

ESTUDO NUMÉRICOS DE SISTEMAS COMPLEXOS: MAGNETOS DESORDENADOS, DINÂMICA DE FLUIDOS E SISTEMAS BIOLÓGICOS

Bruno Wanderson Santos Ibiapina (bolsista do PIBIC-ICV), Francisco Barbosa Filho (colaborador, UFPI), Paulo Henrique Ribeiro Barbosa (Orientador, Depto de Física – UFPI)

Introdução

As propriedades dinâmicas de um sólido cristalino é um dos ramos da física da matéria condensada que apresenta grande interesse e atividade de pesquisa desde meados do século passado até hoje. Os cristais são compostos por grupos idênticos de átomos arranjados periodicamente, portanto, têm ordem translacional perfeita. Eles também podem apresentar outros tipos de simetria, tais como simetria de translação e simetria de inversão. Essas propriedades facilitam o desenvolvimento de modelos e métodos teóricos para explicar e prever diversas propriedades dos materiais reais. As evidências experimentais e o trabalho de J. Clerk Maxwell estabeleceram que a natureza da luz é eletromagnética. A teoria eletrodinâmica clássica descreve a luz como uma transferência contínua de energia através de ondas eletromagnéticas. Entretanto, a visão atual da eletrodinâmica quântica descreve as interações eletromagnéticas e o transporte de energia em termos de partículas de massa zero, os fótons, por exemplo, quando registrado por um mecanismo sensível à luz como uma câmera. A luz é formada por um grande número de fótons, tendo a sua intensidade ou brilho ligado aos números deles. Para baixas intensidades, são necessários equipamentos muito sensíveis, como os usados em astronomia, para detectar fótons individuais. Contudo, a natureza quântica da luz não é sempre aparente, nem esse tratamento é de utilidade prática na descrição de muitos fenômenos ópticos. Existem situações nas quais os equipamentos de detecção não são sensíveis aos fótons individuais[1]. O estudo teórico e experimental de excitações em meios cristalinos já vem sendo estudado a mais de um século, com um grande número de resultados experimentais e de modelos propostos. Os métodos de solução destes modelos na sua grande maioria fazem uso da técnica de funções de Green[2,3]. A partir do final da década de 70 foram intensificados os estudos para entender as propriedades de propagação destas excitações em sistemas compostos de materiais formados de meios magnéticos (seja ferro/ferro) e meios magnéticos (ferro) / não magnéticos (dielétricos) [4,5,6,7]. Este grande interesse foi uma decorrência do domínio de técnicas de crescimento de cristais o que permitiu a confecção de meios com interfaces bem definidas. Vamos agora a seguir apresentar um método matemático para a análise da propagação de ondas em sistemas unidimensionais. Esse método interessante que permite resolver o problema de traçar o caminho dos raios luminosos. Esse método é particularmente útil para sistemas óptico em que a resolução analítica convencional fica muito trabalhosa. Esse método utiliza matrizes para prever o caminho de um raio luminoso através de um sistema óptico. Esse método é chamado matriz de transferência pode ser usado para análise da propagação de ondas quânticas, como os elétrons, acústica e ondas elásticas. Uma vez que esta técnica é desenvolvida para um tipo de onda, que pode facilmente ser aplicado a qualquer problema de outra onda. [8]. O método *tight binding* (em português, ligação forte) permite obter, de maneira aproximada,

energias e funções de onda de elétrons em agrupamentos de átomos, que podem ser moléculas, cadeias atômicas, superfícies ou sólidos.

Metodologia

Foram pesquisados vários temas que poderiam ser utilizados neste trabalho, tanto para o estudo do elétron, quanto para de cristais fotônicos e o modo de análise da propagação de ondas quânticas. Escolheu-se o livro [8] porque [o livro em questão ele nos auxilia com o assunto da iniciação, ele aborda os assunto sobre elétrons, cristais fotônicos e materiais canhotos e ainda nos mostra que a matriz de transferência é utilizada para descrever estes diferentes indivíduos].

Resultados e discussão

Análise do método tight binding para o modelo de Kronig-Penney

Neste trabalho foi aplicada a técnica da matriz de transferência para calcular as bandas de energia, as funções de Bloch e as funções de Wannier-Kohn, para o modelo de Kronig-Penney. Por outro lado, o mesmo problema foi resolvido no capítulo anterior, são que usado o método tight binding. Nesta seção é apresentada uma comparação entre os dois métodos. Como o método da matriz de transferência não inclui aproximações, além das

