

## Localização de modos vibracionais em cadeias harmônicas desordenadas

Jose Carlos Rodrigues dos Santos (PIBIC/UFPI), F. F. Barbosa Filho (orientador, Depto. de Física – CCN/UFPI)

### INTRODUÇÃO

Uma grande quantidade de conhecimento pode ser adquirida a partir da análise de massas acopladas conectadas a molas de entender melhor a origem dos modos proibidos (band gaps) em sistemas físicos. É importante salientar que a analogia entre átomos e massas é exata desde que o potencial interatômico seja mantido dentro da aproximação harmônica. Como apenas termos lineares estão envolvidos na descrição mecânica para cada massa acoplada a uma ou duas molas, uma abordagem mais completa é exigida para entender o comportamento atômico de cadeias atômicas em temperaturas mais altas. Neste caso, o modelo descrevendo os sistemas atômicos exigiria termos de ordens mais altas no potencial interatômico e a analogia com massas não seria mais válida.

Considerando que cada átomo na cadeia oscila com pequenas amplitudes e que, portanto, termos não lineares podem ser desprezados, resultados obtidos da analogia com massas acopladas são úteis para estimar aproximadamente as propriedades atômicas e eletrônicas em gases e sólidos. Nesta aproximação, a solução geral para a posição de cada elétron ou átomo será suposta uma combinação de movimentos harmônicos simples com diferentes autovetores (modos).

### METODOLOGIA

Considere o sistema de  $N$  objetos de massa  $m_i$  conectadas entre si por molas de constantes de mola  $k_i$ . Resolvemos as equações de movimento para cada uma das massas do sistema, resultando em  $N$  equações acopladas da forma

$$m_i \ddot{x}_i = -\kappa_i(x_{i+1} - x_i) - \kappa_{i-1}(x_i - x_{i-1}) \quad i = 1, 2, \dots, N \quad (1)$$

Para uma cadeia ordenada, isto é, com  $m_i = m$  e  $k_i = k$ , para todo  $i$ , obtemos a densidade local de estados de uma cadeia infinita, a seguinte relação de dispersão

$$\omega_l^2 = 2[1 + \cos(l\pi/N)] \quad (2)$$

A partir de (1), considerando cadeias de tamanhos 2, 3, 4, ..., obtemos a densidade local de estados. A Equação (1) pode ser interpretado, olhando para uma semi-circunferência dividida em  $N$  partes iguais, como na fig. 1. O quadrado das frequências de

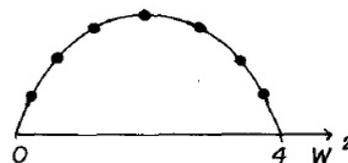


Figura 1. Construção geométrica para obter o quadrado das frequências de modos normais para uma cadeia com  $N = 8$  (Santos, Rodrigues e Oliveira, 1990).

modo normal são as projeções dos pontos de divisão para o eixo  $\omega^2$ . No  $\lim_{N \rightarrow \infty}$ , onde  $\mu = l/N$  torna-se uma variável contínua dos estados, a densidade local de estados  $\rho(\omega)^2$  pode ser obtida contando os números de modos normais  $d\mu$  pelos intervalos  $d\omega^2$  e pelo número de locais. Obtemos o inverso da derivada de  $\omega^2$  em relação a  $l/N$  na equação. (1):

$$\rho(\omega^2) = \left[ \pi \sqrt{\omega^2(4 - \omega^2)} \right]^{-1} \quad (3)$$

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

O quadrado das frequências de modos normais são as projeções dos pontos de divisão para o eixo  $\omega^2$ . No  $\lim_{N \rightarrow \infty}$ , onde  $\mu = l/N$  torna-se uma variável contínua dos estados, a densidade local de estados  $\rho(\omega)^2$  pode ser obtida contando os números de modos normais  $d\mu$  pelo intervalo  $d\omega^2$  e pelo número de locais.

