

Análise Vibracional de Cadeias Unidimensionais: Homogênea vs Ternária

Frequências Naturais, Densidade de Estados e Modos Normais

Lucas Martin De Lucca

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ABC
Física Computacional

July 23, 2025

1 Introdução

2 Metodologia

3 Resultados

- Densidade de Estados
- Modos Normais - Homogênea
- Modos Normais - Ternária

4 Discussão

5 Conclusão

- Estudo de cadeias unidimensionais com massas conectadas por molas.
- Dois sistemas:
 - **Cadeia Homogênea:** todas as massas iguais (m).
 - **Cadeia Ternária:** massas alternadas ($m, 3m, 5m$).
- Objetivo:
 - Calcular frequências naturais e modos normais.
 - Analisar a densidade de estados.
 - Investigar presença de *band gaps*.

- Construção da matriz dinâmica:

$$D_{ij} = \frac{1}{m_i} [(k_{i-1} + k_i)\delta_{ij} - k_{i-1}\delta_{i,j+1} - k_i\delta_{i,j-1}]$$

- Resolução do problema de autovalores:

$$D\vec{u} = \lambda\vec{u}, \quad \omega = \sqrt{\lambda}$$

- Condições de contorno: extremidades livres.
- Análise para $N = 100, 1000, 10000$.

Densidade de Estados - Histogramas

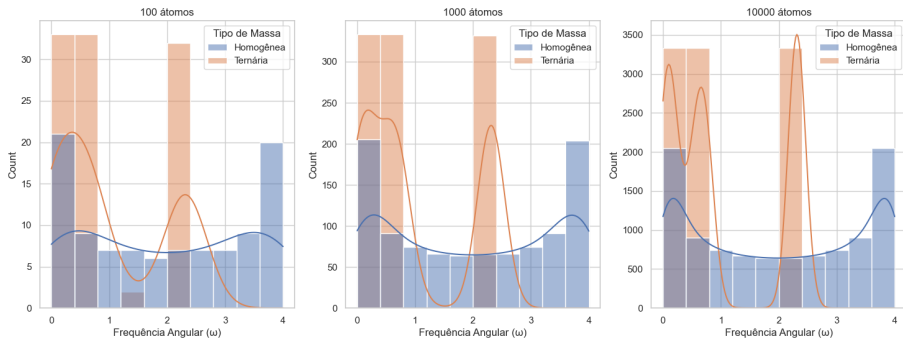


Figure: Comparação da densidade de estados para cadeias homogênea e ternária, em $N = 100, 1000, 10000$.

- Homogênea: espectro contínuo, sem lacunas de frequência.
- Ternária: **band gaps** claros entre as diferentes massas.
- Aumento de N : densificação das bandas, espectro tende ao contínuo.

Modos Normais - Homogênea ($N = 100$)

Deslocamentos do Sistema com 100 Átomos (Homogêneo)

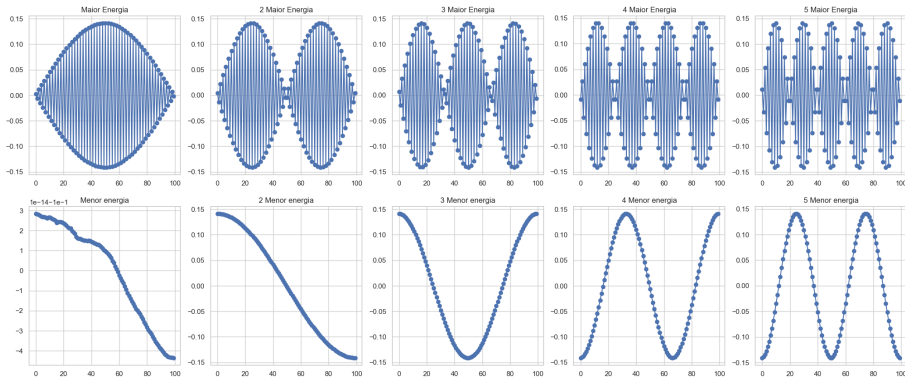


Figure: Cinco modos de menor energia (inferior) e maior energia (superior).

- Menores frequências: modos longos, quase ondas estacionárias.
- Maiores frequências: alternância rápida, nós múltiplos.

