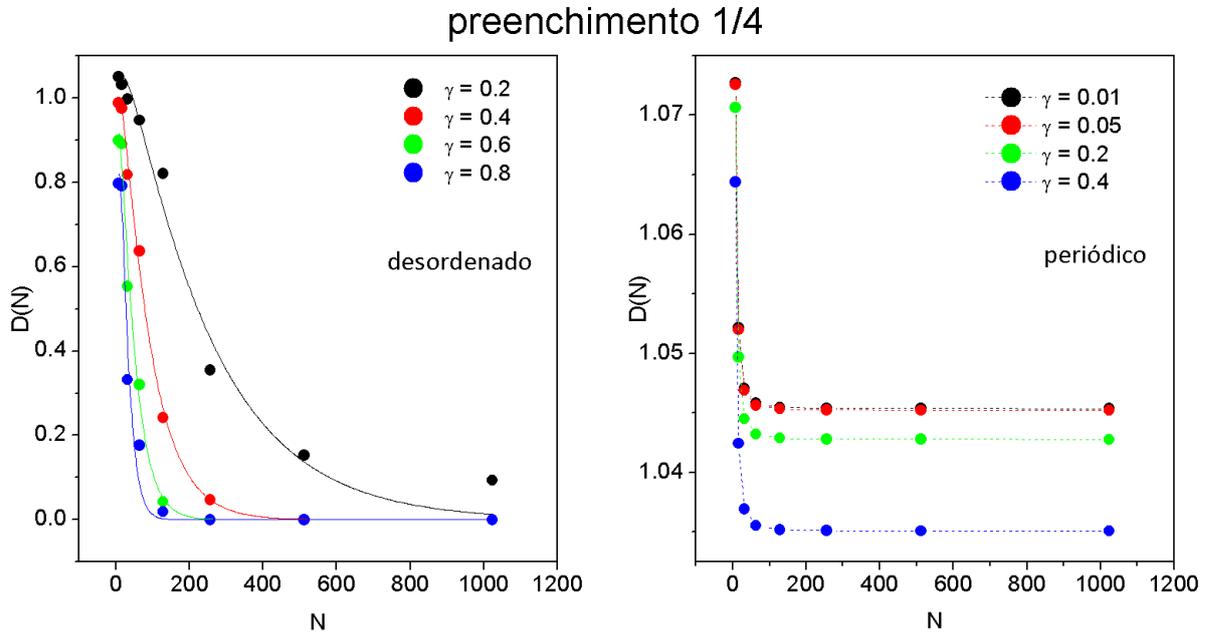


Figura 4.3: Peso de Drude para os casos das seqüências periódica e desordenada

Mostramos a seguir nas figuras 4.4 e 4.5, o peso de Drude D em função do tamanho do anel N_s para os quatro potenciais de substituição. O aspecto geral de $D(N_s)$ bem como sua taxa de decaimento, nas quatro situações, nos confirmam uma ordem bem definida de condução, ou seja, a hierarquia de condução determinada por $D(N_s)$ nos casos de preenchimentos 1/2 e 1/4 é $(PF/RS/TM/PD)$ e $(TM/RS/PD/PF)$, respectivamente.

Conforme foi discutido na seção (2.3) sobre o peso de Drude, podemos classificar os quatro sistemas, através do comportamento assintótico de $D(N_s)$, em condutor ou isolante. Dessa forma, com base nos resultados numéricos contidos na figura 4.4 (preenchimento 1/2), os anéis com potenciais dados pelas seqüências RS , TM e PD podem ser considerados isolantes, enquanto que para a seqüência PF temos a situação condutora. Realizando o mesmo procedimento com os dados da figura 4.5 (preenchimento 1/4), verificamos que os anéis com as seqüências RS , PD e PF são classificados como sistemas isolantes, enquanto que no caso da seqüência TM são considerados como sistemas condutores.

Utilizando os resultados das seqüências periódica e desordenada a título de comparação, temos que o caso da seqüência Thue-Morse se aproxima mais do comportamento periódico. O caso da seqüência Rudin-Shapiro é o que se assemelha mais ao comportamento desorde-

nado. Acreditamos que esta comparação não seja suficiente para determinar uma classificação, para os quatro sistemas pene-periódicos, quanto à condutividade. No próximo capítulo voltaremos a essa discussão considerando as excitações térmicas e outras configurações de número de partículas, o que permitirá realizar uma comparação mais completa com os casos periódico e desordenado.

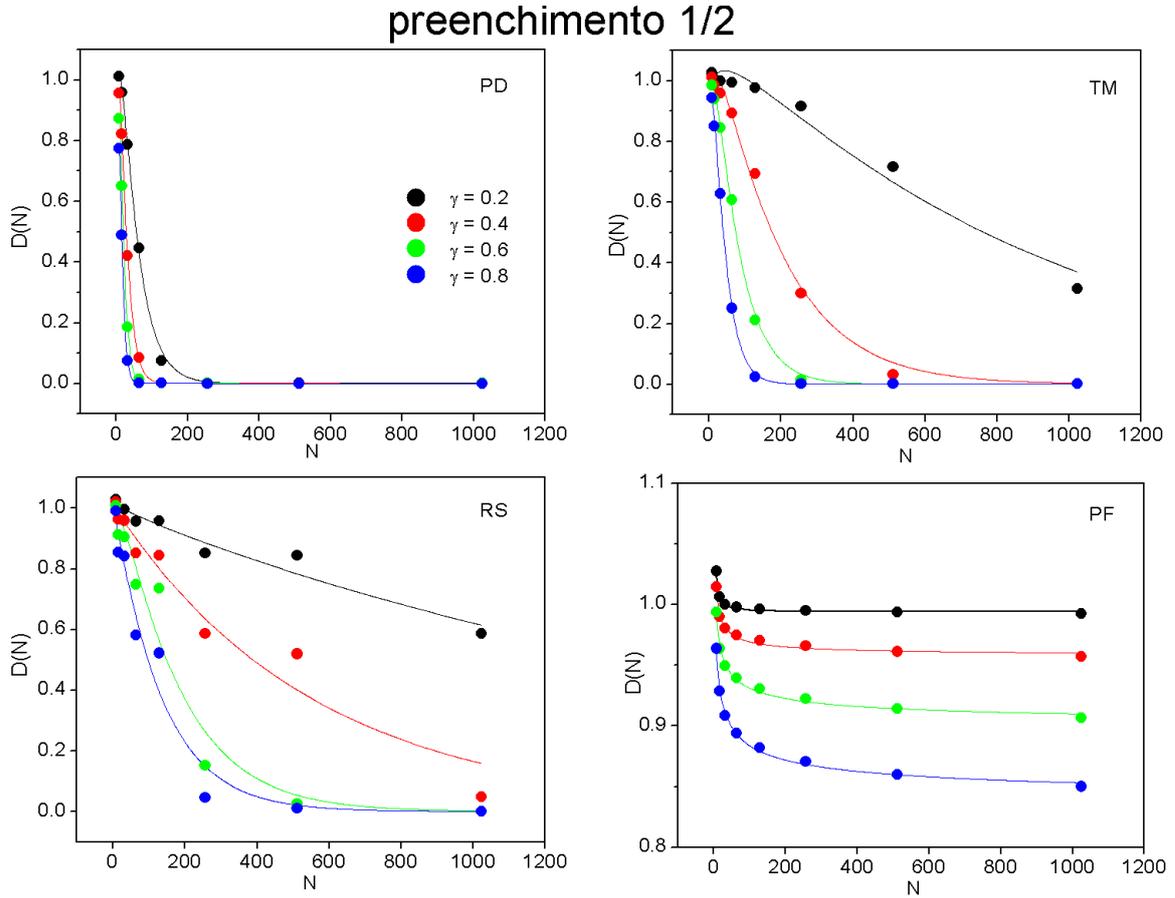


Figura 4.4: Peso de Drude para a situação de preenchimento 1/2, cada curva corresponde a uma amplitude de potencial.

Tem sido proposto no contexto de modelos de Hubbard (8) (12) (15) que, em geral, sistemas isolantes mostram um decaimento exponencial com relação ao tamanho do sistema, $D(N) \propto \exp(-N/\xi)$, onde ξ é um parâmetro que nos indicará a capacidade de condução do sistema, ou seja, o sistema se revelará mais isolante quanto menor for o valor de ξ . Não nos preocupamos neste trabalho em saber se o parâmetro ξ é realmente o comprimento de localização de Anderson (16) mas, talvez como um abuso de linguagem, chamaremos ξ de comprimento de localização.

A capacidade de condução dos sistemas varia de isolante bem definidos (por exemplo, duplicação de período para o caso de preenchimento 1/2) a condutores (como é o caso da sequência Thue-Morse para o preenchimento 1/4), com transições entre esses estados em alguns casos.

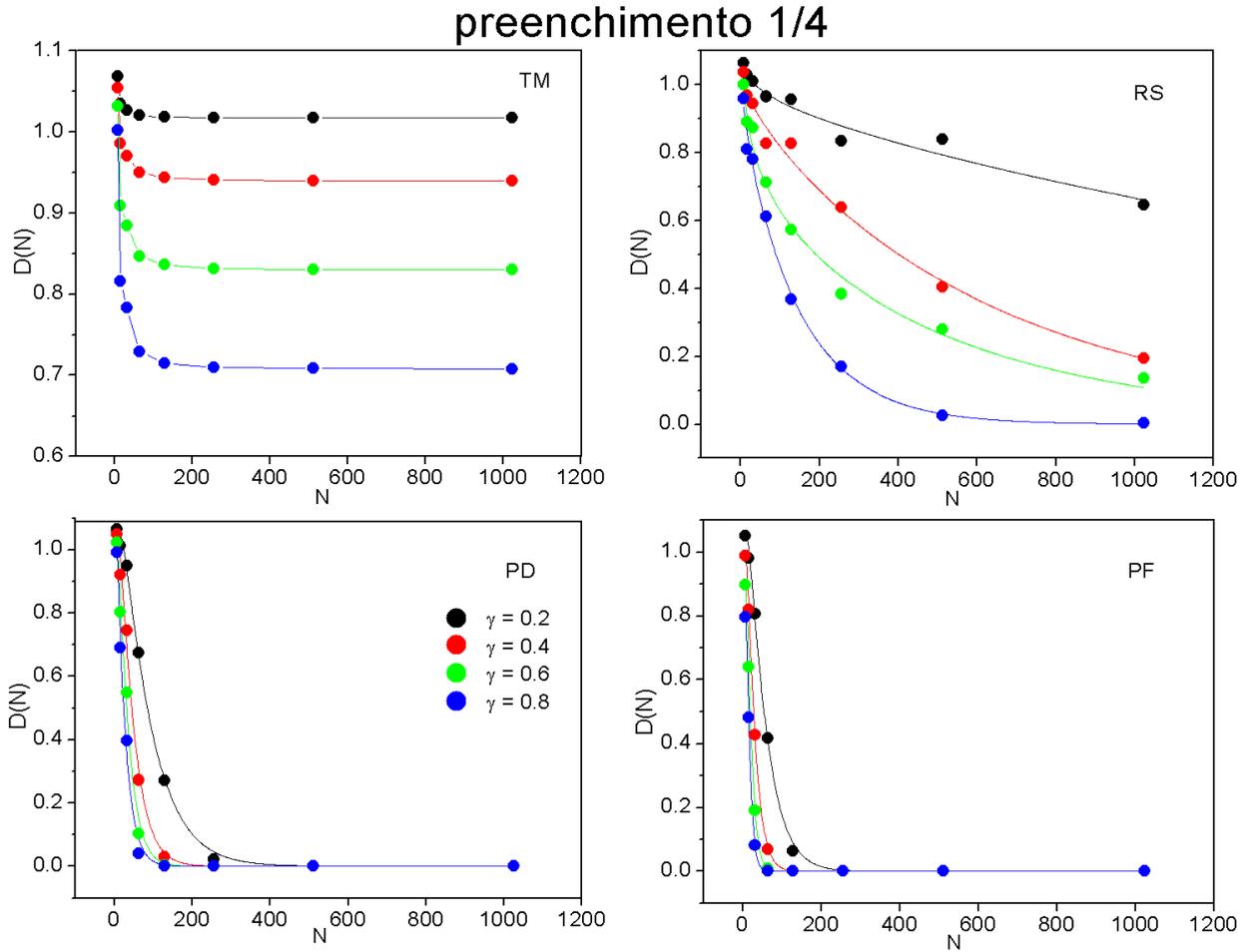


Figura 4.5: Peso de Drude para a situação de preenchimento 1/4, cada curva corresponde a uma amplitude de potencial.

Portanto tentaremos uma função mais geral que a apresentada acima com o propósito de ajustar a melhor curva aos pontos calculados numericamente, a saber,

$$D(N) = A + BN^v \exp(-N/\xi), \quad (4.2)$$

onde os parâmetros A , B , v e ξ foram calculados usando uma rotina chamada teste- χ^2 . Os pontos numéricos de $D(N)$ foram calculados para os tamanhos $N = 2^m$, onde m é inteiro variando de 4 a 10 e $D(N)$ foi normalizado pelo valor do peso de Drude do maior anel ($N_s = 1024$) em situação de potencial nulo; esta escolha foi totalmente arbitrária. Optamos por não calcular $D(N)$ em mais pontos entre $N = 16$ e $N = 1024$ pois isto significaria considerar seqüências incompletas, visto que cada iteração tem um tamanho definido na sua construção (potências de 2). A equação 4.2 foi escolhida para tomar em conta todos os possíveis comportamentos de condução. Desse modo houve situações em que somente apareceram dependências dos parâmetros B , v e

ξ , o que leva aos casos puramente isolante e transição metal-isolante. Por outro lado, houve situações em que os parâmetros A , B e v eram capazes de ajustar a curva (neste caso podemos considerar $\xi \rightarrow \infty$), levando aos casos de sistemas condutores. A maioria dos casos apresentou dependência sobre o conjunto de parâmetros B , v e ξ , exceto para caso *paper-folding* na situação de preenchimento $1/2$, onde $D = A + BN^v$. Portanto, nesta situação, D mostra nenhuma dependência sobre ξ . Por outro lado, o caso Thue-Morse na situação de preenchimento $1/4$ não admitiu o ajuste descrito acima devido a infinitos conjuntos de parâmetros satisfazerem o ajuste.

As curvas ajustadas a partir da equação 4.2 aparecem nas figuras como linhas cheias, junto com os pontos numéricos calculados por meio da equação 4.1 (círculos cheios). As curvas tracejadas são para os casos em que o ajuste proposto pela equação 4.2 não funciona. Vemos excelente concordância nos casos duplicação de período e *paper-folding* e no caso Thue-Morse em situação de preenchimento $1/2$. Não há boa concordância no caso Rudin-Shapiro e para Thue-Morse (preenchimento $1/4$) não existe concordância.

Até aqui, praticamente repetimos os cálculos e análises feitos em um recente trabalho realizado por Pellegrino (17). Agora realizaremos observações, adicionais àquele trabalho, em relação aos cálculos do peso de Drude.

4.2.1 O caso da seqüência Rudin-Shapiro

Como foi mencionado acima, o ajuste da curva por meio da equação 4.2 não está em boa concordância com os pontos numéricos. O interessante nesta situação é que o peso de Drude (o conjunto de pontos numéricos) apresenta um decaimento conforme o tamanho do anel aumenta, ou seja, a seqüência Rudin-Shapiro se comporta como isolante apesar de não admitir boa concordância com o ajuste proposto. Então proporemos uma maneira de resolver esta aparente contradição, considerando duas hipóteses.

A primeira hipótese é que acreditamos que a lei de decaimento seja de fato robusta, isto é, em princípio todos os casos classificados como isolante devem seguir a descrição dada pela equação 4.2. A outra hipótese é que o sistema com a seqüência Rudin-Shapiro é de fato isolante. Portanto, com essas duas hipóteses em mãos, devemos ajustar de uma outra maneira os pontos numéricos, com a mesma lei de decaimento. Assim sendo, proporemos um ajuste alternativo, considerando uma separação no conjunto de pontos numéricos, o qual será justificado devido a uma propriedade existente na seqüência Rudin-Shapiro.

Conforme foi visto no capítulo anterior, a cada iteração a seqüência Rudin-Shapiro tem seu tamanho dado por $N_s = 2^m$, como as demais seqüências. Para ilustrar, construímos abaixo a

seqüência Rudin-Shapiro até a iteração $m = 5$.

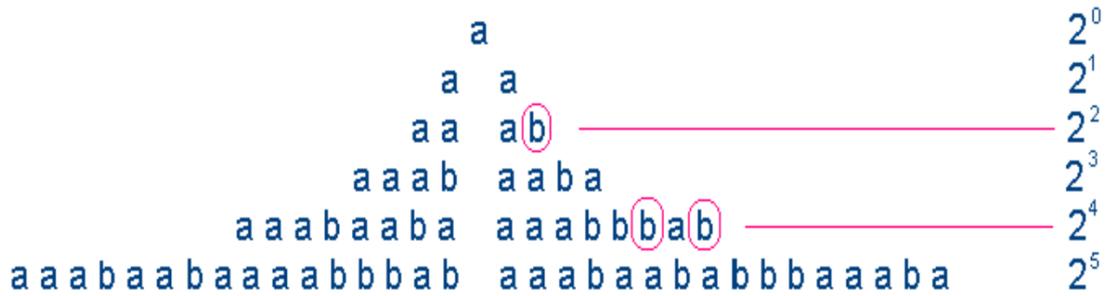


Figura 4.6: Observamos nas iterações ímpares que as quantidades de letras b são iguais entre as duas metades da seqüência.

Se olharmos somente para as iterações ímpares ($m = 1, 3, 5, \dots$) e dividirmos a seqüência em duas partes iguais, veremos que as quantidades de letras b são iguais nas duas metades da seqüência. Isto deixa de acontecer no caso das iterações pares ($m = 2, 4, 6, \dots$); neste caso encontramos mais letras b na segunda metade da seqüência. Desse modo classificaremos a seqüência Rudin-Shapiro em dois tipos, Rudin-Shapiro ímpar e Rudin-Shapiro par. Agora estamos aptos a propor uma maneira de ajustar a curva, dada pela equação 4.2, aos pontos numéricos.

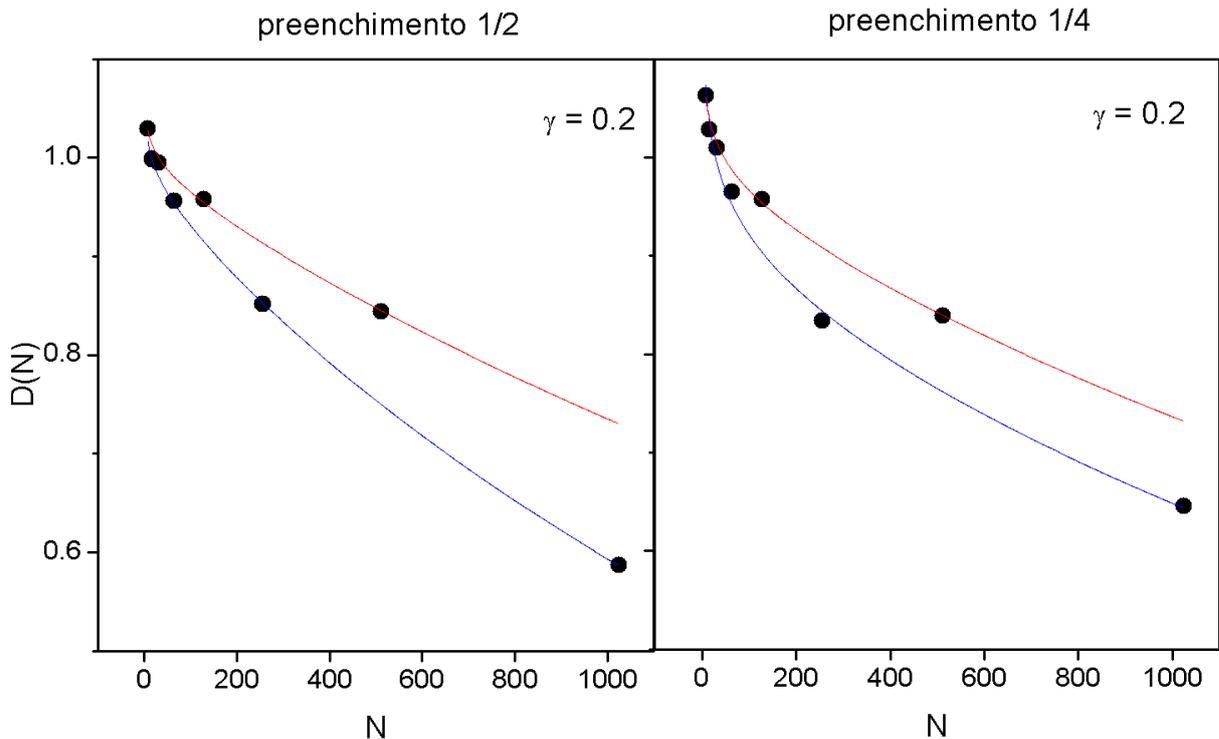


Figura 4.7: O duplo ajuste indica que devem existir dois comprimentos de localização que dependem do tipo (par ou ímpar) de iteração da seqüência

Supondo que existam dois tipos de seqüências (Rudin-Shapiro par e ímpar), basta fitar os pontos das iterações ímpares separadamente dos pontos das iterações pares. Este procedimento nos parece satisfatório, melhorando de maneira significativa a concordância entre os pontos numéricos e lei de decaimento, como mostra a figura 4.7.