O conceito de bandas de energia permitida no limite  $N \rightarrow \infty$  de um espectro discreto é naturalmente introduzida por esta aproximação. Uma sequência de figuras como Figura. 1 para valores crescentes de  $N$  também pode ajudar na compreensão do conceito de densidade de estados. A Figura 2 mostra o gráfico da equação. (2), que é a densidade de estados como função de  $\omega^2$  para uma cadeia harmônica ordenada.

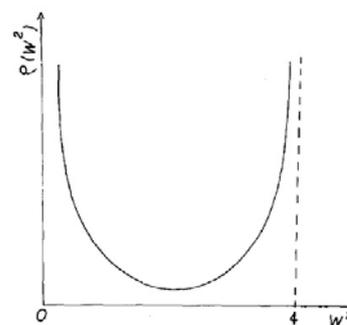


Figura 2. Densidade local de estados para a cadeia harmônica ordenada infinita (Santos, Rodrigues e Oliveira, 1990).

Para uma cadeia harmônica na presença de defeitos (desordenada), resolvendo o conjunto (1) obtém-se a densidade de estados com uma aparência descontínua como mostrado na Figura 3.

## CONCLUSÃO

Estudamos a natureza das excitações coletivas em cadeias harmônicas desordenadas, nesse sistema de modelo, os locais com suas massas interpolam aleatoriamente fazendo uma distribuição uniforme. Esse modelo representa um estendimento em estados harmônicos para frequências de modos normais com deslocamento não aceito para as massas aleatórias. A densidade de estados representa uma singularidade divergente para as frequências de

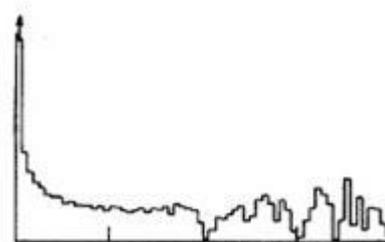


Figura 3. Densidade de estados para uma cadeia com concentração de defeitos (massas leves iguais a metade das massas pesadas)

Área: CV ( ) CHSA ( ) ECET (X)

modos normais, tendo um caráter descontínuo em cadeias desordenadas, o que difere das cadeias ordenadas, onde suas densidades locais de estados são convergentes apresentando curvas suaves.

#### AGRADECIMENTOS

Agradecemos ao Departamento de Física da UFPI pelo apoio computacional.

**Palavras-chave** – sistema massa-mola, sistemas harmônicos, sólidos.

#### REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

SYMON, Keith R. Mecânica. Tradução de Gilson Brand Batista. Rio de Janeiro: Campus, 1982.

Anderson P. W., Phys Rev. 109, 1492 (1958),

Born M. and von Karman J., Zeit. Phys. 13, 1027, 1912

Barton J. G., Elements of Green's Functions and Propagation: Potentials, Differential

Byron F. W., Fuller R. W., Mathematics of Classical and Quantum Physics. Dover, reprint edition, 1992. Two volumes in one.

Dean P., Rev. Mod. Phys. 44, 127 (1972)

Debye P., Ann. Phys. 39, 689, 1912.

Duffy D. G., Green's Functions with Applications, Chapman and Hall/CRC, Boca Raton, FL, 2001.

Economou E. N. Green's Functions in Quantum Physics, 3rd Ed., Springer Verlag, 2006 Berlin, Germany

Flores J. C., J. physics. Condens. Matter 1, 1998

Gonçalves da Silva, C. E. T., Koiller, B., Solid State Communications, 40, 215 (1981)

Mathews J., Walker R. L., Mathematical Method of Physics. Addison-Wesley, Reading, MA, second edition, 1970.

Rosenstock H. B., McGill R. E., Phys. Rev. 176, 1004 (1968)

Santos M. S., Rodrigues E. S., Oliveira P. M. C. Am. J. Phys. 58, 923 (1990)