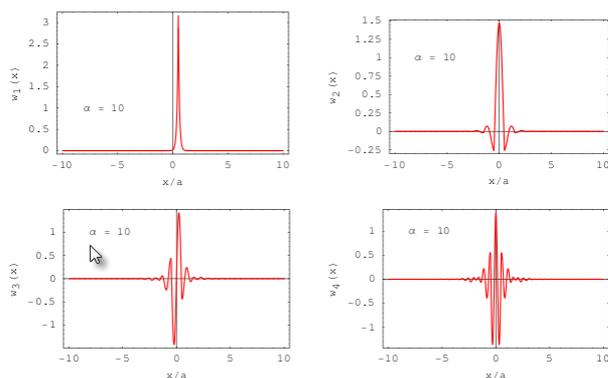
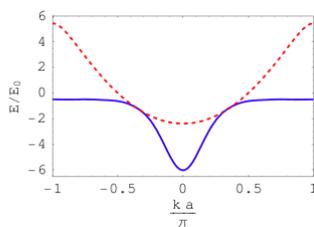


Figura 1: Funções de Wannier-Kohn, em unidades de $1=a^{1/2}$ das quatro bandas inferiores, para o modelo de Kronig-Penney com $\alpha = 10$.

envolvidas no cálculo numérico, os seus resultados serão chamados de solução exata.



A Fig. 2 apresenta a primeira banda de energia do modelo Kronig-Penney tomando $\alpha = 1$. A curva tracejada representa a forma exata da primeira banda, enquanto a linha contínua foi obtida mediante o método tight binding. De fato, para $\alpha = 1$ a superposição dos orbitais atômicos é apreciável e a precisão do método tight binding fica comprometida.

Para $\alpha = 10$, a Fig. 3 apresenta a primeira banda de energia do modelo Kronig-Penney. A curva tracejada representa a forma exata da primeira banda, e a linha contínua representa a primeira banda obtida através da aproximação tight binding. Nota-se que os resultados são praticamente indistinguíveis.

Nas Figuras 4 e 5 apresenta-se a energia média e a largura da primeira banda de energia do modelo de Kronig-Penney como funções de α . As curvas tracejadas são os resultados da técnica da matriz de transferência, e as linhas contínuas correspondem à aproximação tight binding. Como esperado, os resultados do método tight binding são bem melhores para valores grandes de α .

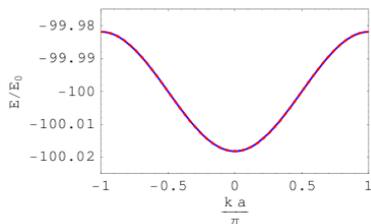


Figura 2: Comparação entre os resultados da técnica da matriz de transferência (curva tracejada) e do método tight binding (curva contínua) para a primeira banda do modelo de Kronig-Penney com $\alpha = 1$. A energia está dada em unidades de $E_0 = \hbar^2/(2ma^2)$.

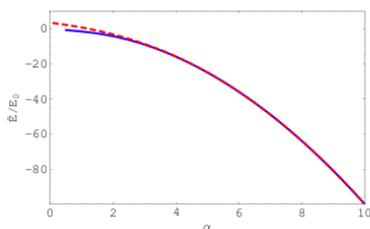


Figura 3: Comparação entre a energia média da primeira banda obtida pela matriz de transferência (curva tracejada) e pelo método tight binding (linha contínua). A energia está dada em unidades de $E_0 = \hbar^2/(2ma^2)$.

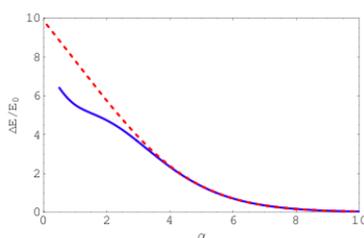


Figura 4: Comparação entre a largura da primeira banda obtida pela matriz de transferência (curva tracejada) e pelo método tight binding (linha contínua). A energia está dada em unidades de $E_0 = \hbar^2/(2ma^2)$.

Referências Bibliográficas

- [1] <http://pt.wikipedia.org/wiki/Fotão> (22/02/11)
- [2] M.G. Cottam e D.R. Tilley, *Introduction to surface and superlattice excitations*, Cambridge University Press, Cambridge, 1989.
- [3] Albuquerque, E. L. e M. G. Cottam, 1993, Phys Rep. 233, 68.
- [4] Albuquerque, E. L. e M. G. Cottam, 2003, Phys Rep. 376, 225.
- [5] M.S. Vasconcelos e E.L. Albuquerque, Physica B 222, 113 (1996), Phys. Rev. B 57, 2826 (1998).
- [6] Moschel, A., K. D. Usadel e A. Hucht, 1993, Phys Rev B 47, 8676.
- [7] Barbosa Filho, F. F., P H R Barbosa, M S Vasconcelos, E L Albuquerque e U L Fulco, Estudo da Localização de Magnons em Super-Redes Quasi-Periódicas Ferro/Antiferromagnéticas com interações de troca biquadráticas, XXX Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada, maio de 2007, São Lourenço.
- [8] Wave propagation: From Electrons to Photonic Crystals and Left-handed materials," P. Markos and C. M. Soukoulis, Princeton Univ. Press (2008).

Palavras-chave: magnetismo; super-redes; fluidos