Cabe observar que apesar de termos ajustado o comportamento do sistema por meio de duas curvas, encontrando dois comprimentos de localização diferentes, acreditamos que essa diferença no limite $N_s \rightarrow \infty$ não apresente mudanças nas propriedades de condução do sistema. Em outras palavras, acreditamos que este possa ser um efeito do tamanho do anel, o que pode ter conseqüências se se considera anéis de tamanho finito.

5 *Temperaturas Finitas*

Vimos nos capítulos anteriores que o peso de Drude depende exclusivamente do espectro de energia que o sistema apresenta. Além disso, para calcular essa quantidade, utilizamos os níveis do espectro ocupados de forma a obter o estado fundamental caracterizando a condição $T = 0$, mas para o caso $T \neq 0$ esse procedimento não é válido visto que as partículas podem migrar para níveis mais energéticos. Neste capítulo descreveremos como foi obtida a relação para calcular o peso de Drude considerando temperatura não nula e em seguida mostraremos os resultados obtidos. A partir da análise dos cálculos do peso de Drude, para os preenchimentos $1/2$ e $1/4$, optamos por calcular o peso de Drude para dois preenchimentos alternativos.

5.1 Ensemble canônico

Considere o sistema, anel atravessado por um fluxo magnético, em contato com um reservatório térmico, à temperatura T , sendo que o sistema composto (anel + reservatório) está isolado e em equilíbrio termodinâmico. Dessa forma valem os postulados fundamentais da mecânica estatística de equilíbrio (18), ou seja, a probabilidade P_j de encontrar o sistema (anel) num particular estado microscópico j será dada por

$$P_j = c \Omega_R(E_0 - E_j), \quad (5.1)$$

onde c é uma constante de normalização, E_0 e E_j são as energias total (anel + reservatório) e do sistema (anel) no estado j e $\Omega_R(E)$ é o número de estados microscópicos acessíveis ao reservatório térmico com energia E . Devido ao reservatório ser muito maior que o sistema, P_j se reduz a

$$P_j = \frac{\exp(-\beta E_j)}{\sum_k \exp(-\beta E_k)}, \quad (5.2)$$

onde definiremos $\beta = 1/T$ (ou seja, $k_B = 1$). Então, o sistema constituído pelo conjunto de microestados $\{j\}$ terá uma distribuição de probabilidades dada pela equação 5.2 sempre que estiver em contato com um reservatório térmico à temperatura T . Cada microestados é inteiramente caracterizado pelo conjunto de números

$$\{n_1, n_2, \dots, n_i, \dots\} = \{n_i\}, \quad (5.3)$$

onde n_i designa o número de partículas que ocupam a i -ésima banda de energia. No nosso caso $n_i = 0$ ou 1 , para qualquer i , pois estamos trabalhando com férmions. Sabendo que existem N_s níveis de energia a serem ocupados por M_{oc} partículas, onde $M_{oc} = N_s/2$ (preenchimento $1/2$) ou $M_{oc} = N_s/4$ (preenchimento $1/4$), o número de possíveis configurações é determinado por

$$J = \binom{N_s}{M_{oc}}, \quad (5.4)$$

ou seja, o número de microestados acessíveis é dado pela combinação de N_s , M_{oc} a M_{oc} . Desse modo, para realizar as médias temos que levar em conta todos os possíveis microestados. Este procedimento não é viável computacionalmente devido ao número de possíveis microestados ser muito grande. Por exemplo, para sistemas com $N_s = 32$ e $M_{oc} = 16$ temos $J \sim 6 \times 10^8$, o que inviabiliza os cálculos.

Tendo em vista a dificuldade apresentada em calcular médias de quantidades físicas no ensemble canônico, mostraremos uma outra maneira de calcular o peso de Drude para temperaturas finitas na próxima seção.

5.2 Ensemble grande canônico

O ensemble grande canônico está associado a um sistema em contato com um reservatório térmico e de partículas, tal que o sistema mais o reservatório estejam em equilíbrio termodinâmico. A função de partição, para férmions, neste ensemble é dada por

$$\Xi = \prod_{i=1}^{N_s} \left\{ \sum_{n=0}^1 \exp[-\beta(e_i - \mu)n] \right\}, \quad (5.5)$$

onde e_i é a energia do i -ésimo nível (sendo que $1 \leq i \leq N_s$), n é o número de partículas possíveis de se encontrar em cada nível ($n = 0$ ou 1), β é o inverso da temperatura e μ é o potencial químico. O valor esperado $\langle n_i \rangle$ do número de ocupação do i -ésimo nível pode ser obtido por meio da relação

$$\langle n_i \rangle = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln \Xi}{\partial e_i}. \quad (5.6)$$

Substituindo a equação 5.5 na equação acima, obtemos a expressão explícita para $\langle n_i \rangle$

$$\langle n_i \rangle = \frac{1}{\exp\left(\frac{e_i - \mu}{T}\right) + 1}, \quad (5.7)$$

que é conhecida como distribuição de Fermi-Dirac. Através da equação 5.7 pode-se notar que $0 \leq \langle n_i \rangle \leq 1$, o que indica concordância com as exigências do princípio de exclusão de Pauli. Na próxima seção veremos como utilizar essa distribuição para calcular o peso de Drude.

5.3 Peso de Drude para temperaturas finitas

Sabemos que a ocupação dos níveis de energia pelas partículas no caso de temperatura diferente de zero sofrerá mudanças em relação à configuração no estado fundamental. No nosso caso, os níveis de ocupação serão as próprias bandas que compõem o espectro de energia do sistema. Dessa forma, com o auxílio da distribuição de Fermi, podemos associar um valor esperado $\langle n_i \rangle$ a cada i -ésimo nível de energia e em seguida calcular o valor médio sobre a quantidade física desejada.

Antes de obter os valores esperados sobre o peso de Drude, através da distribuição de Fermi-Dirac, temos que levar em conta a restrição sobre a conservação do número total de partículas. Sabendo que existem M_{oc} partículas no sistema, esse vínculo pode ser expressado como

$$M_{oc} = \sum_i \langle n_i \rangle = \sum_i \frac{1}{\exp\left(\frac{e_i - \mu}{T}\right) + 1}. \quad (5.8)$$

Através da equação acima calculamos numericamente o potencial químico, conhecendo o espectro de energia e considerando que o sistema está a uma dada temperatura T . Com o potencial químico (em função de T , do espectro e do número de partículas), podemos calcular os valores esperados do peso de Drude por meio da relação

$$D(T) = N_s \sum_i \frac{\partial^2 e_i}{\partial \phi^2} \langle n_i \rangle = N_s \sum_i \frac{\frac{\partial^2 e_i}{\partial \phi^2}}{\exp\left(\frac{e_i - \mu}{T}\right) + 1}. \quad (5.9)$$

Note que quando $T = 0$ em 5.9, recupera-se a equação 4.1 que foi usada no capítulo anterior para situação de temperatura nula. Estaremos interessados na situação em que apenas alguns elétrons que estavam abaixo da energia de Fermi e_F sejam excitados a estados com energias superiores a e_F ; neste contexto diremos que o sistema se encontra no regime de temperaturas finitas. Para quantificar esse regime usamos a seguinte relação:

$$T \ll e_F. \quad (5.10)$$

Através dos espectros de energia pôde-se observar que energia de Fermi não se modifica significativamente em função do tamanho do anel e do tipo de seqüência usada como energia potencial. Então, com base nas observações do espectro de energia, acreditamos que a faixa de temperaturas finitas é dada satisfatoriamente por meio da relação

$$0 < T \leq 0.02. \quad (5.11)$$

Portanto calcularemos o peso de Drude dentro dessa faixa de temperatura e, por se tratar de um problema computacional, não conseguiremos calcular valores esperados para temperaturas muito baixas.

5.4 Resultados para os preenchimentos 1/2 e 1/4

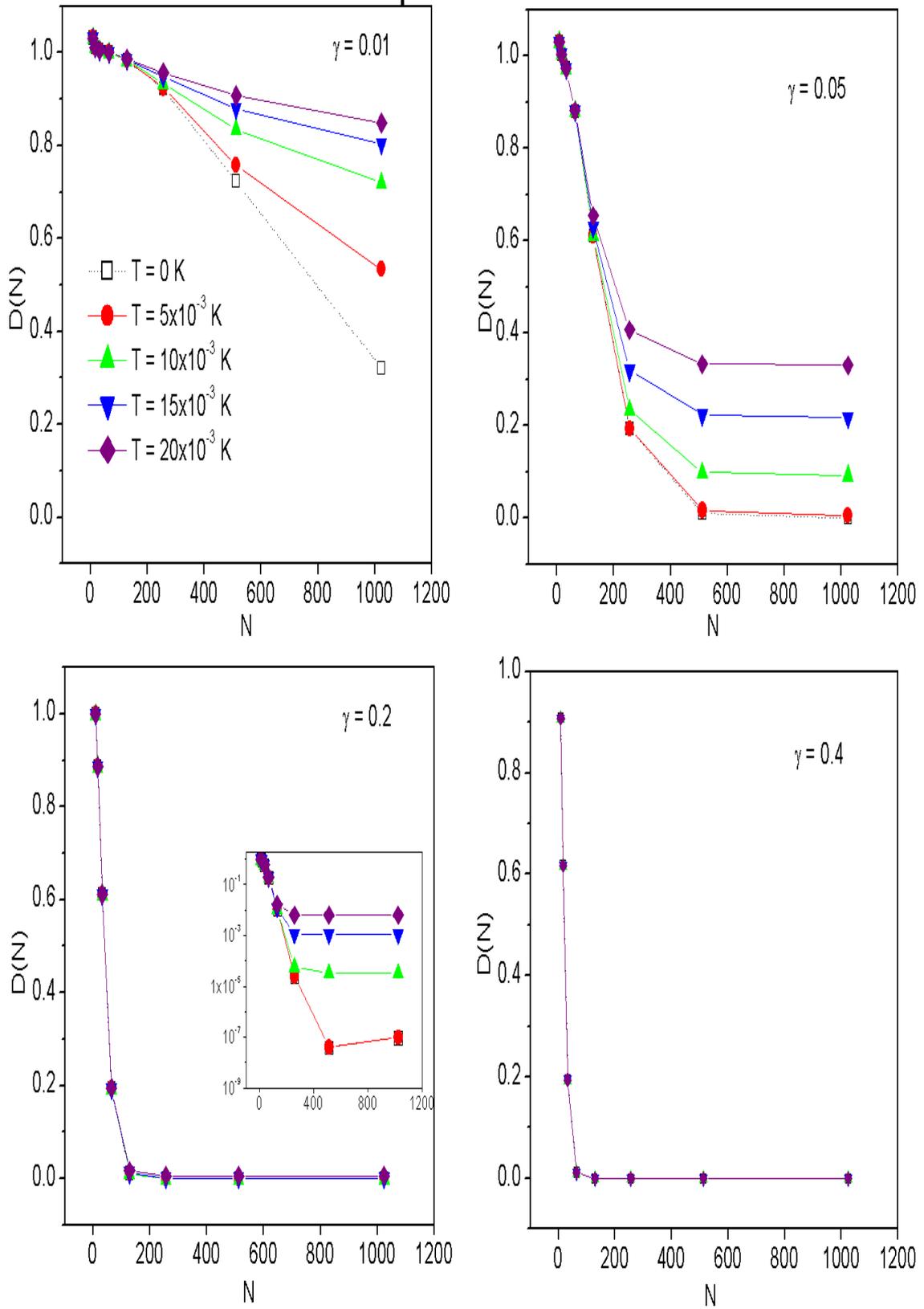
Na seção anterior vimos como calcular o peso de Drude para temperaturas finitas. Nesta seção apresentaremos os resultados obtidos por meio das equações da seção anterior e analisaremos alguns dos resultados mais interessantes.

5.4.1 Preenchimento 1/2

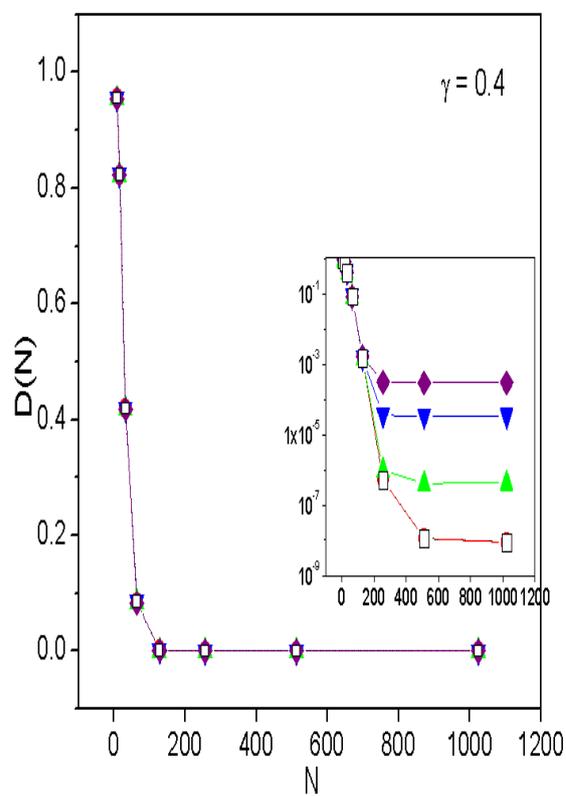
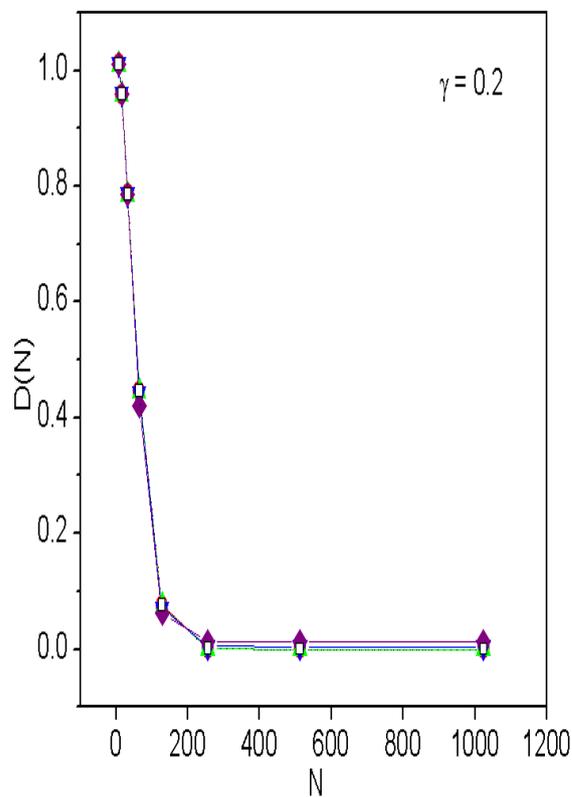
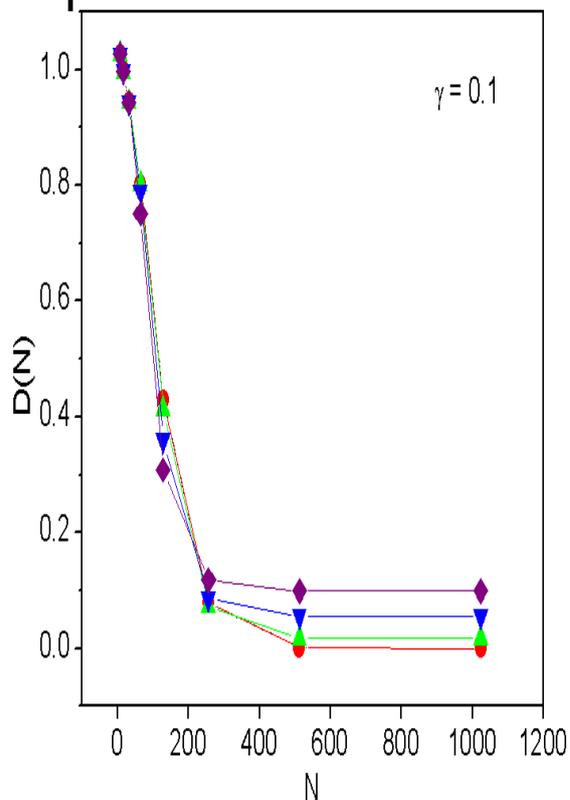
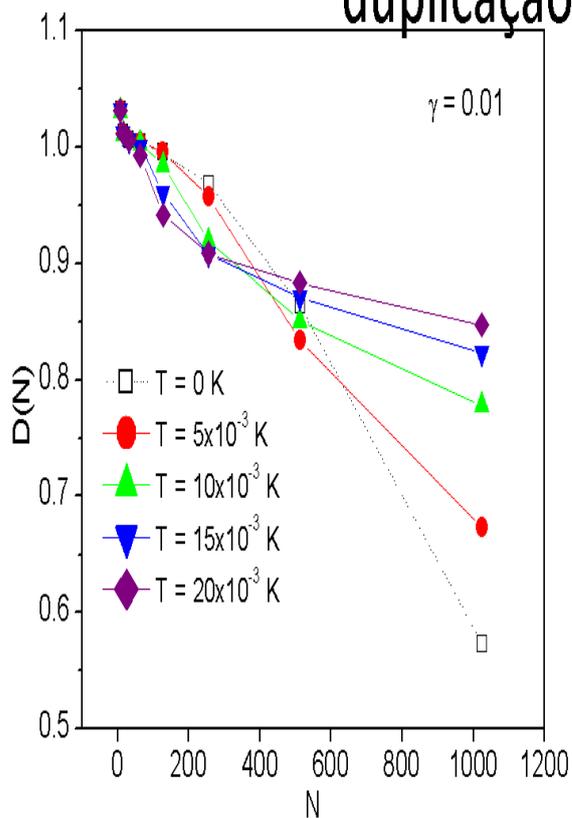
Não tentaremos ajustar a equação 4.2, expressão proposta para temperatura nula, aos pontos numéricos calculados a temperatura finita, pois a equação 4.2 não depende da temperatura. Os resultados numéricos mostram que o entendimento, por meio de uma equação de ajuste, se torna difícil. Desse modo, não proporemos qualquer tipo de ajuste para o caso em que consideramos temperatura não nula. Esse tipo de dificuldade não nos impede de caracterizar a capacidade de condução dos sistemas através dos dados numéricos.

O peso de Drude foi calculado nos seis casos de seqüência para quatro temperaturas e amplitudes de potencial diferentes, conforme é mostrado nas figuras que seguem.

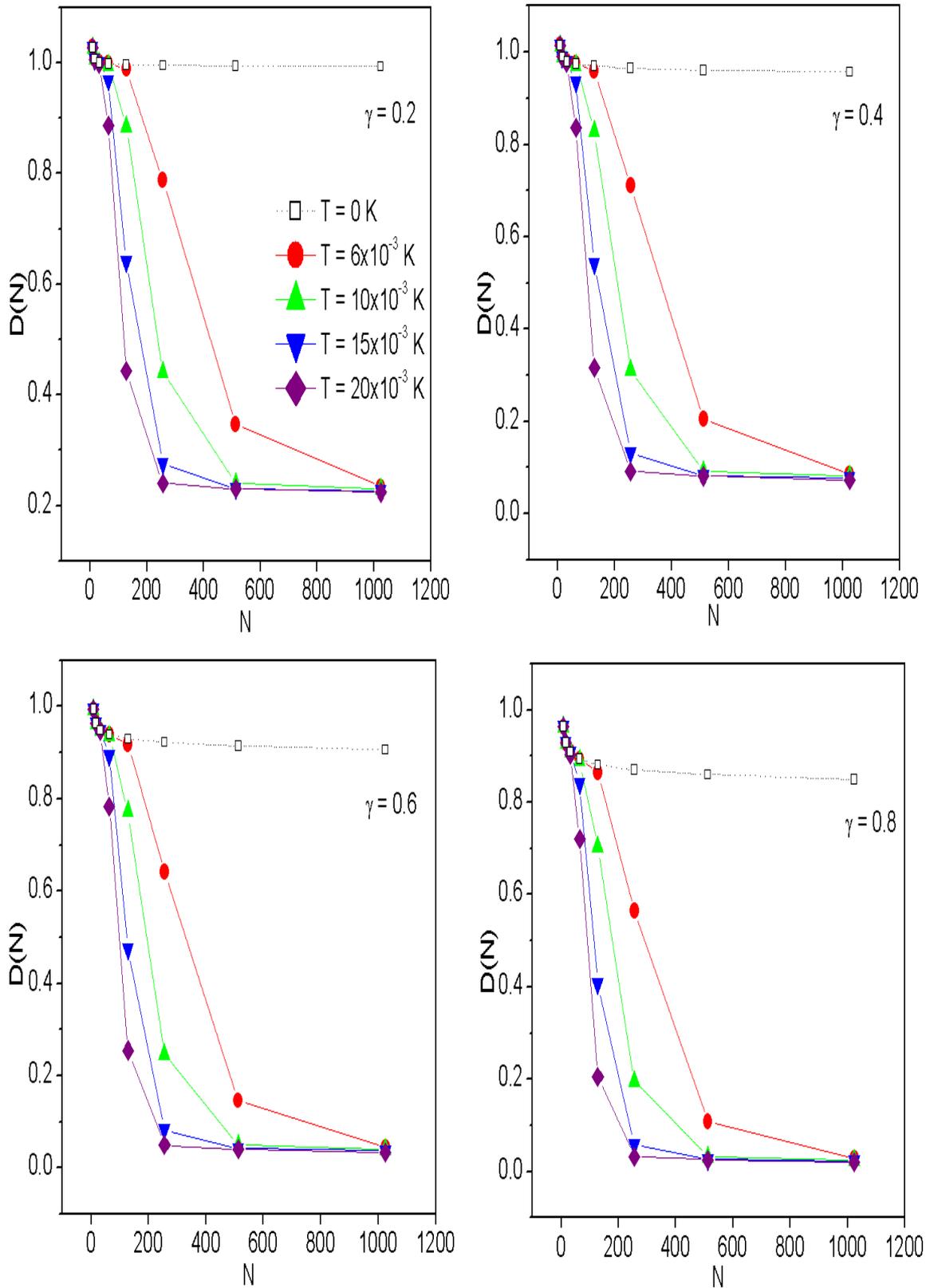
periódico



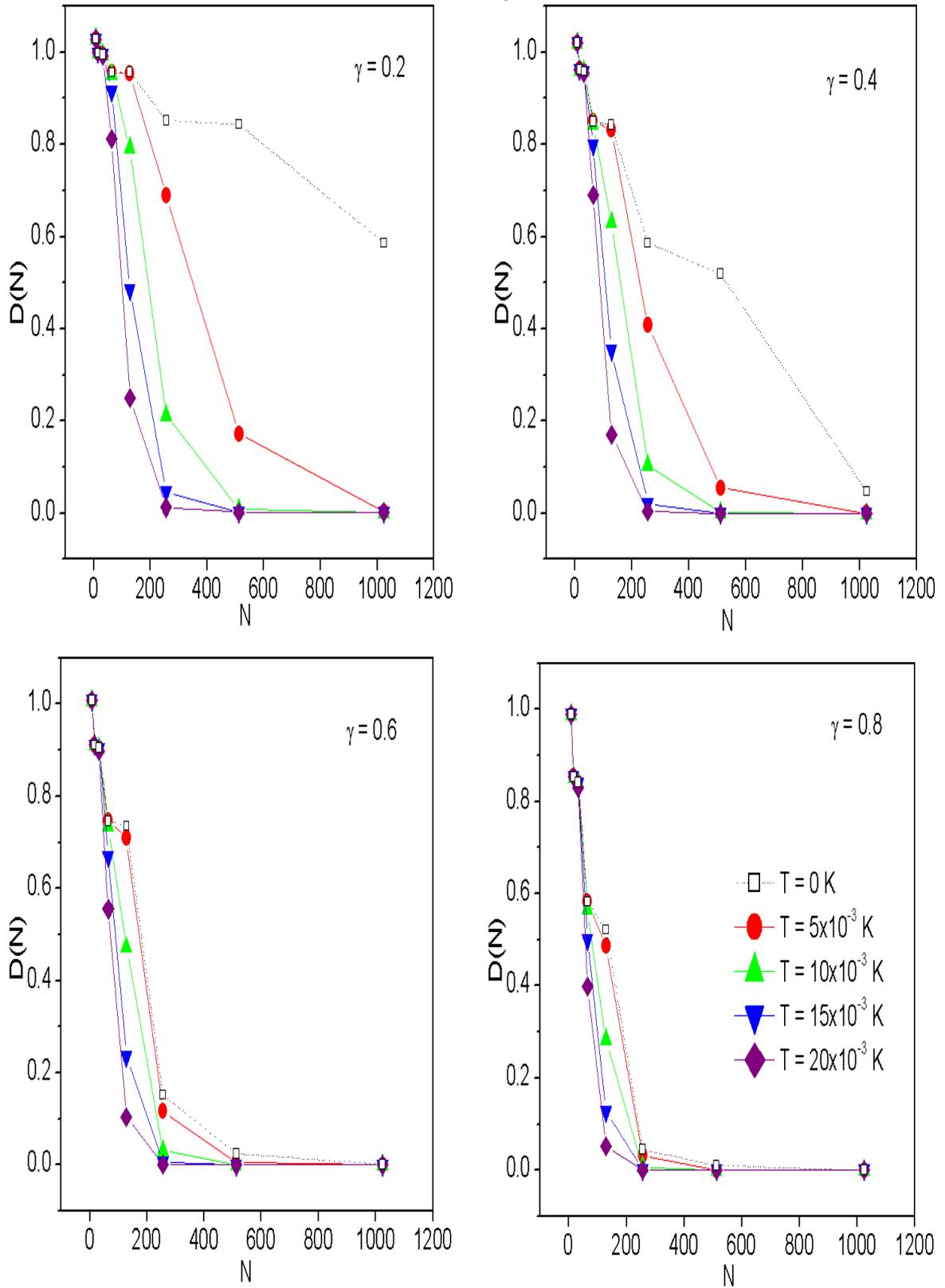
duplicação de período



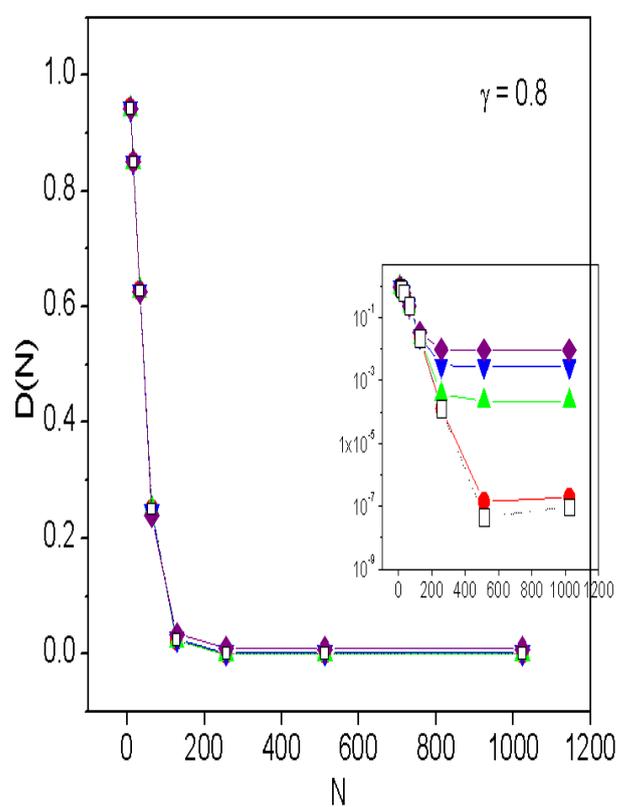
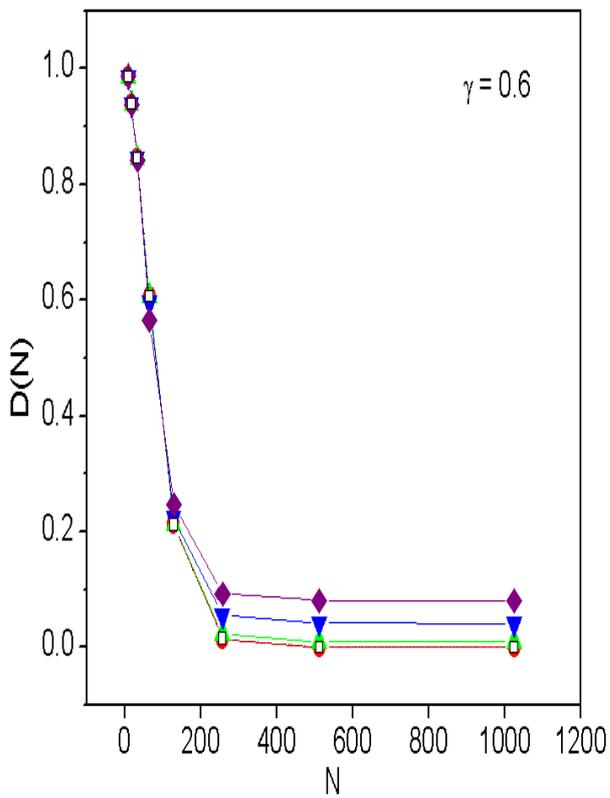
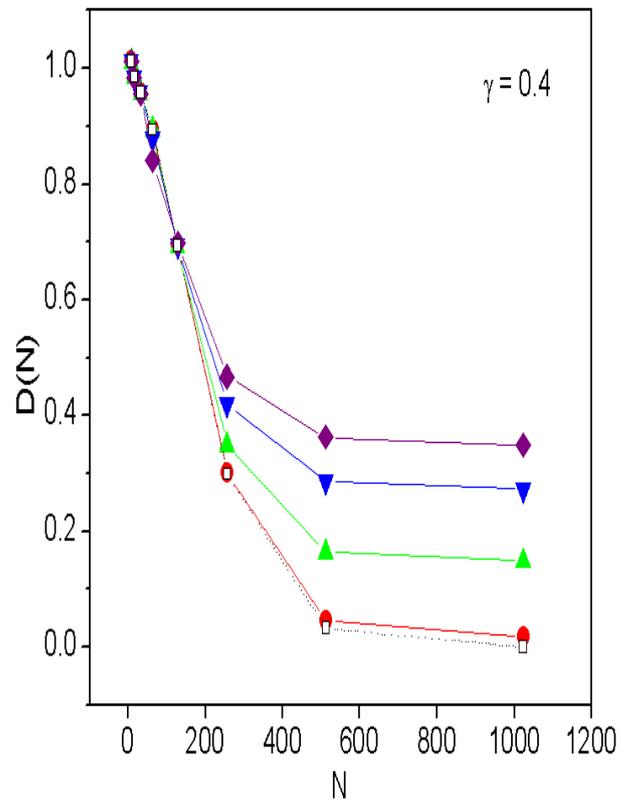
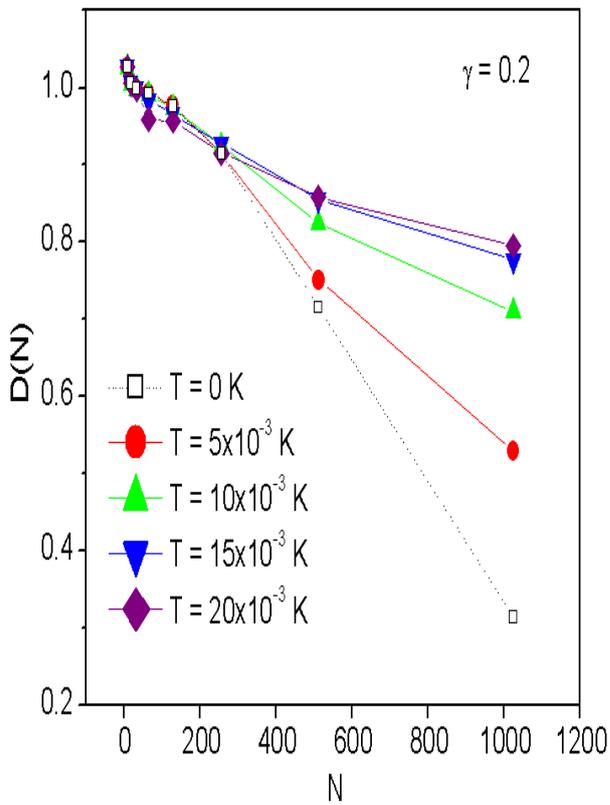
paper folding



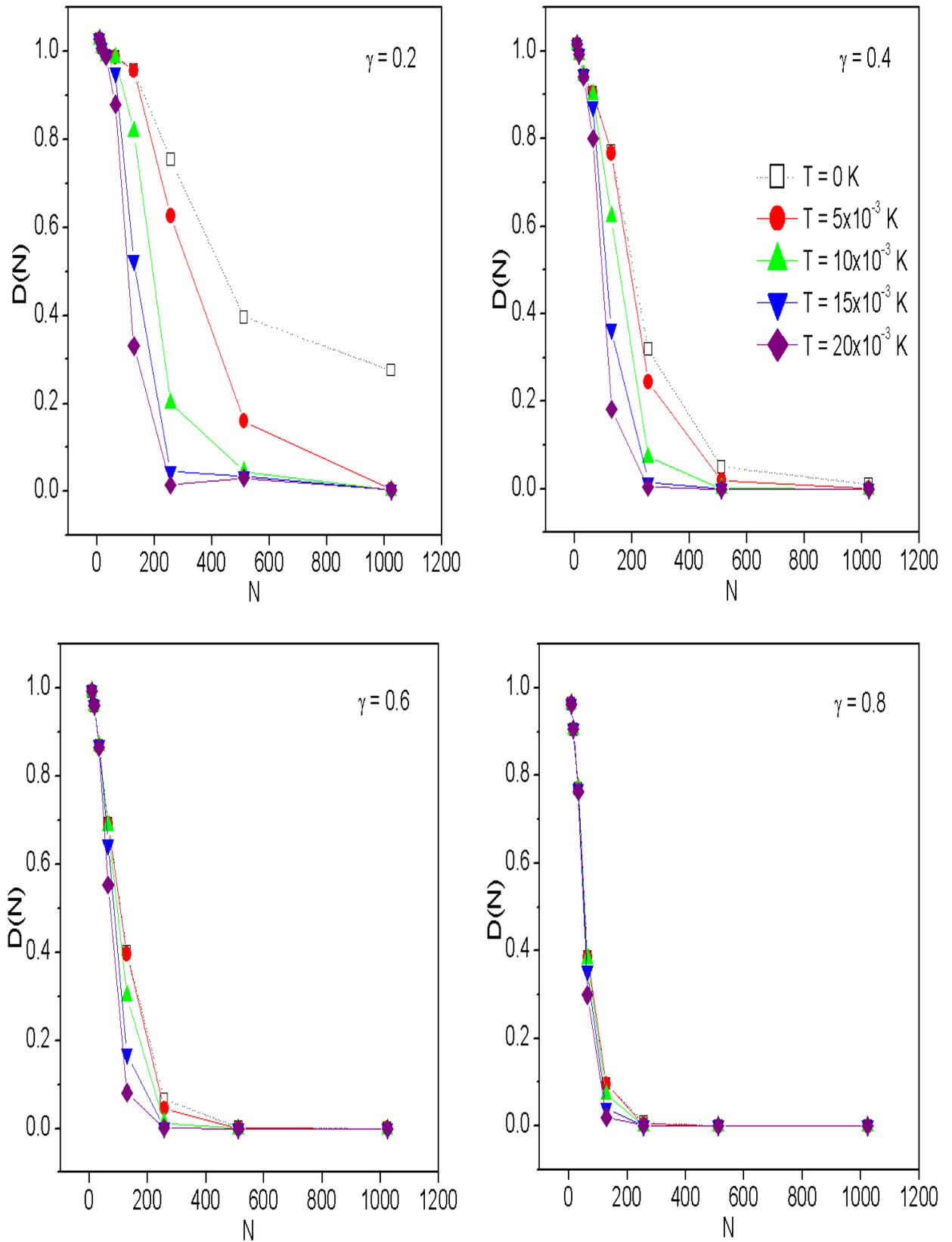
Rudin-Shapiro



Thue-Morse



Desordenado



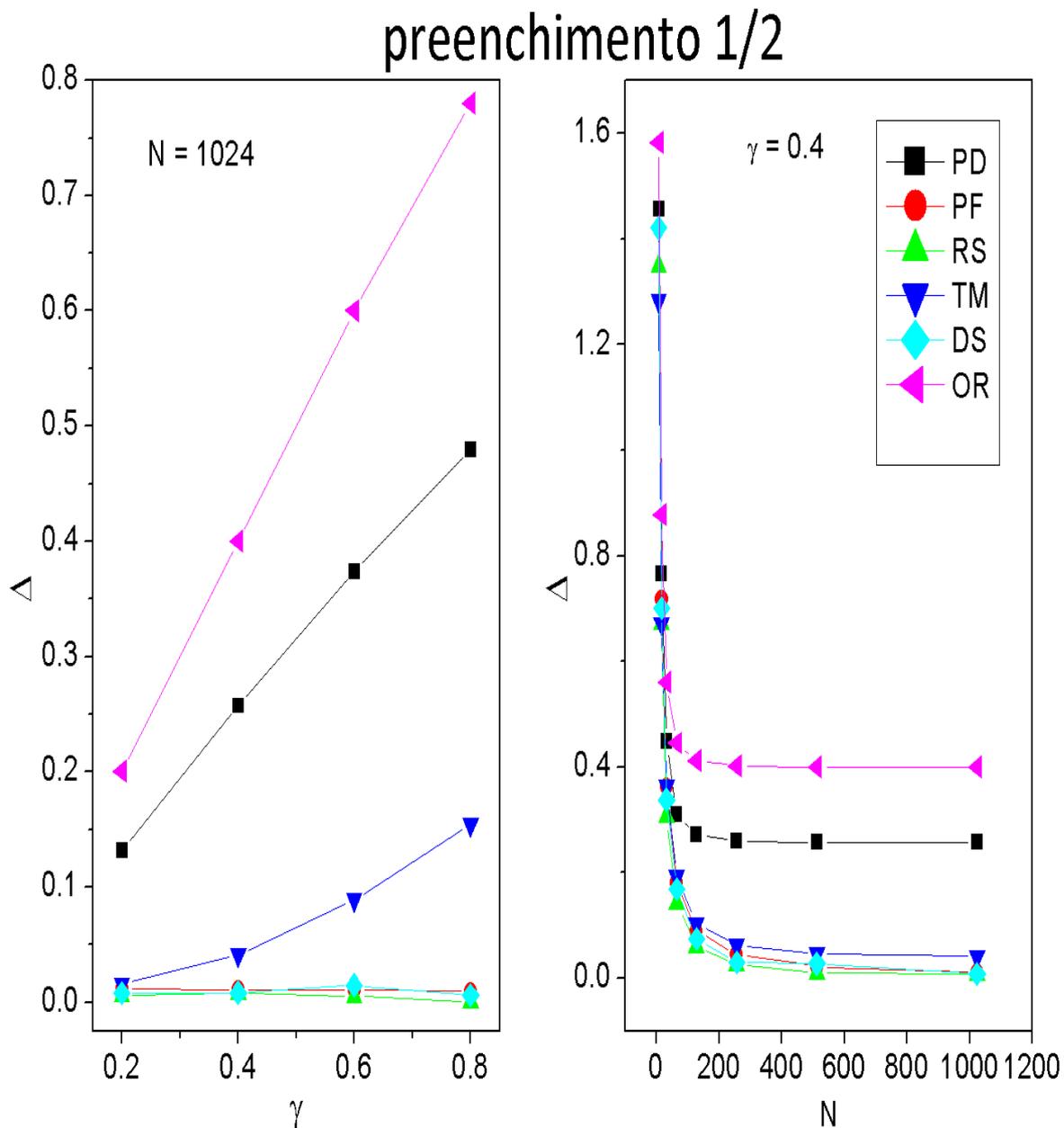


Figura 5.1: espaçamento entre os níveis $N_s/2$ e $N_s/2 + 1$, para os seis casos de seqüências.

Primeiramente podemos classificar os seis casos acima dizendo que a temperatura pode levar a dois tipos diferentes de comportamentos com relação à condução dos elétrons, a saber, pode-se melhorar ou piorar a condução do sistema com o aumento da temperatura a depender do tipo de seqüência que compõe o sistema.

Conduz-se mais com a temperatura nos casos das seqüências periódica, Thue-Morse e duplicação de período. Essa resposta da condução por meio da temperatura se torna cada vez menos perceptível aumentando-se a amplitude do potencial, chegando-se ao ponto em que temperaturas finitas não influenciam na condução. Isso ocorre por surgir um espaçamento entre a energia preenchida pelo último elétron e a próxima energia, o que impossibilita excitações térmicas. Para ilustrar esse fato, a figura 5.1 mostra o espaçamento Δ entre a energia de Fermi e o próximo nível de energia para todos os casos de seqüências em função de dois parâmetros, a saber, o tamanho do anel e a amplitude de potencial.

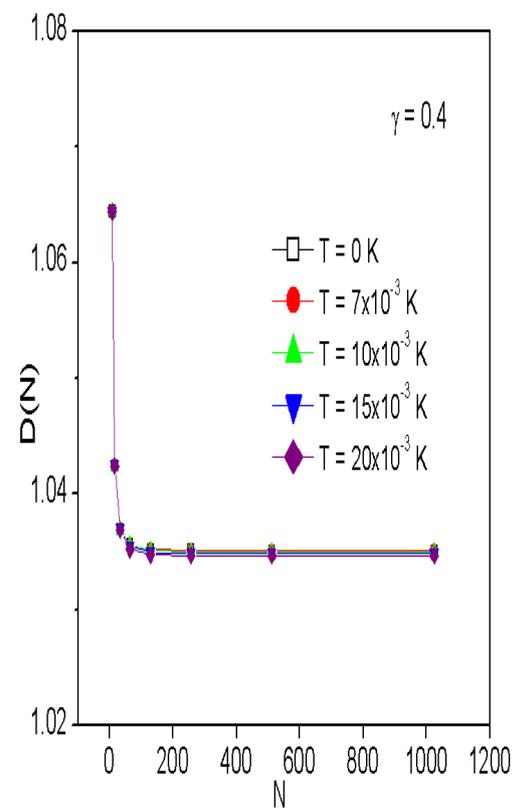
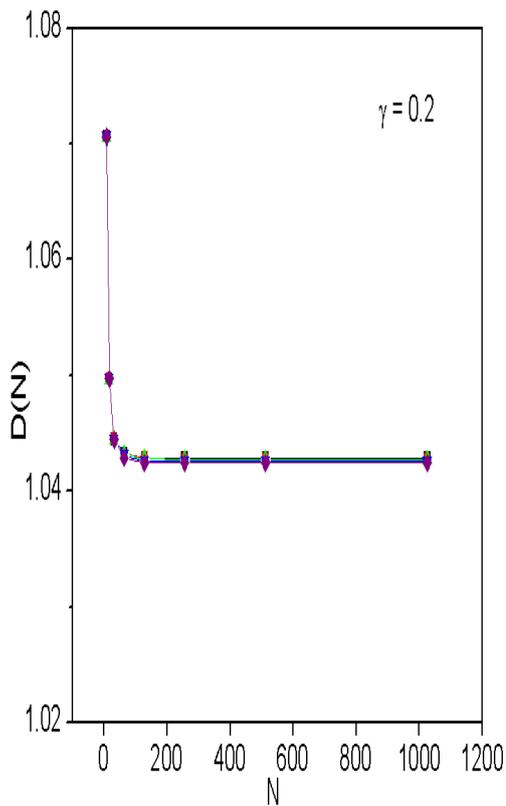
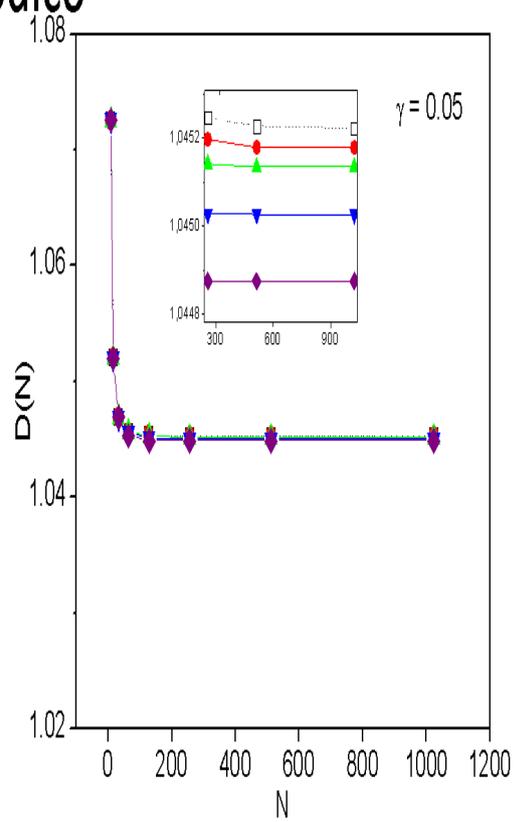
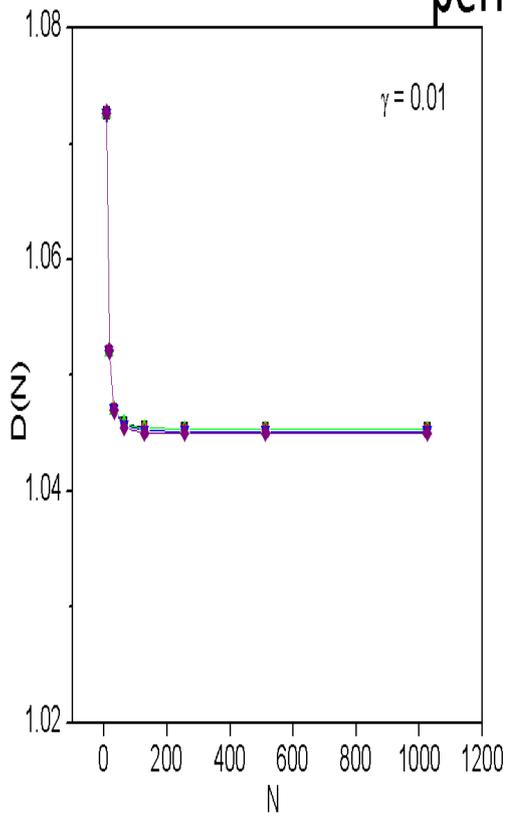
Por outro lado, a temperatura diminui a condução nos anéis constituídos pelas seqüências desordenada, *paper-folding* e Rudin-Shapiro. Nestes casos, todos passam a ser isolante visto que o peso de Drude se torna nulo para anéis grandes.

Uma característica que foi encontrada em todos os casos é que o peso de Drude praticamente não muda com a temperatura em anéis pequenos ($8 \leq N_s \leq 32$). Isso se deve ao espaçamento entre os níveis de energia, em anéis pequenos, ser grande o suficiente para que não haja excitações térmicas. Na próxima subseção mostraremos os resultados do peso de Drude para a situação em que os elétrons preencham 1/4 dos níveis existentes.

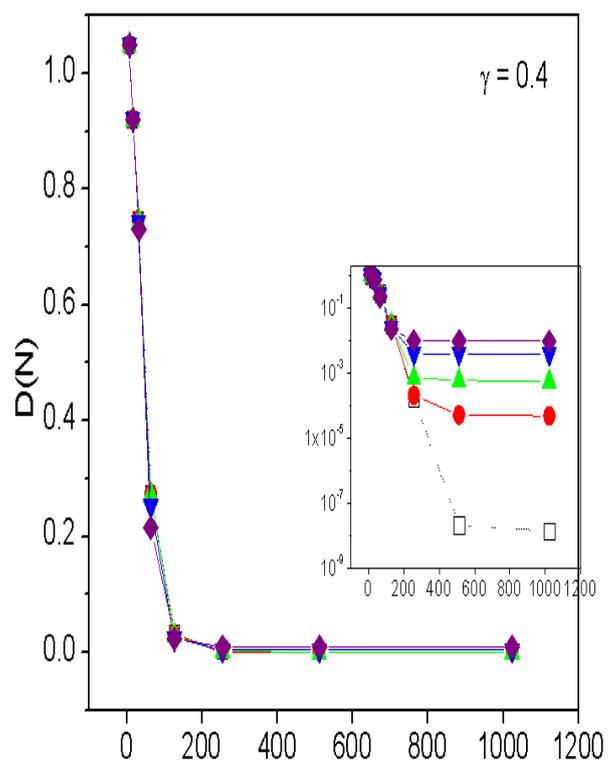
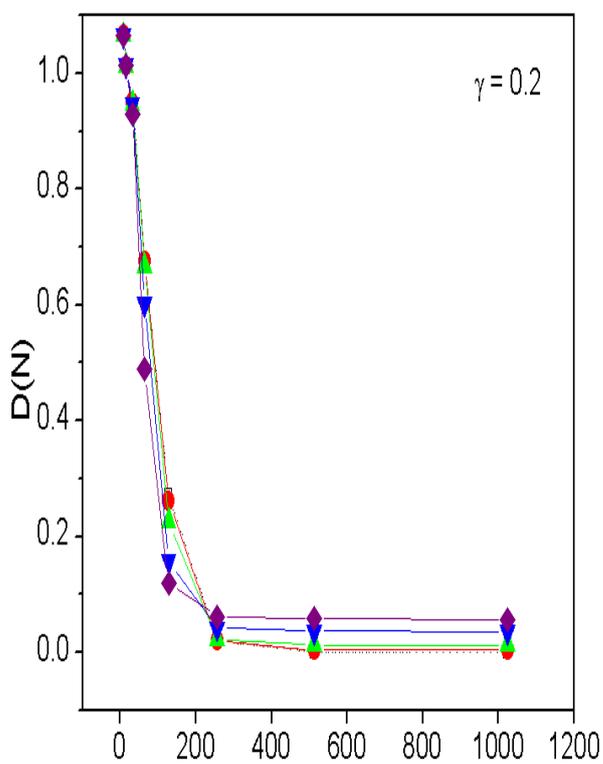
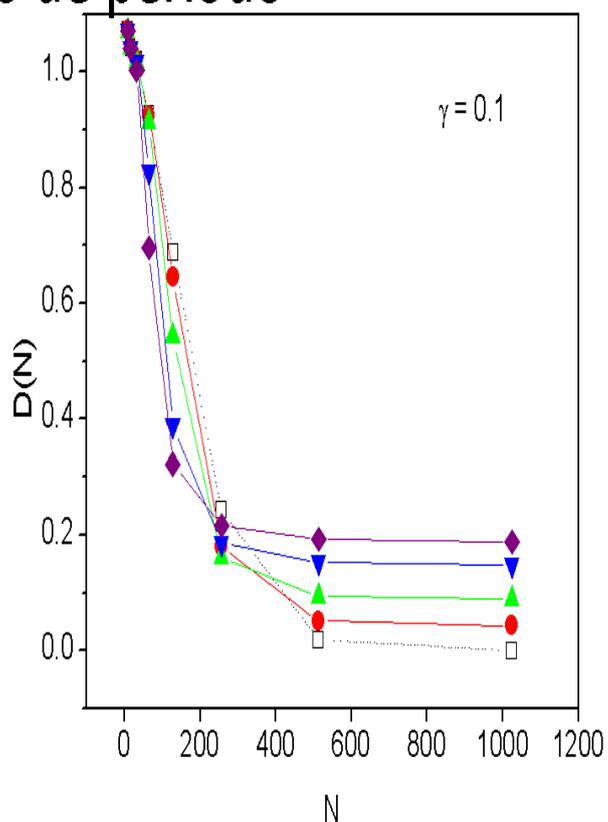
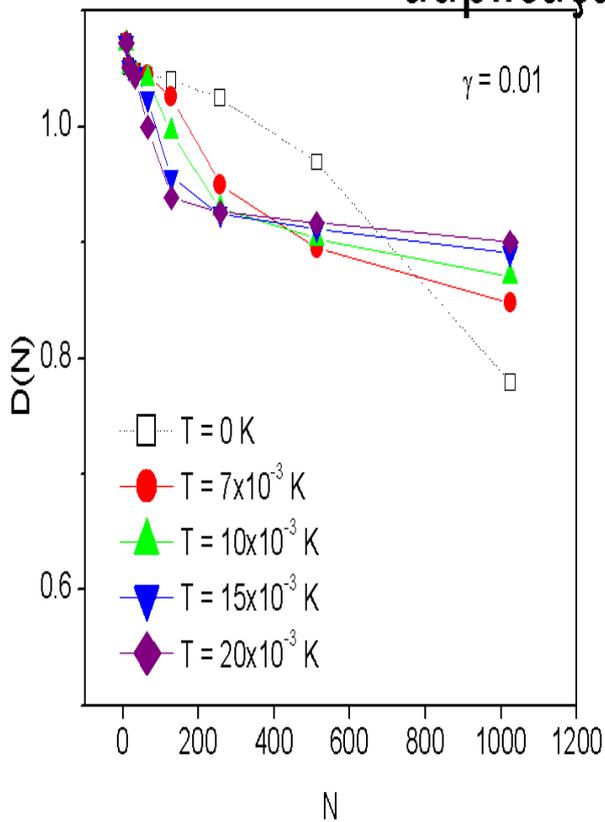
5.4.2 Preenchimento 1/4

Do mesmo modo como foi realizado na subseção anterior, o peso de Drude foi calculado nos seis casos de seqüência para quatro temperaturas e amplitudes de potencial diferentes, conforme é mostrado nas figuras abaixo:

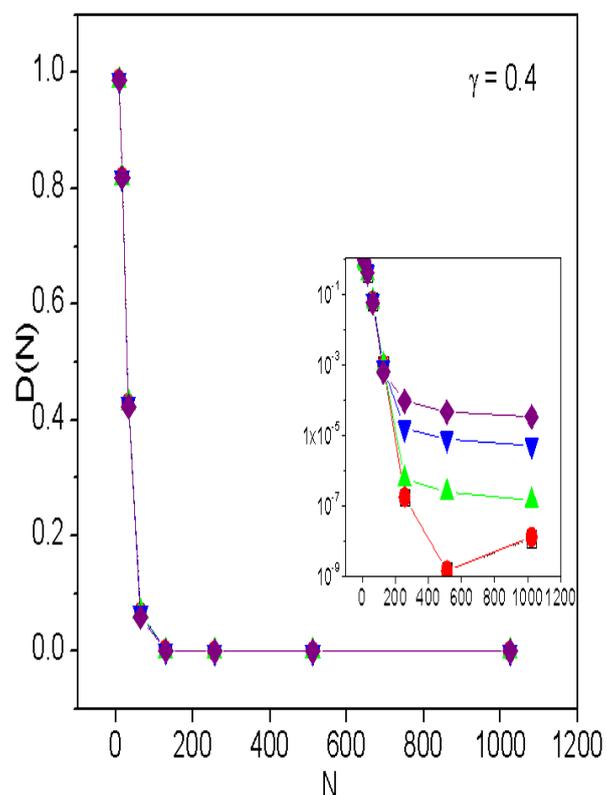
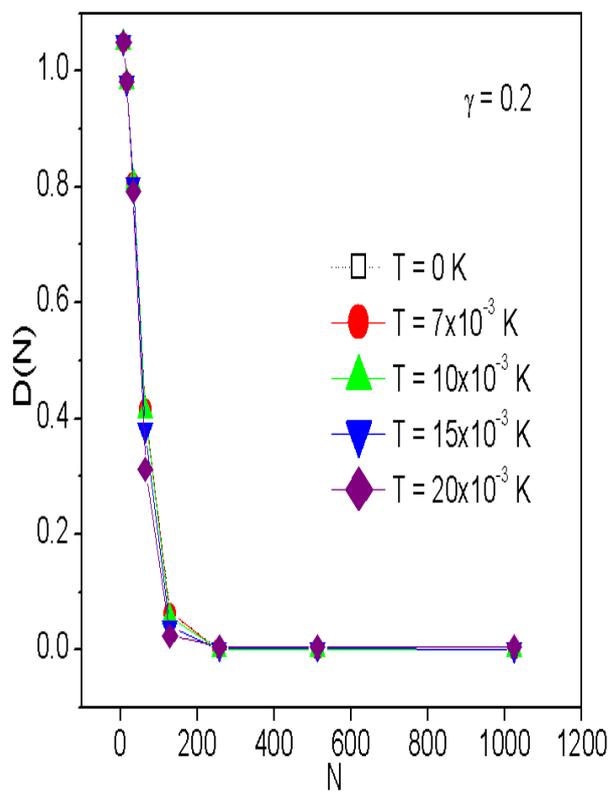
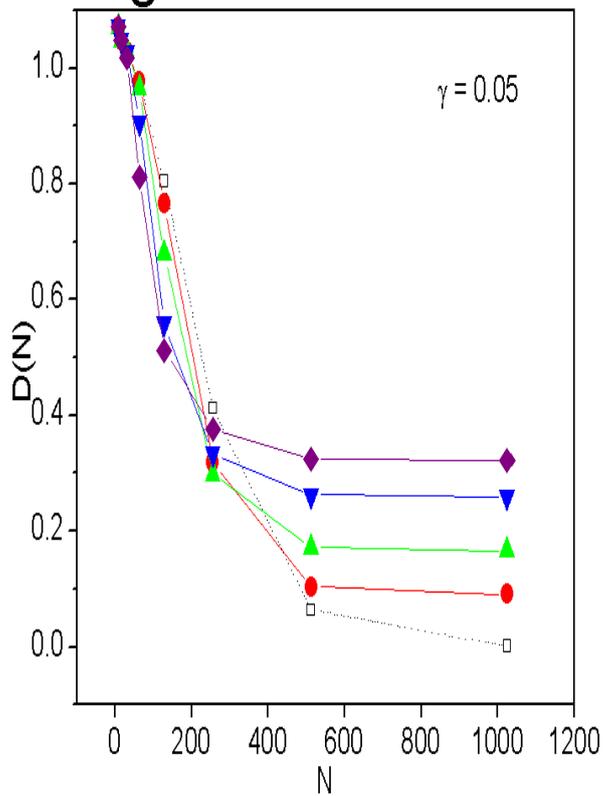
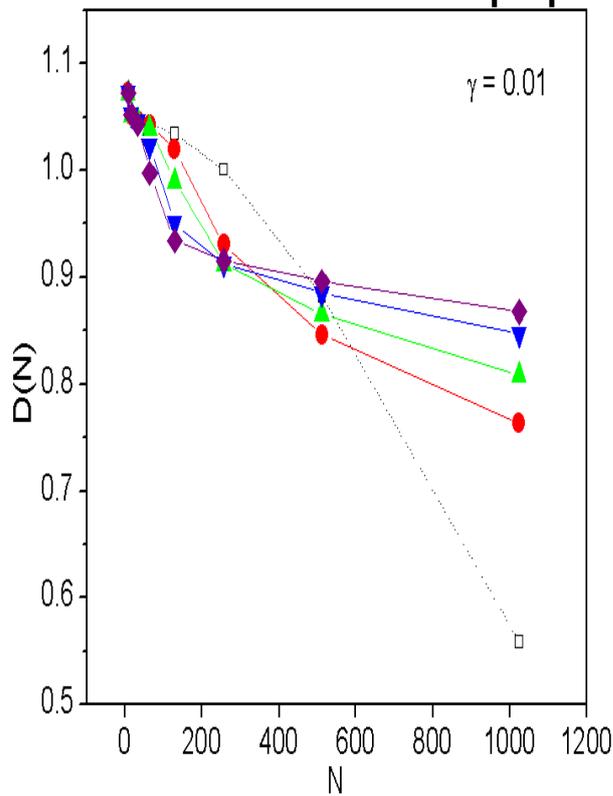
periódico



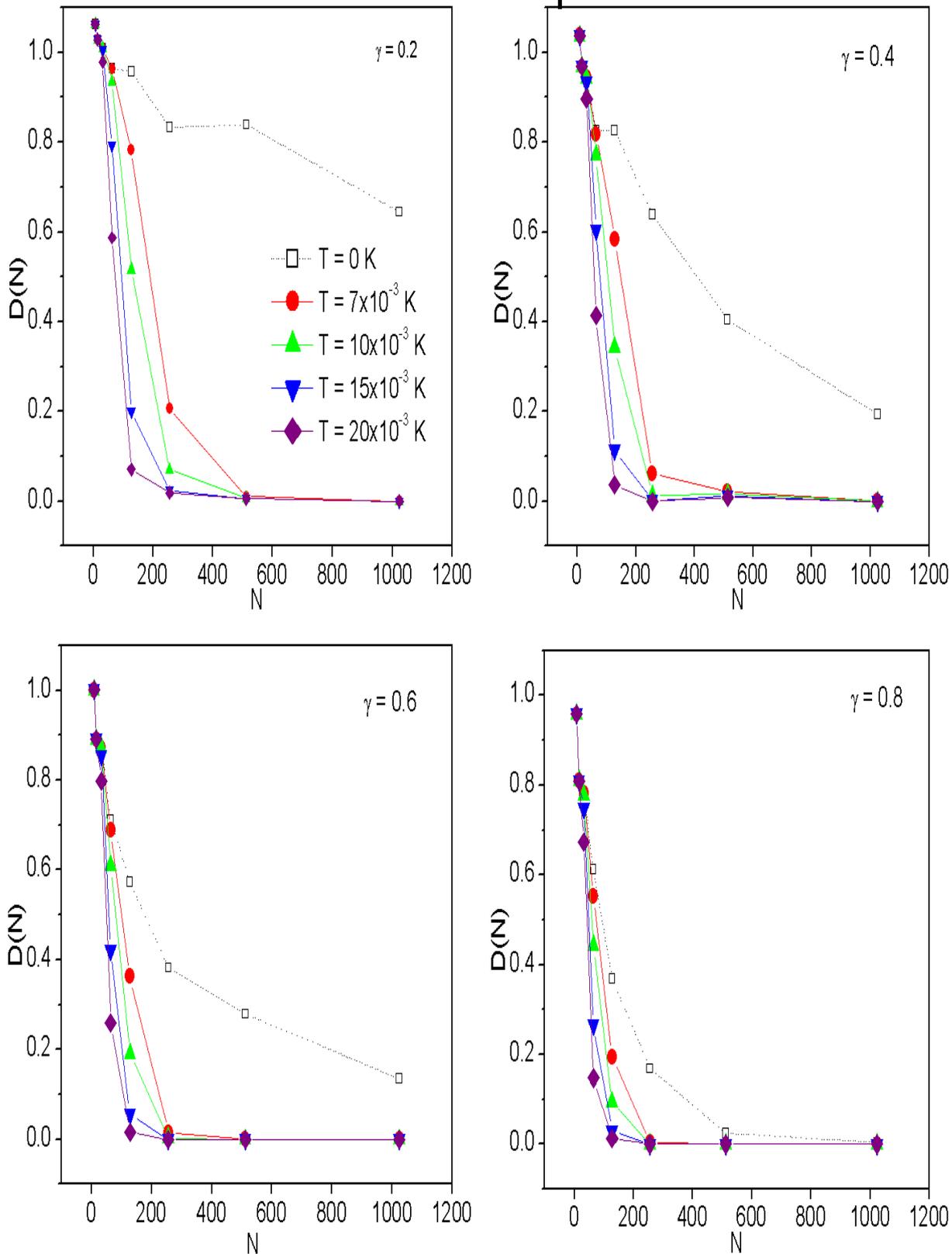
duplicação de período



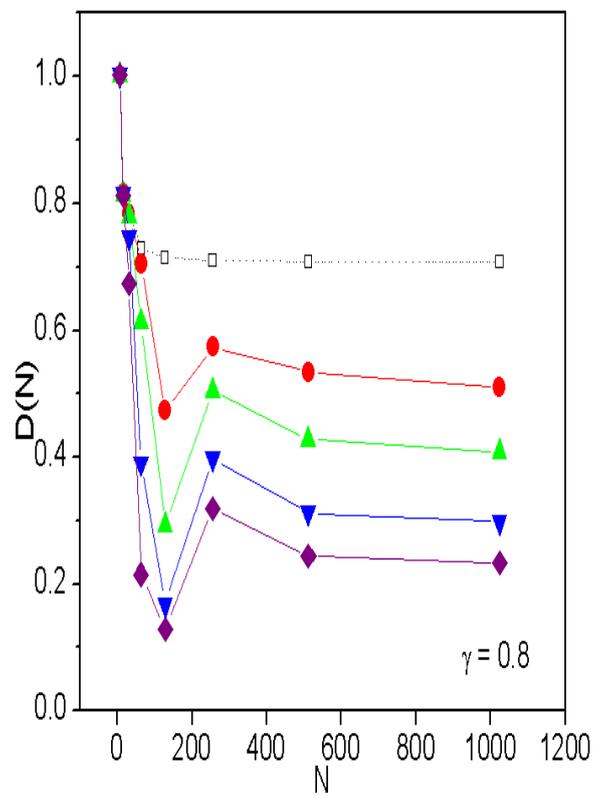
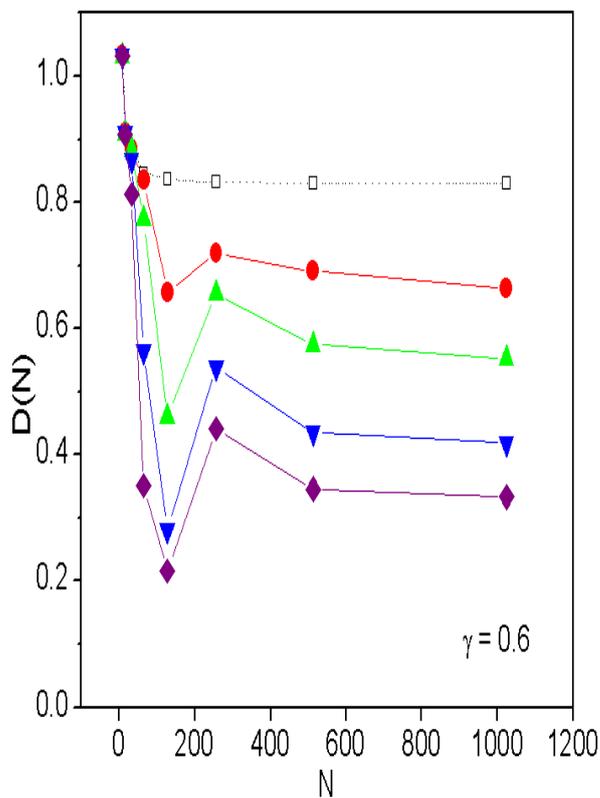
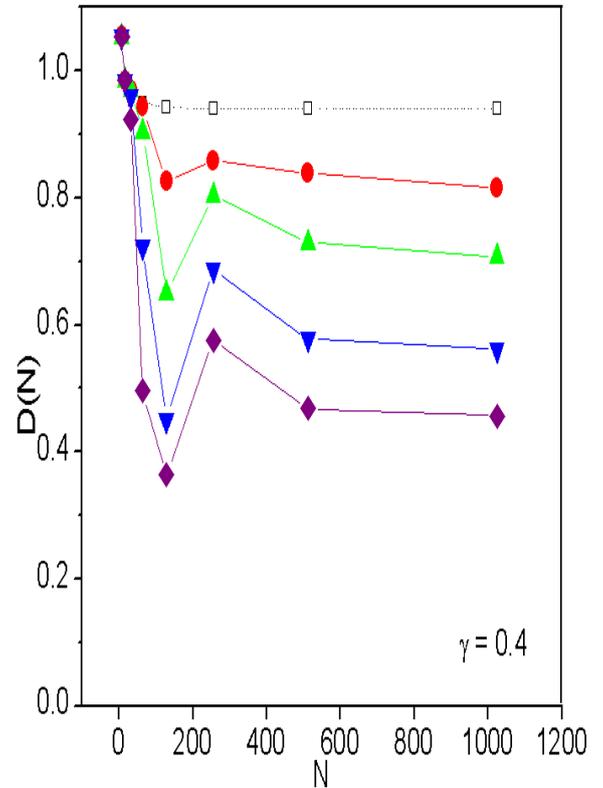
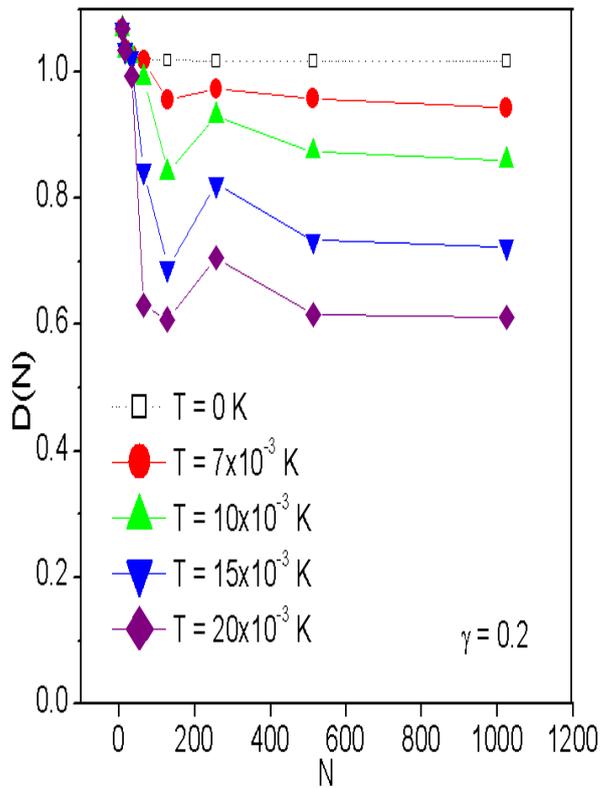
paper folding



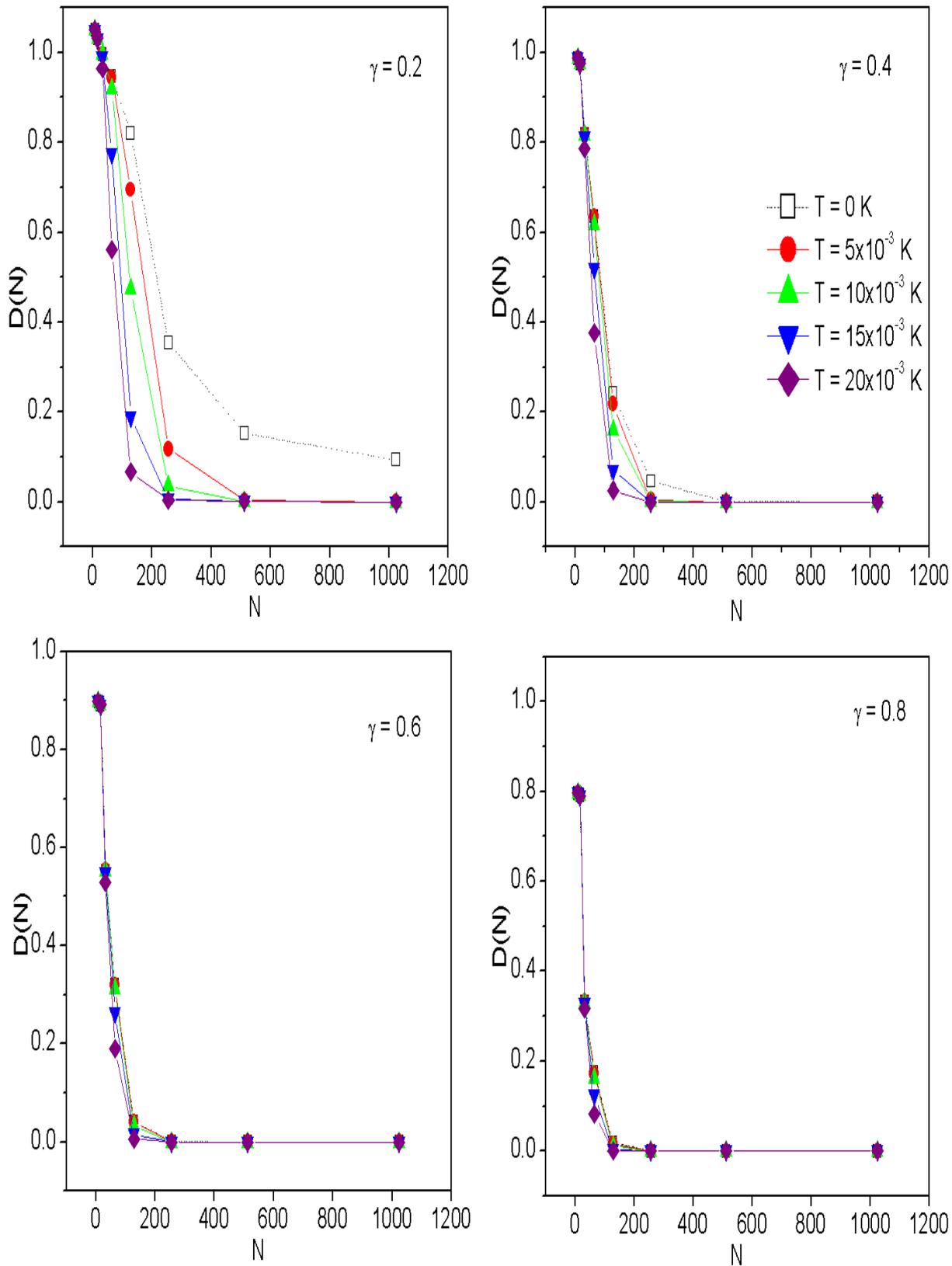
Rudin-Shapiro



Thue-Morse



desordenado



Encontramos três situações de respostas da condutividade com relação à temperatura. Os casos das seqüências periódica e Thue-Morse mostram que, apesar da temperatura diminuir a condução, o sistema ainda permanece condutor. Um outro tipo de comportamento é encontrado nos casos das seqüências duplicação de período e *paper-folding* onde a temperatura pode tornar, a depender da amplitude do potencial, o sistema condutor. Por último, o comportamento isolante se torna mais acentuado com a temperatura quando a energia potencial do anel é dada pelas seqüências desordenada e Rudin-Shapiro.

Como na subseção anterior, nos casos duplicação de período e *paper-folding* notamos que o peso de Drude se torna constante com relação à temperatura para amplitudes de potencial suficientemente grandes e isso pode ser explicado pelo surgimento do espaçamento entre a energia de Fermi e a próxima energia, conforme é ilustrado pela figura apresentada abaixo:

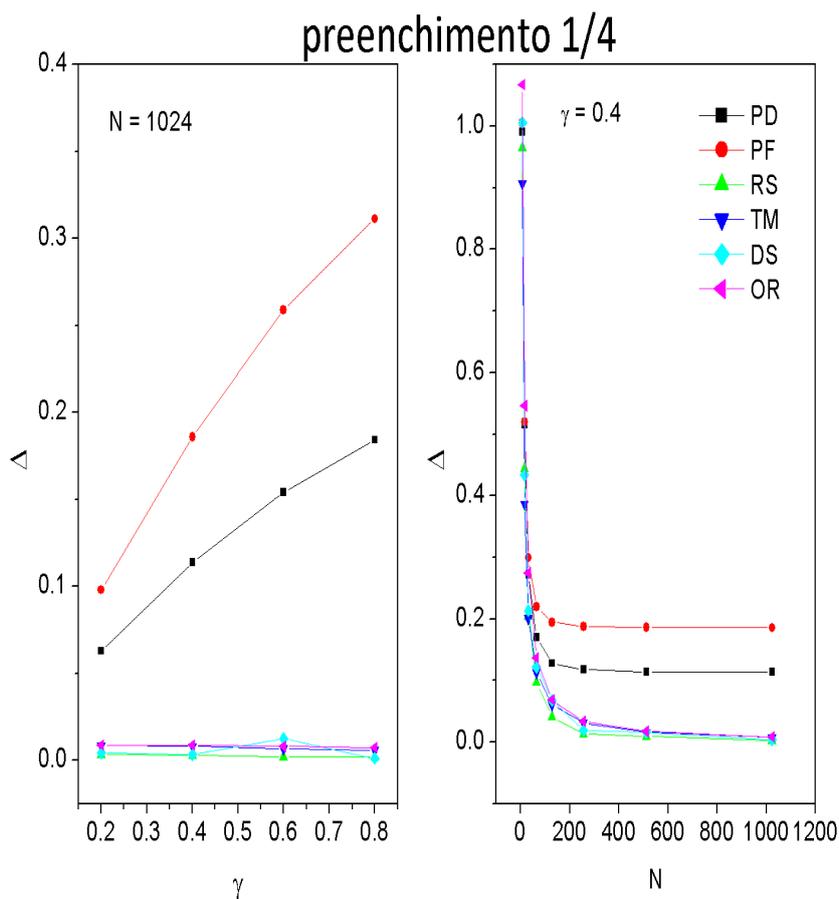


Figura 5.2: Espaçamento entre os níveis $N_s/4$ e $N_s/4 + 1$, para o caso de preenchimento 1/4.

5.4.3 Discussão sobre os resultados

Nesta subseção apresentaremos justificativas para alguns dos comportamentos mostrados nas duas situações de preenchimento e uma discussão sobre a existência em alguns casos de espaçamento Δ entre o nível de Fermi e o próximo nível de energia. A argumentação para tais comportamentos e discussão será feita de um modo descritivo, explicados através de informações contidas nos espectros de energia.

Ao observarmos os espectros de energia, foram encontradas as mesmas propriedades de simetria em todos os casos em que ficam evidentes a possibilidade de um sistema isolante se tornar condutor, com o auxílio da temperatura. Acreditamos que essas propriedades de simetria do espectro, que vamos descrever a seguir, se refletem na resposta da condução com relação à temperatura.

Conforme os resultados mostrados acima a temperatura pode levar o sistema, inicialmente num estado isolante, a um estado condutor nos casos das seqüências periódicas, Thue-Morse e duplicação de período para a situação de preenchimento 1/2 e nos casos das seqüências *paper-folding* e duplicação de período para a situação de preenchimento 1/4. Observando os níveis de energia em torno do nível de Fermi, notamos duas características presentes em todos os casos que foram mencionados acima. Primeiramente, se considerarmos o conjunto das auto-energias $\{E_n(\phi_{\min})\}$ somente em torno do nível de Fermi, notamos que as energias de níveis vizinhos passam a ter valores aproximadamente iguais a depender da amplitude de potencial; como abuso de linguagem denominaremos essa igualdade entre níveis de energia como uma quase-degenerescência, que pode ser melhor entendida com o auxílio da relação abaixo:

$$e_{F+j} \simeq e_{F+j+1}, \quad (5.12)$$

onde e_{F+j} é a energia do j -ésimo nível em relação à energia do nível de Fermi onde $j = \pm 1, \pm 3, \pm 5, \dots, \pm k_{\max}$. Os valores assumidos por j foram limitados por estarmos interessados na faixa de energia onde ocorrem as excitações térmicas, ou seja, k_{\max} define a região de energia em torno do nível de Fermi. Podemos concluir que os números médios de ocupação $\langle n_i \rangle$ para as duas energias dadas pela equação 5.12 são também aproximadamente iguais, ou seja,

$$\langle n_{F+j} \rangle \simeq \langle n_{F+j+1} \rangle. \quad (5.13)$$

Desse modo faremos uma aproximação fatorando o número médio de ocupação dos pares de níveis $(F+j)$ -ésimo e $(F+j+1)$ -ésimo dentro da equação 5.9, como mostra a relação

abaixo

$$\frac{\partial^2 e_{F+j}}{\partial \phi^2} \langle n_{F+j} \rangle + \frac{\partial^2 e_{F+j+1}}{\partial \phi^2} \langle n_{F+j+1} \rangle \simeq \langle n'_j \rangle \left(\frac{\partial^2 e'_j}{\partial \phi^2} \right), \quad (5.14)$$

onde $\langle n'_j \rangle = (\langle n_{F+j} \rangle + \langle n_{F+j+1} \rangle) / 2$ e $\frac{\partial^2 e'_j}{\partial \phi^2} = \frac{\partial^2 e_{F+j}}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2 e_{F+j+1}}{\partial \phi^2}$.

A outra propriedade observada no espectro foi a simetria apresentada pelas segundas derivadas $\left(\frac{\partial^2 e'_j}{\partial \phi^2} \right)$, sendo que os seus valores abaixo do nível de Fermi (ou seja, para j negativo) e acima do nível de Fermi (para j positivo) são negativos e positivos, respectivamente. Ou seja, $\left| \frac{\partial^2 e'_j}{\partial \phi^2} \right| = \left| \frac{\partial^2 e'_{-j}}{\partial \phi^2} \right|$. Devido a essa propriedade, o peso de Drude aumenta com a temperatura visto que as segundas derivadas acima do nível de Fermi passam a contribuir com valores positivos dentro da equação 5.9.

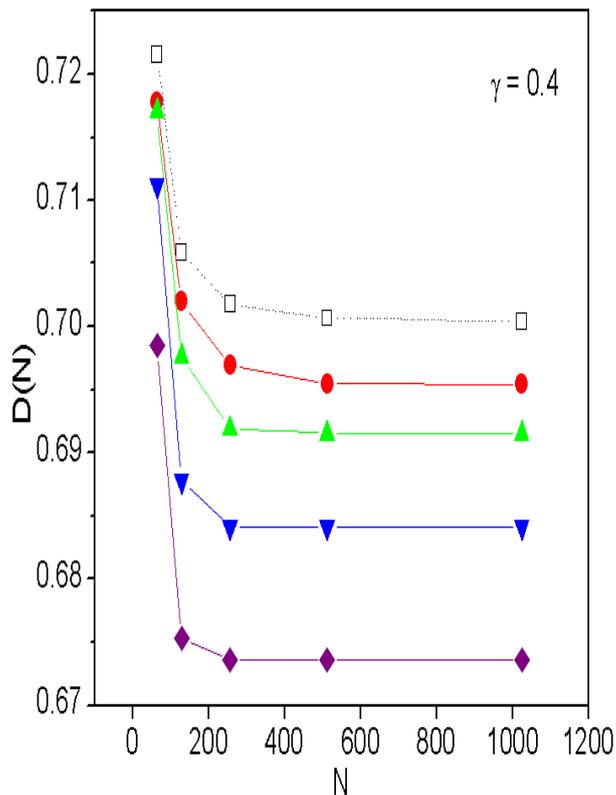
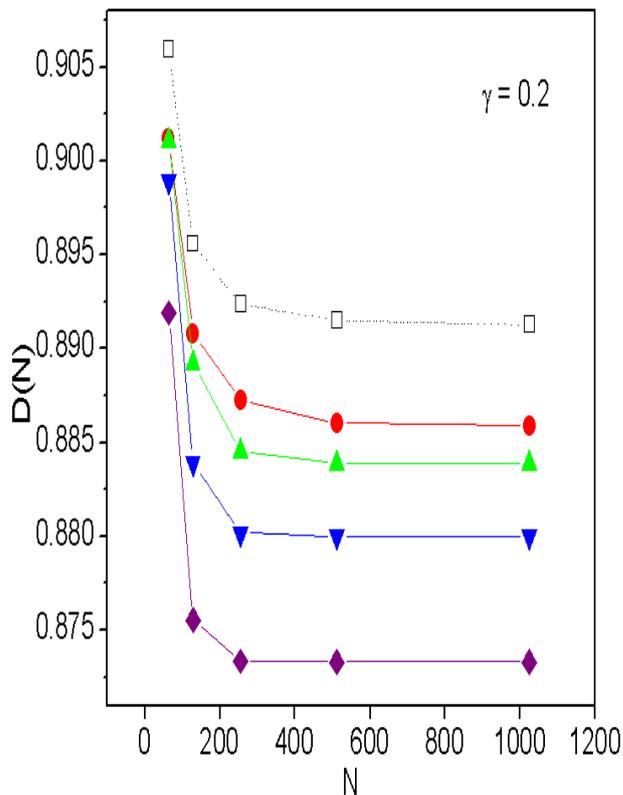
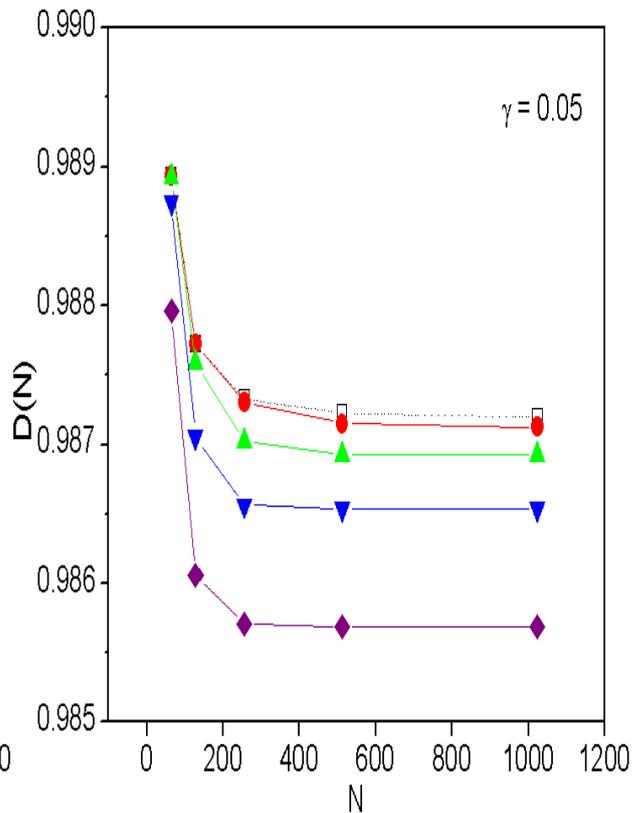
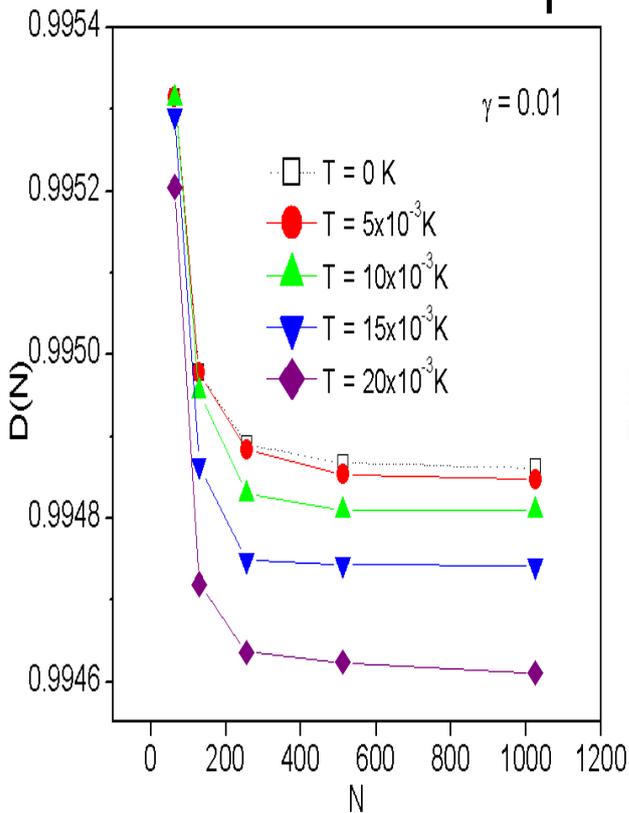
Como foi visto, em ambos os casos de preenchimento 1/2 e 1/4, os espectros correspondentes a algumas seqüências de potencial apresentam considerável espaçamento Δ entre o último nível ocupado e o próximo, o qual cresce com a amplitude de potencial. Esta característica inibe a capacidade de condução, uma vez que a baixas temperaturas não haverá excitação para o nível superior. Ora, se queremos comparar o papel desempenhado pelos diferentes tipos espectrais de cada seqüência de potencial, parece-nos desejável fazer a comparação usando uma região de energia em que todos os espectros apresentem níveis. Nossa expectativa é de que os níveis do espectro sejam distribuídos nesta região de energia de modo característico para cada seqüência de potencial. Varrendo o espectro em cada caso, encontramos duas regiões de energia com esta propriedade nos preenchimentos 15/32 e 15/64.

5.5 Resultados para os preenchimentos 15/32 e 15/64

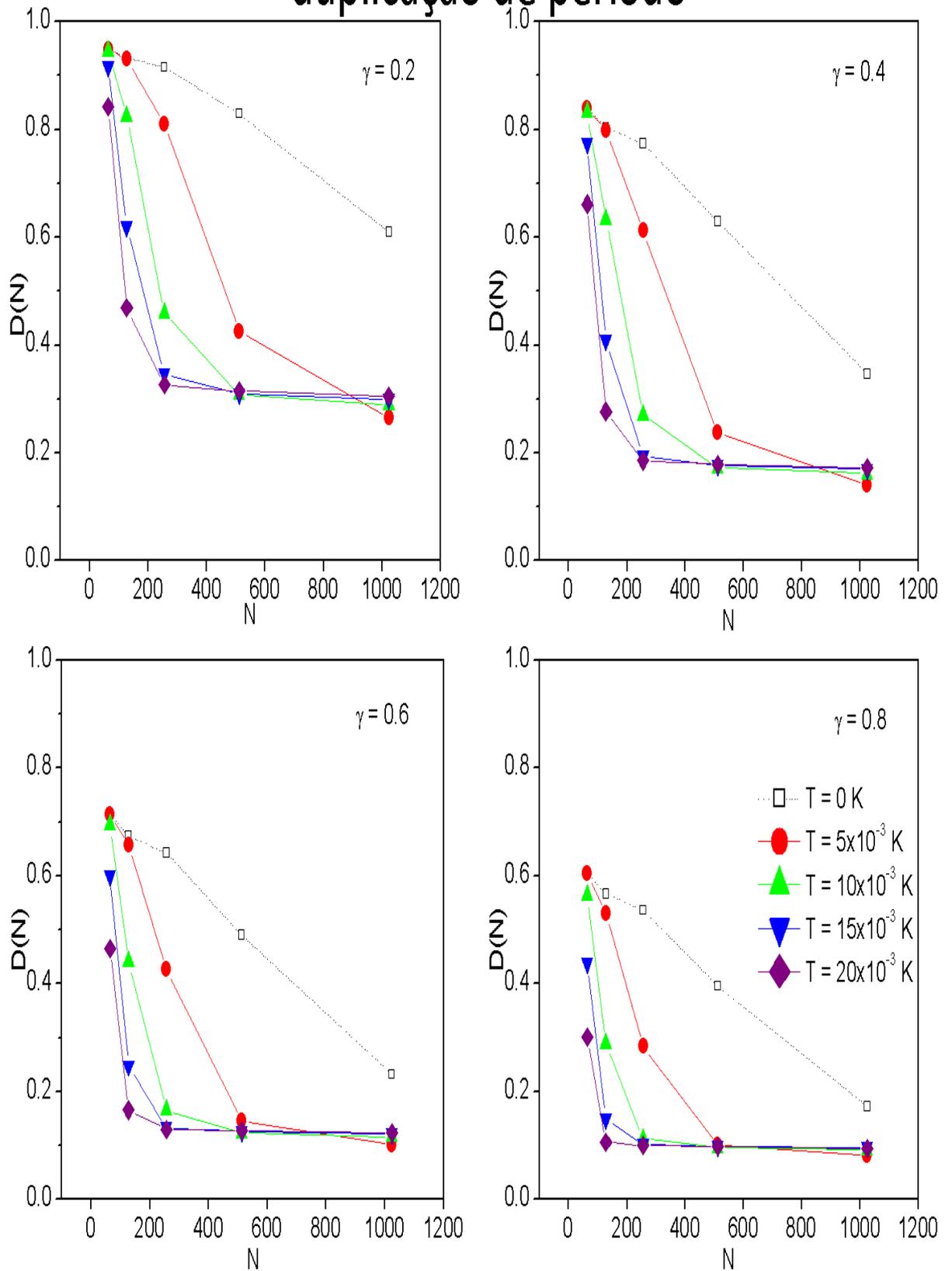
5.5.1 Preenchimento 15/32

Os resultados que iremos mostrar aqui serão comparados com as situações de preenchimento apresentadas na seção anterior, visto que o preenchimento 15/32 é uma situação intermediária com relação aos resultados daquela seção. O peso de Drude foi calculado para os seis casos de seqüências e variando os mesmos parâmetros como na seção precedente.

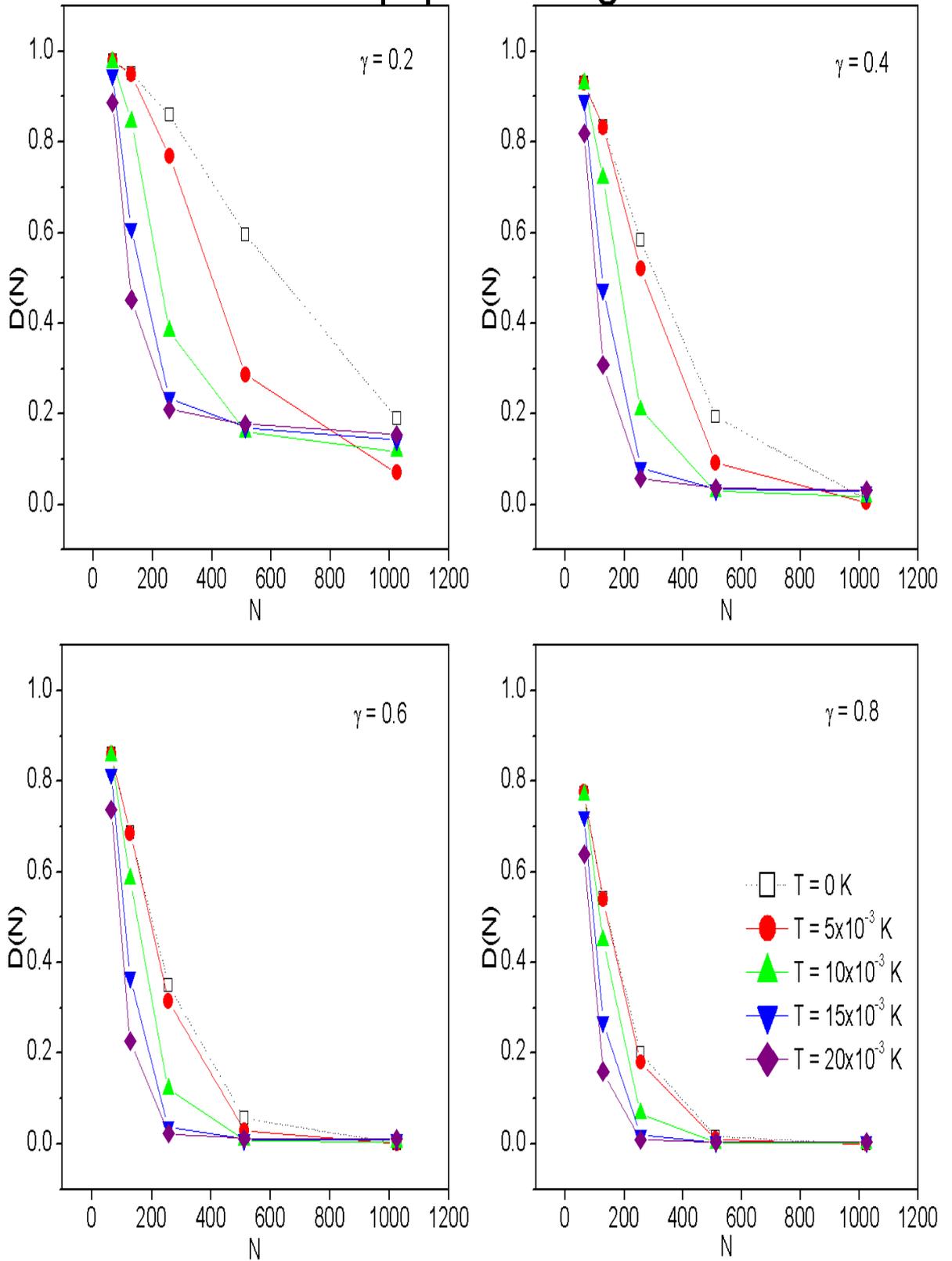
periódico



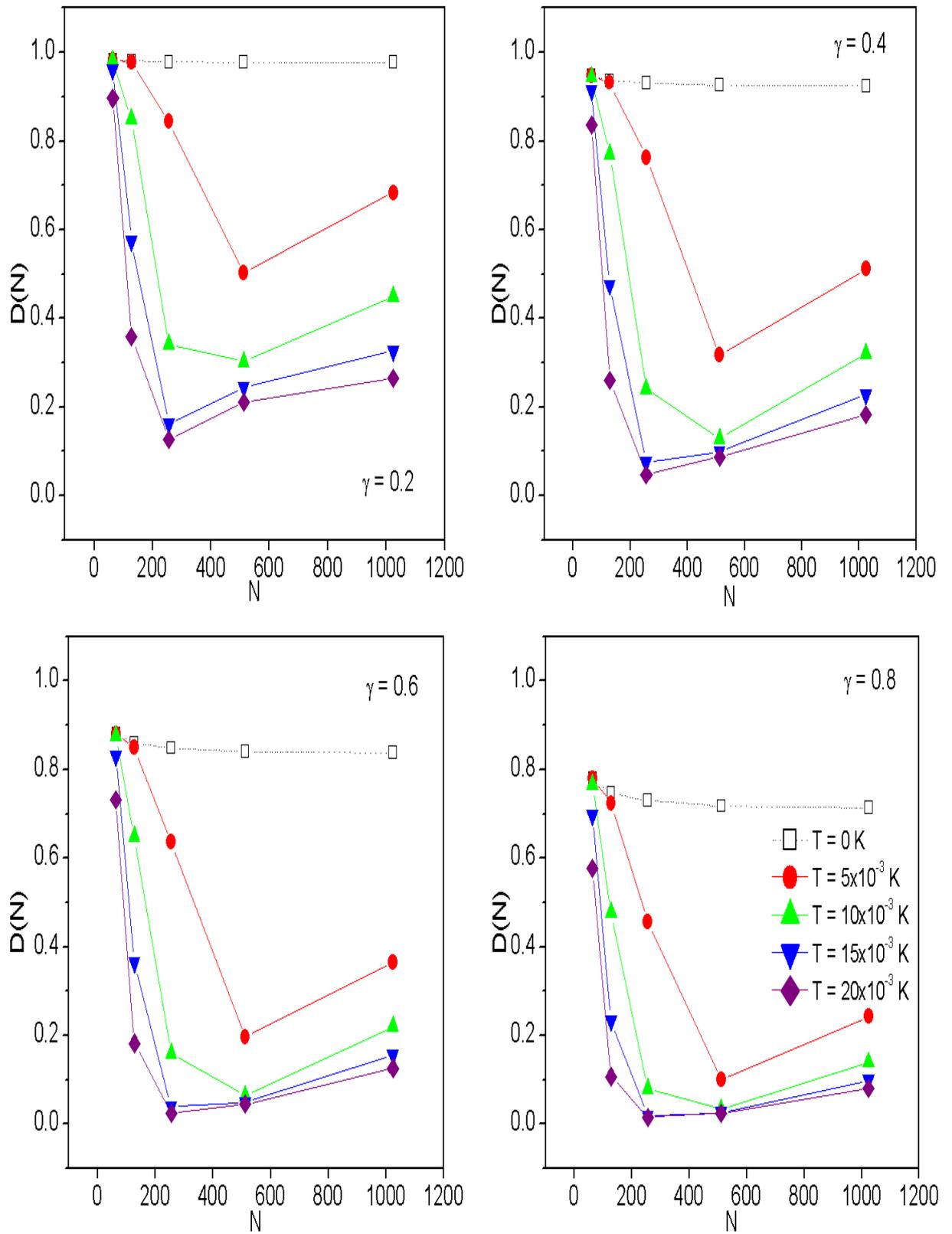
duplicação de período



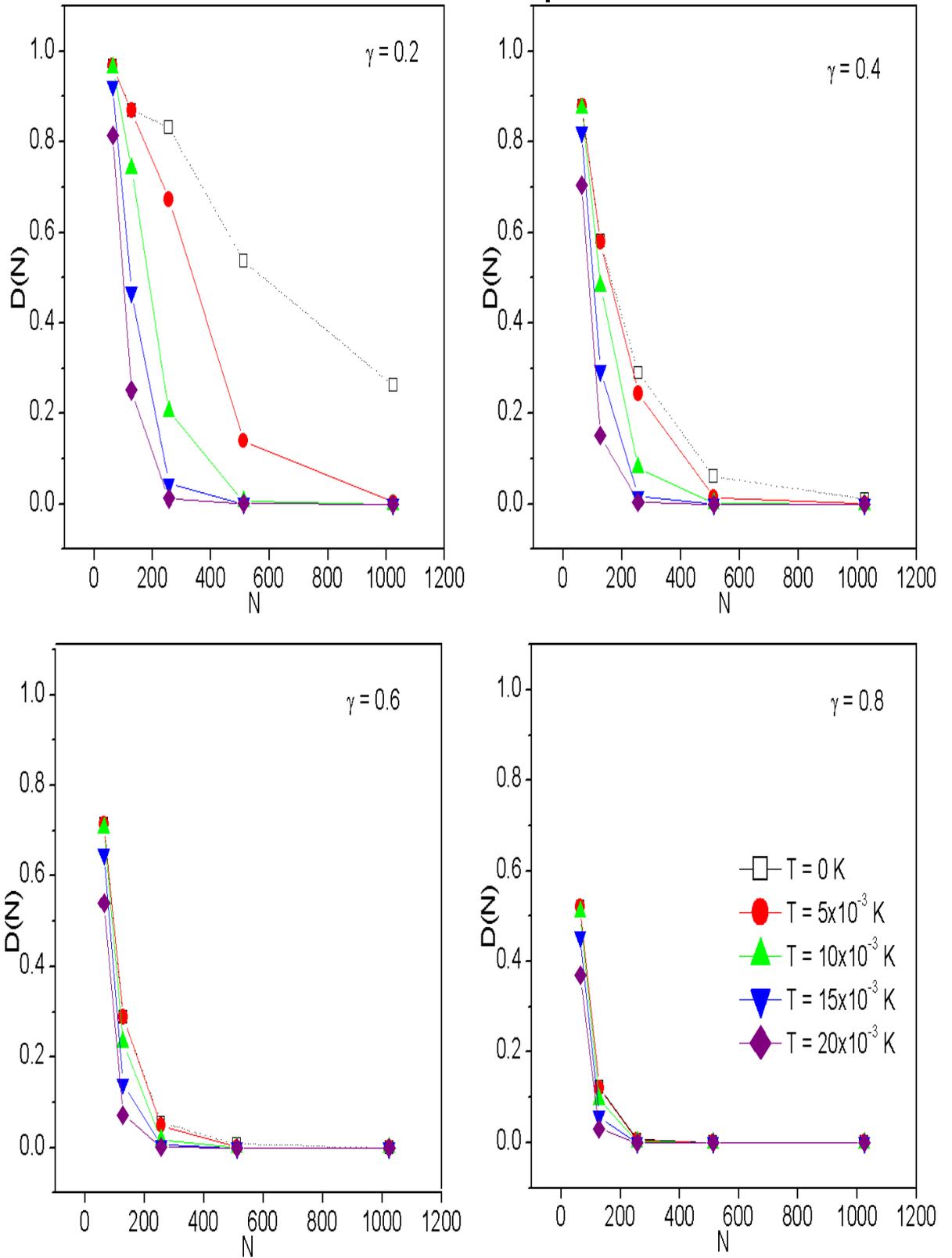
paper folding



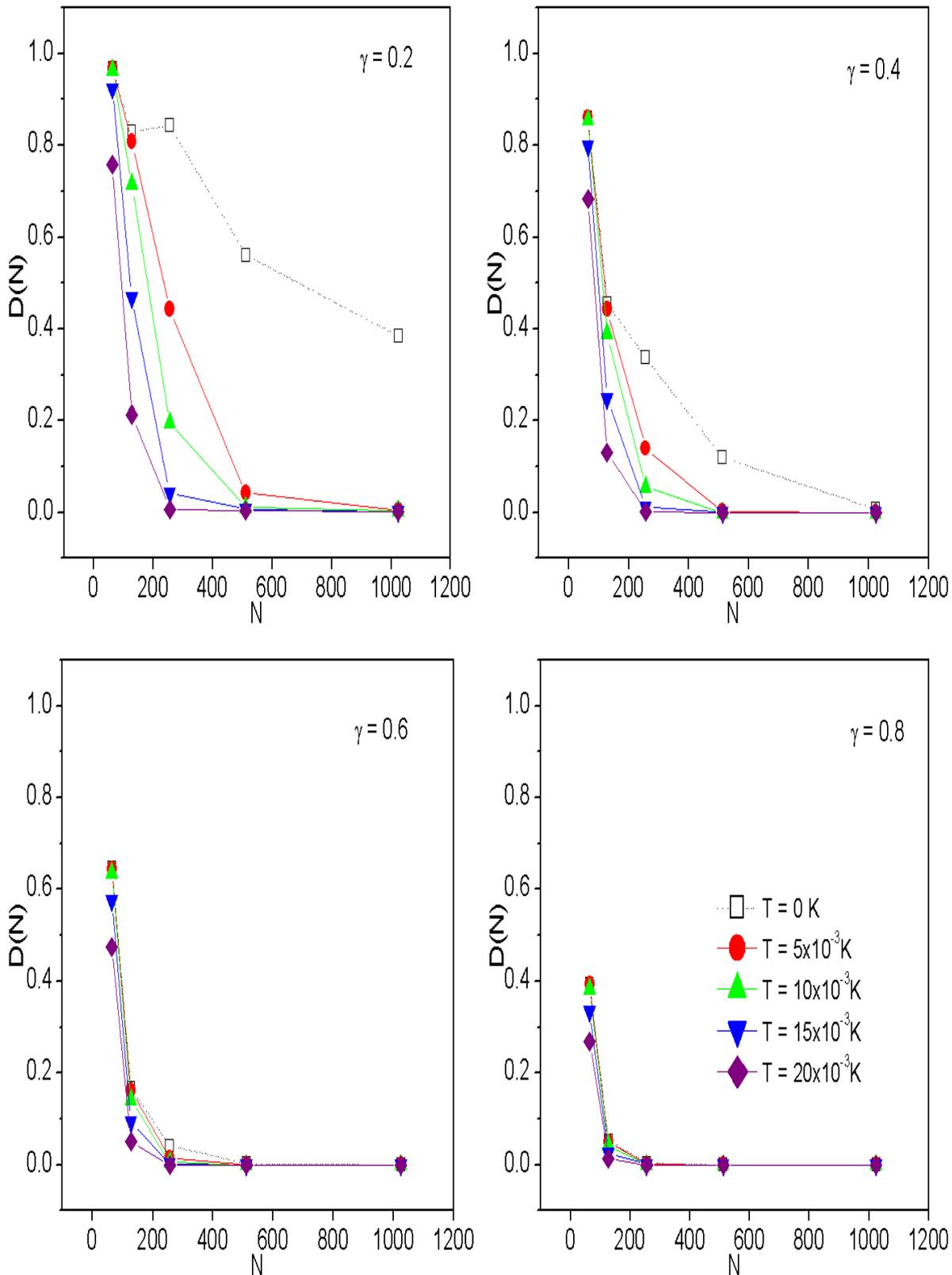
Thue-Morse



Rudin-Shapiro



desordenado



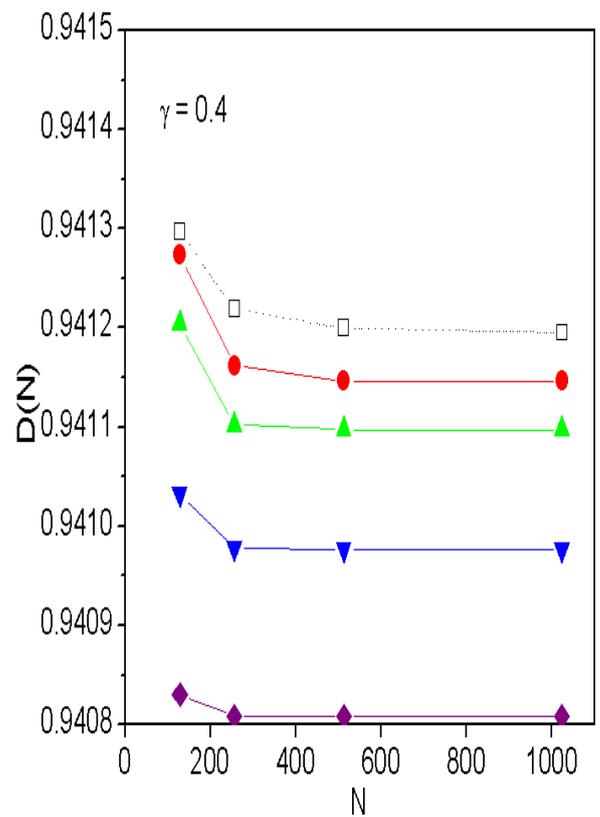
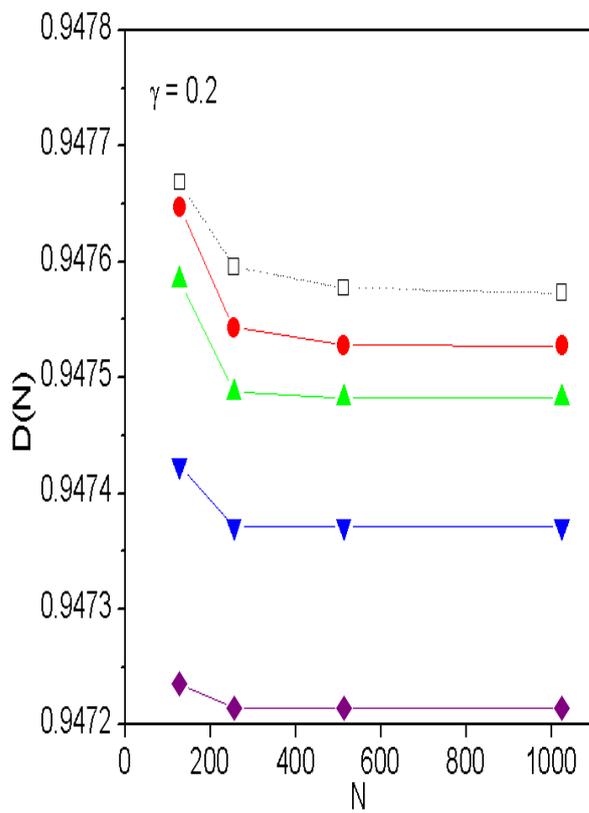
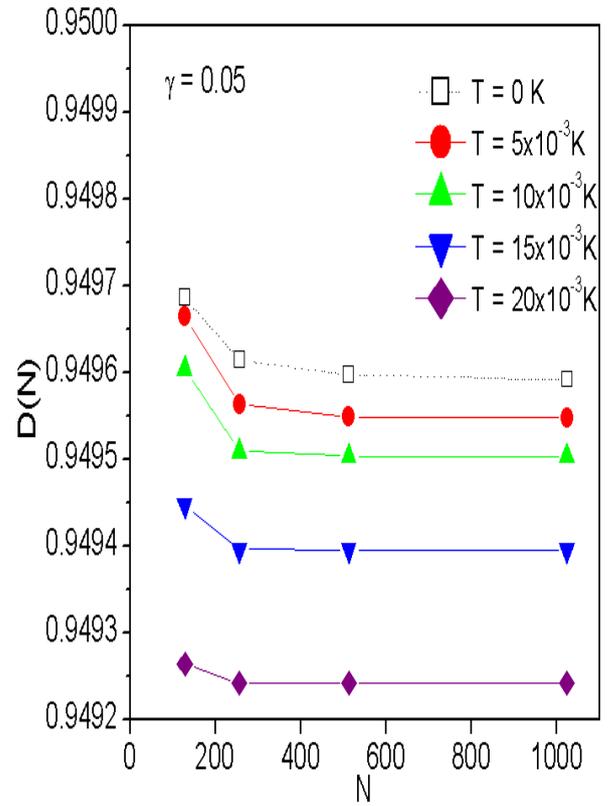
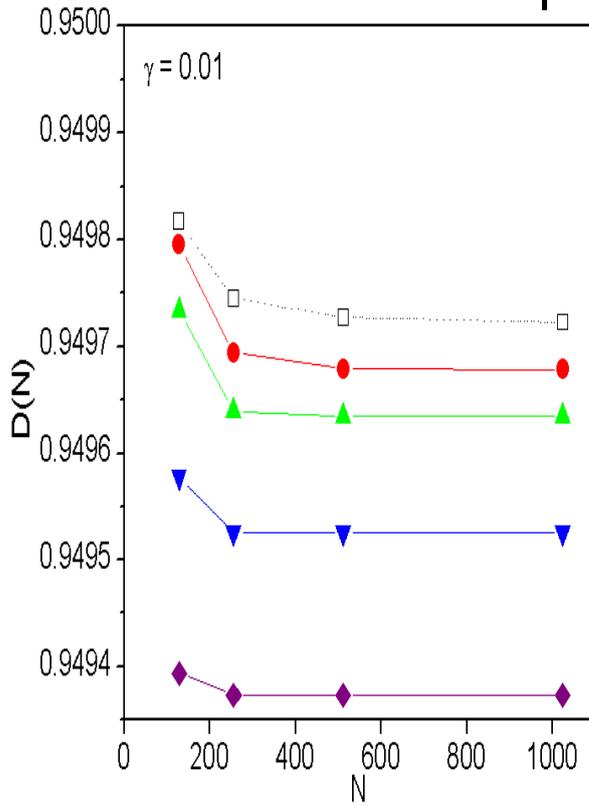
Notamos que no caso das seqüências periódica e Thue-Morse o sistema tem as mesmas características da situação de preenchimento $1/4$, ou seja, o sistema permanece condutor mesmo com o aumento da temperatura. Para o caso da seqüência duplicação de período temos o mesmo resultado encontrado nas situações de preenchimentos $1/2$ e $1/4$, ou seja, é possível encontrar o sistema num estado condutor.

No caso da seqüência *paper-folding* coexistem os dois tipos de comportamentos apresentados pelas situações de preenchimento da seção anterior, isto é, o sistema pode tornar-se condutor ou isolante a depender da temperatura e amplitude de potencial.

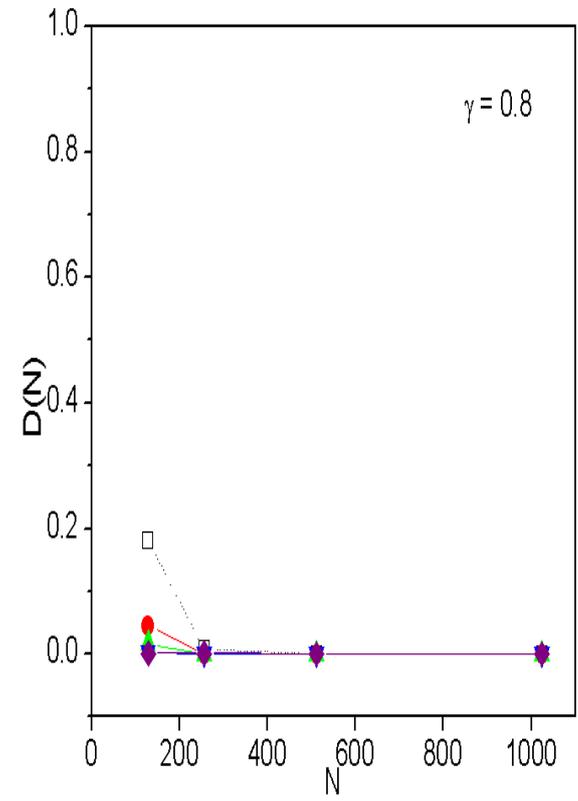
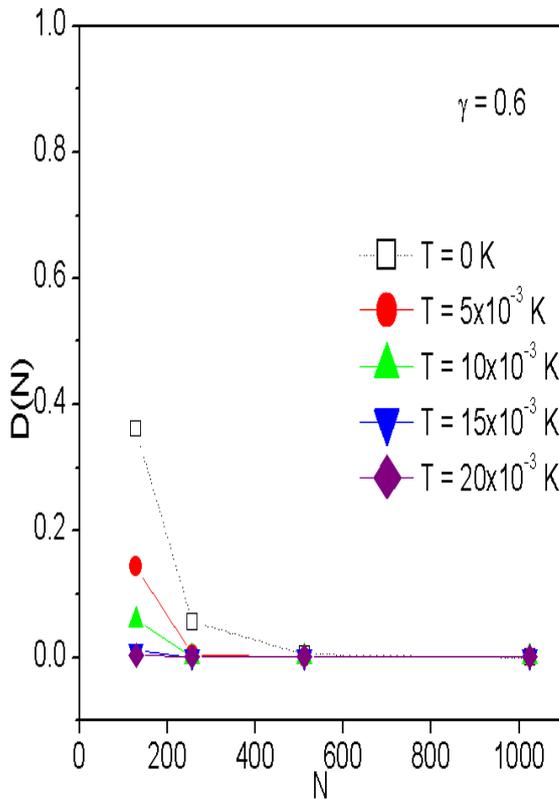
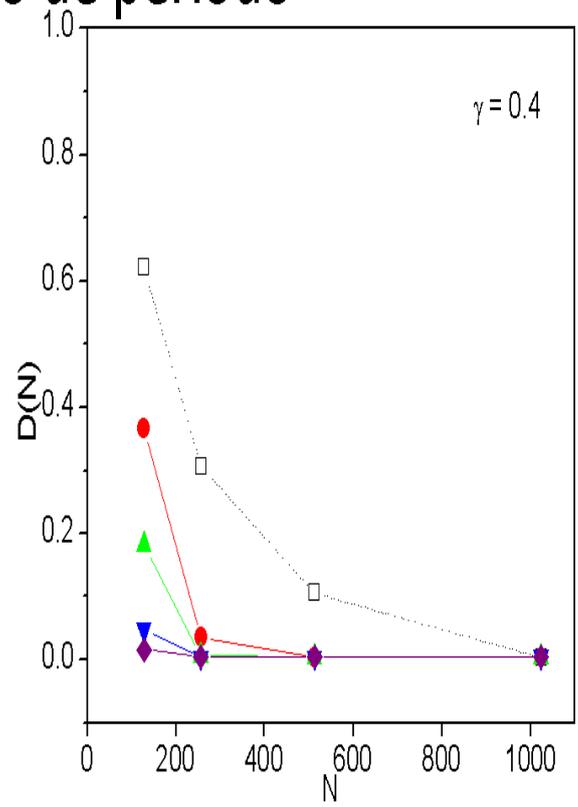
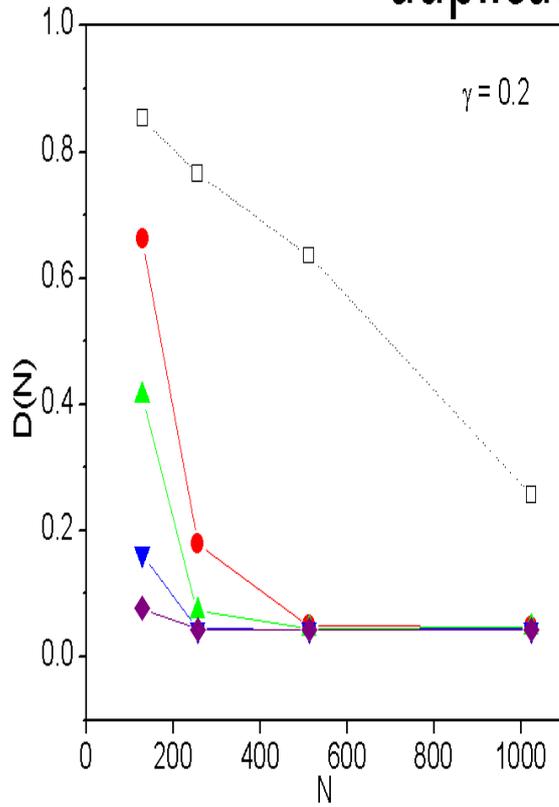
Não notamos modificações em relação ao comportamento para os casos das seqüências Rudin-Shapiro e desordenada, que permanecem como sistemas isolante acentuados pela temperatura.

5.5.2 Preenchimento $15/64$

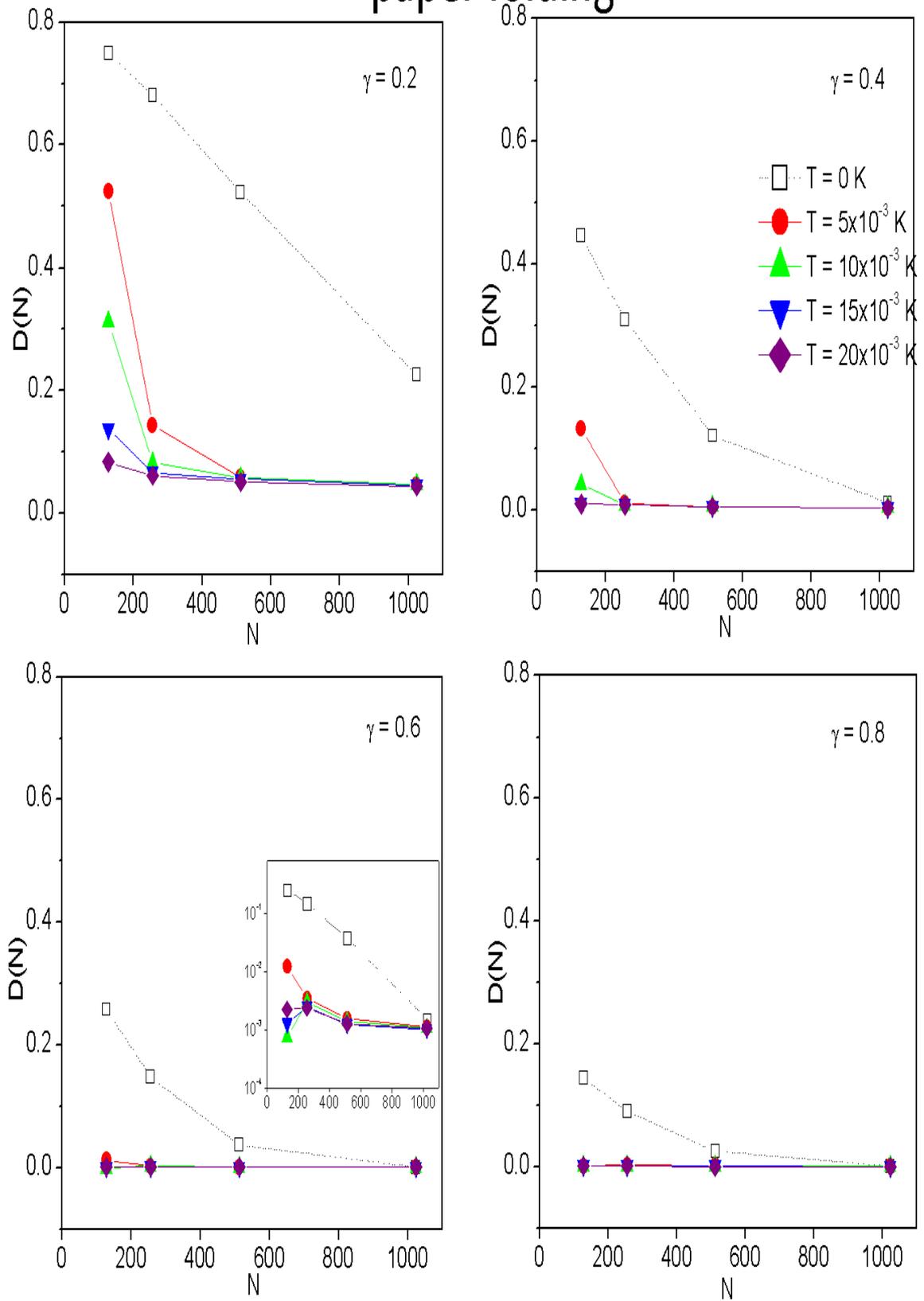
periódico



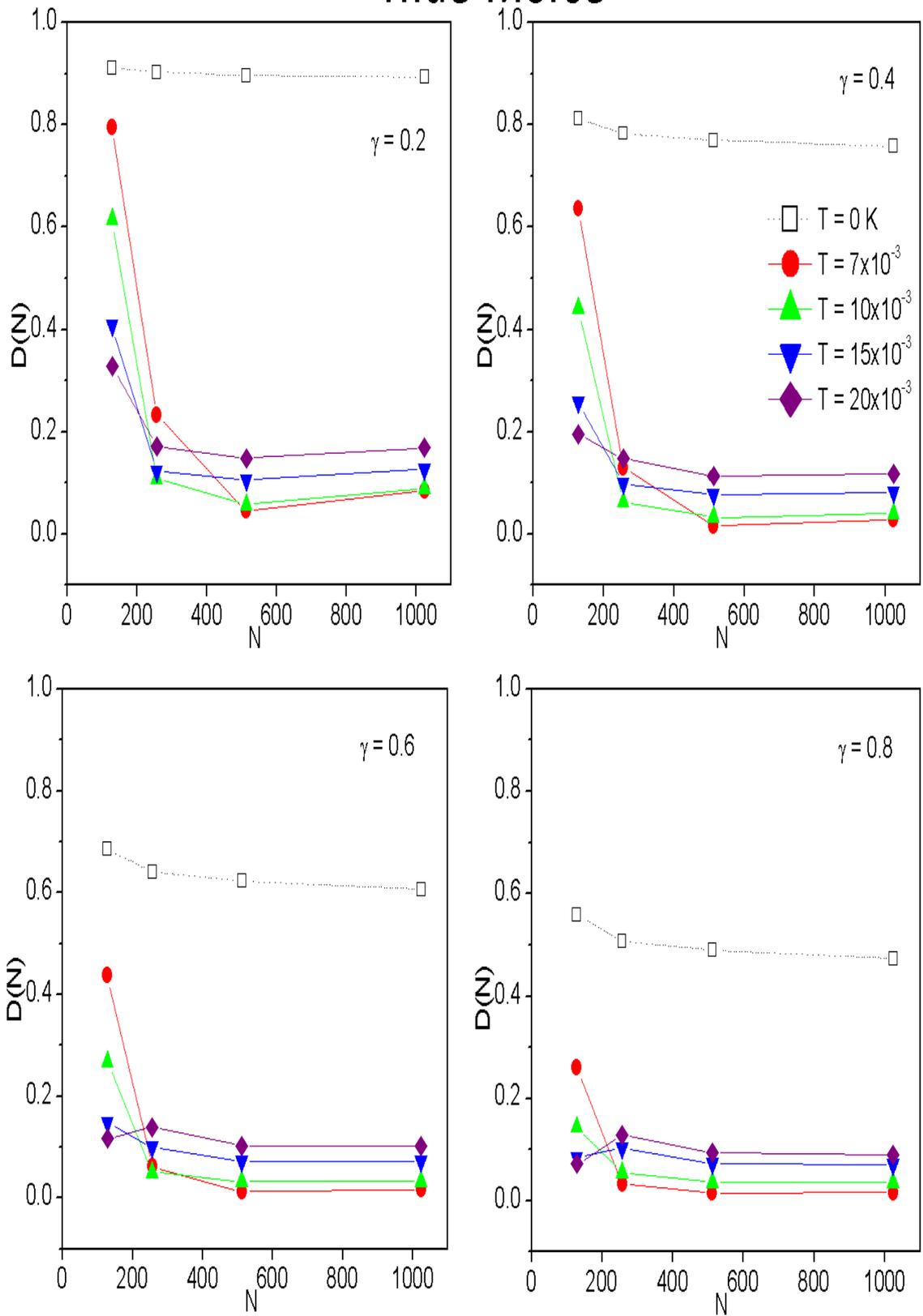
duplicação de período



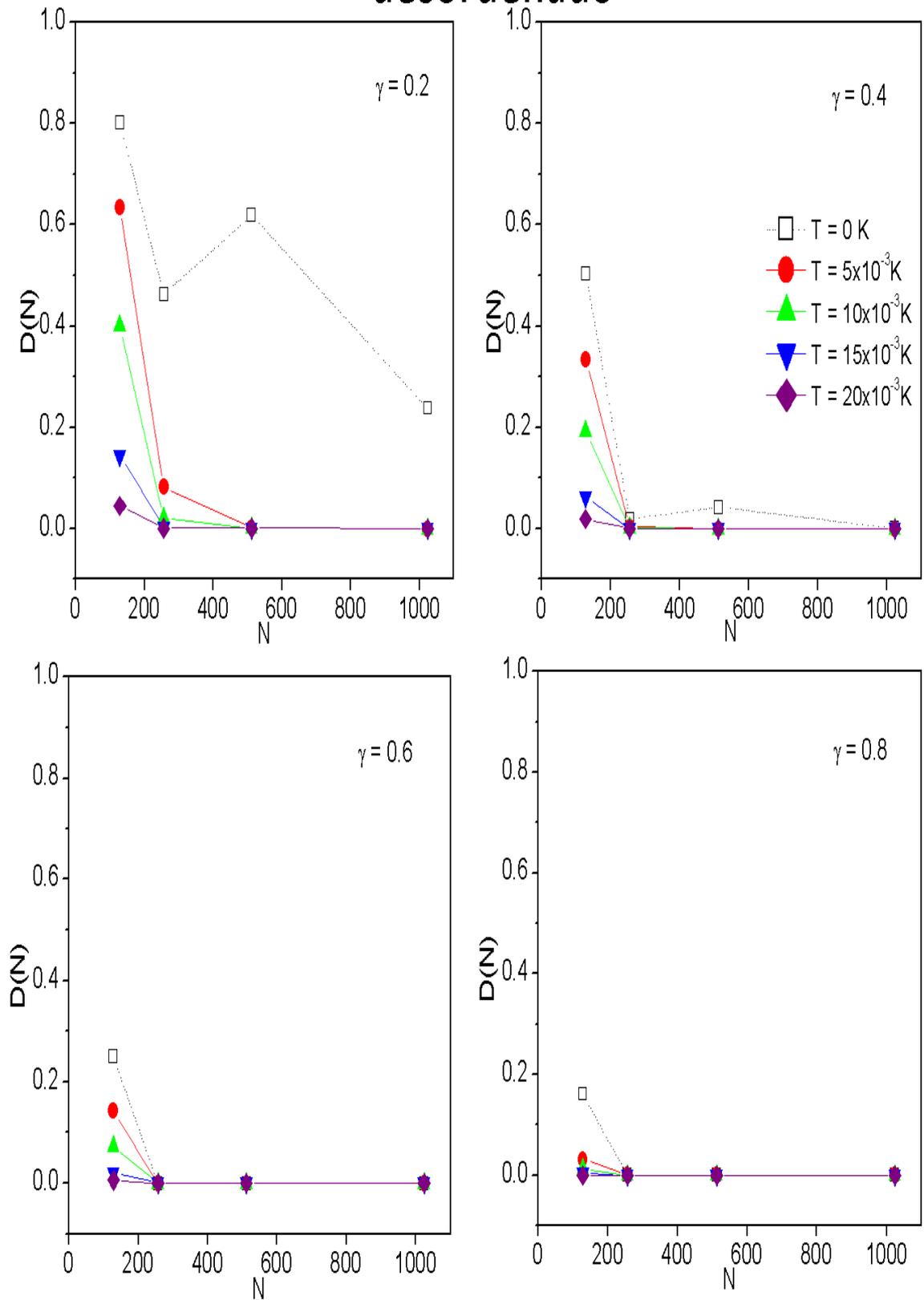
paper folding



Thue-Morse



desordenado



Nesta última situação de preenchimento encontramos apenas dois tipos de respostas da condutividade com relação à temperatura. Para os casos das seqüências periódica e Thue-Morse o sistema permanece condutor com a temperatura, e para os casos das outras seqüências o sistema tem sua característica isolante acentuada pela temperatura.

6 *Conclusões e perspectivas futuras*

Faremos uso da motivação apresentada no capítulo de introdução para discutir os resultados apresentados no presente trabalho. Dentro dessa perspectiva, será útil recorrer às transformadas de Fourier das seqüências de substituição para entender quais as conclusões gerais dos resultados obtidos nesta dissertação.

Dentro da dificuldade em determinar propriedades de condução em função dos vários tipos de seqüências, podemos primeiramente nos basear em dois casos de seqüências em que os resultados são bem conhecidos. No caso de uma seqüência periódica, a qual entendemos como a mais organizada das seqüências, podemos classificar o sistema como melhor condutor, tendo em vista que a função de onda do elétron é completamente estendida. No outro extremo se encontra o caso da seqüência desordenada, onde o sistema é completamente isolante devido à função de onda do elétron ser completamente localizada. Desse modo podemos entender esses dois comportamentos como situações limites da capacidade de condução em função da organização das seqüências. Essa idéia é ilustrada pela figura 6.1.



Figura 6.1: Casos limites do comportamento condutor.

Esperamos intuitivamente por meio desses dois resultados, bem conhecidos no âmbito da teoria quântica da matéria condensada, que a capacidade de condução das seqüências de substituição respeite a hierarquia de desordem das mesmas. Em outras palavras, o sistema deverá se mostrar cada vez mais isolante quanto mais próxima a seqüência estiver do caso desordenado.

Então, observando os espectros de Fourier das seqüências de substituição podemos classificá-las em ordem crescente quanto ao grau de desordem, como mostra a figura abaixo:

(PD e PF) / TM / RS

Figura 6.2: Hierarquia de desordem das seqüências de substituição.

Os resultados obtidos para a seqüência de substituição Rudin-Shapiro, que acreditamos ser a mais desordenada, são os que se aproximam mais do comportamento da situação de seqüência totalmente desordenada; neste caso os resultados estão de acordo com a hipótese discutida acima.

Segundo a interpretação que realizamos das transformadas de Fourier, podemos concluir que a seqüência Thue-Morse é a mais desorganizada depois da seqüência Rudin-Shapiro, como mostra a figura acima. Dessa forma esperaríamos que o caso da seqüência Thue-Morse tivesse suas propriedades de condução mais próximas ao comportamento isolante do caso desordenado, mas os resultados obtidos para o caso desta seqüência indicam propriedades de condução que mais se aproximaram da situação de melhor condutor, que é caracterizada pela seqüência periódica. De fato esse resultado não se encontra em concordância com nossa hipótese baseada nas duas situações limites da capacidade de condução em função da organização das seqüências. Este talvez seja o ponto mais interessante deste trabalho, pois não conseguimos entender os resultados por meio de argumentação intuitiva, o que deixa clara a existência de conceitos físicos, não considerados no presente trabalho, que poderiam explicar este resultado aparentemente contra-intuitivo.

Cabe, neste ponto, propor uma possível estratégia de pesquisa futura que possibilite uma compreensão dos resultados obtidos. Neste intuito, apresentaremos uma propriedade não explorada neste trabalho encontrada nas seqüências Thue-Morse e duplicação de período e que nos servirá como motivação das perspectivas futuras de pesquisa.

Conforme foi discutido anteriormente, a seqüência Thue-Morse se apresenta como a segunda seqüência mais desorganizada, porém essa classificação é obtida dentro de uma perspectiva baseada nas componentes (periódicas) de Fourier. Ou seja, a transformada de Fourier, usada como critério, colhe os sinais de todas as freqüências que surgem dentro da seqüência analisada; assim, nossa análise parece privilegiar as propriedades e simetrias advindas da periodicidade da seqüência, em detrimento de outros possíveis tipos de simetria. A simetria da estrutura da seqüência periódica é determinada pela transformação de translação, ou seja, o sistema de uma estrutura periódica se torna invariante por meio de uma dada translação. Da mesma forma, a seqüência Thue-Morse apresenta um determinado tipo de simetria, mas esta

simetria aparentemente não se revela por meio da sua transformada de Fourier. Notamos que a sequência Thue-Morse se torna invariante por uma transformação de escala, ou seja, se olharmos para as suas quatro primeiras letras (abba) notaremos que esta estrutura se repete em uma escala quatro vezes maior, como mostra a figura abaixo:

abba baab baab abba
a b b a

Figura 6.3: A estrutura das quatro primeiras letras é repetida em uma escala quatro vezes maior, na sequência Thue-Morse.

Dessa forma podemos concluir que a sequência Thue-Morse tem um tipo de organização que não é aparentemente enxergada através da transformada de Fourier. Neste ponto acreditamos que a sequência Thue-Morse deva merecer ser analisada aproveitando sua invariância sobre transformação de escala. Este fato nos leva a tentar encontrar uma possível medida que nos seja conveniente com relação à simetria em questão, talvez isto seja possível utilizando técnicas de análise multifractal.

Podemos ainda propor, também como estratégia de pesquisa, o cálculo do peso de Drude para outras seqüências de potencial que tenham as mesmas propriedades de simetria do caso Thue-Morse. Esta sugestão pode ser entendida como uma forma de verificação da influência direta nas propriedades de condução devido à simetria apresentada por tais seqüências.

Ao final deste trabalho percebeu-se que o estudo de propriedades de condução em sistemas com potenciais de substituição nos leva a resultados aparentemente contra-intuitivos, o que demonstra uma carência de modelos físicos apropriados a esta situação específica.

Referências Bibliográficas

- 1 COHEN-TANNOUJDI, C.; DIU, B.; LALOE, F. **Quantum mechanics**. New York: Wiley, 1977. 1524 p.
- 2 SAKURAI, J. J.; TUAN, S. F. **Modern quantum mechanics**. Rev. Massachusetts: Addison-Wesley, 1994. 500 p.
- 3 BYERS, N.; YANG, C. N. Theoretical considerations concerning quantized magnetic flux in superconducting cylinders. **Physical review letters**, v. 7, n. 2, p. 46–49, 1961.
- 4 KITTEL, C. **Introduction to solid state physics**. 3. ed. New York: Wiley, 1966. 680 p.
- 5 BUTTIKER, M.; IMRY, Y.; LANDAUER, R. Josephson behavior in small normal one-dimensional rings. **Physics letters a**, v. 96, n. 7, p. 365–367, 1983.
- 6 MADELUNG, O. **Introduction to solid-state theory**. 3. ed. New York: Springer, 1996. 488 p. (Springer series in solid-state sciences).
- 7 LANDAUER, R.; BUTTIKER, M. Resistance of small metallic loops. **Physical review letters**, v. 54, n. 18, p. 2049–2052, 1985.
- 8 KOHN, W. Theory of insulating state. **Physical review**, v. 133, n. 1A, p. A171–A193, 1964.
- 9 AXEL, F.; GRATIAS, D. **Beyond quasicrystals**. 1. ed. New York: Springer, 1995. 619 p.
- 10 OLIVEIRA, C. R. de; PELLEGRINO, G. Q. Quantum return probability for substitution potentials. **Journal of physics a**, v. 32, n. 26, p. L285–L292, 1999.
- 11 ELLIOTT, S. R. **Physics of amorphous materials**. 2. ed. New York: Wiley, 1990. 481 p.
- 12 BOUZERAR, G.; POILBLANC, D.; MONTAMBAUX, G. Persistent currents in one-dimensional disordered rings of interacting electrons. **Physical review b**, v. 49, n. 12, p. 8258–8262, 1994.
- 13 GIAMARCHI, T.; SHASTRY, B. S. Persistent currents in a one-dimensional ring for a disordered hubbard-model. **Physical review b**, v. 51, n. 16, p. 10915–10922, 1995.
- 14 NAKANO, F. The flux phase problem on the ring. **Journal of physics a-mathematical and general**, v. 33, n. 30, p. 5429–5433, 2000.
- 15 CHIAPPE, G.; VERGES, J. A.; LOUIS, E. Recovery of the persistent current induced by the electron-electron interaction in mesoscopic metallic rings. **Solid state communications**, v. 99, n. 10, p. 717–721, 1996.
- 16 ANDERSON, P. W. Absence of diffusion in certain random lattices. **Physical review**, v. 109, n. 5, p. 1492–1505, 1958.

17 PELLEGRINO, G. Q. Persistent current and drude weight in one-dimensional rings with substitution potentials. **Journal of physics-condensed matter**, v. 13, n. 35, p. 8121–8134, 2001.

18 REIF, F. **Fundamentals of statistical and thermal physics**. 1. ed. New York: McGraw-Hill, 1965. 651 p.