Modos Normais - Homogênea ($N = 1000$)

Deslocamentos do Sistema com 100 Átomos (Homogêneo)

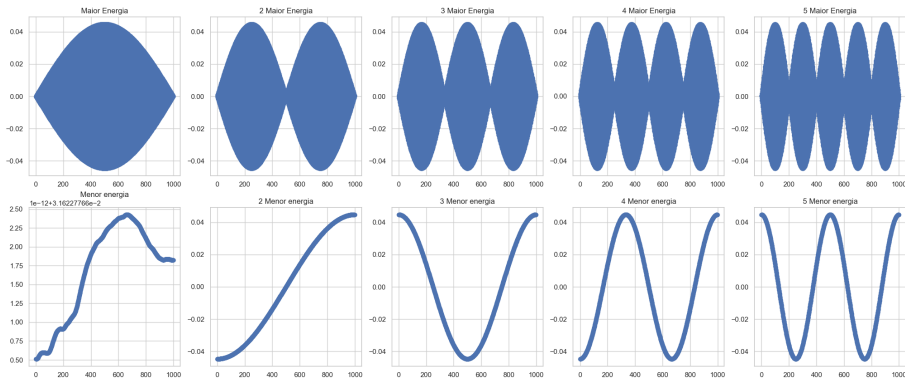


Figure: Escalonamento: mais nós, padrões suaves mantidos.

Modos Normais - Homogênea ($N = 10000$)

Deslocamentos do Sistema com 100 Átomos (Homogêneo)

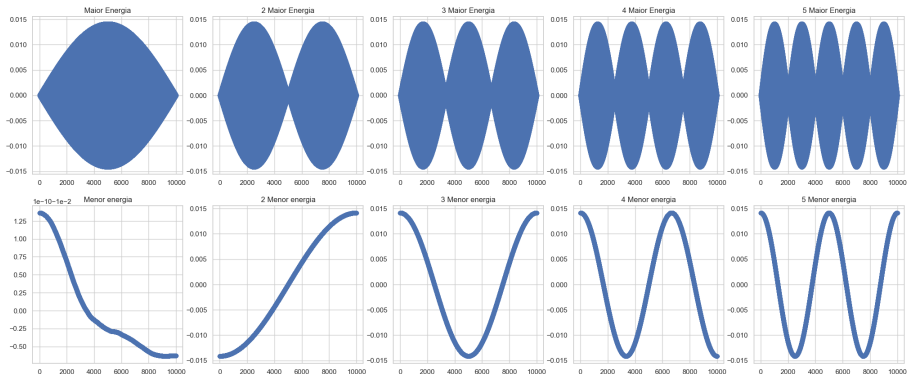


Figure: Aumento de N : continuidade clara, modos cada vez mais sinusoidais.

Modos Normais - Ternária ($N = 100$)

Deslocamentos do Sistema com 100 Átomos (Ternária)

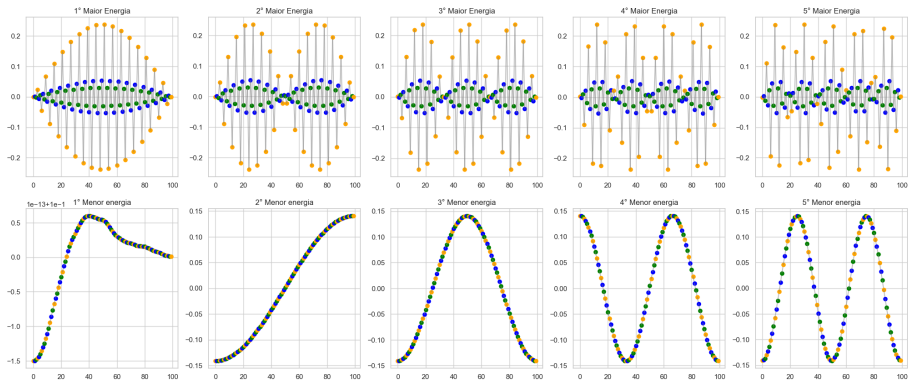


Figure: Cadeia ternária: deslocamentos localizados nas massas mais pesadas nos modos de alta energia.

Modos Normais - Ternária ($N = 1000$)

Deslocamentos do Sistema com 1000 Átomos (Ternária)

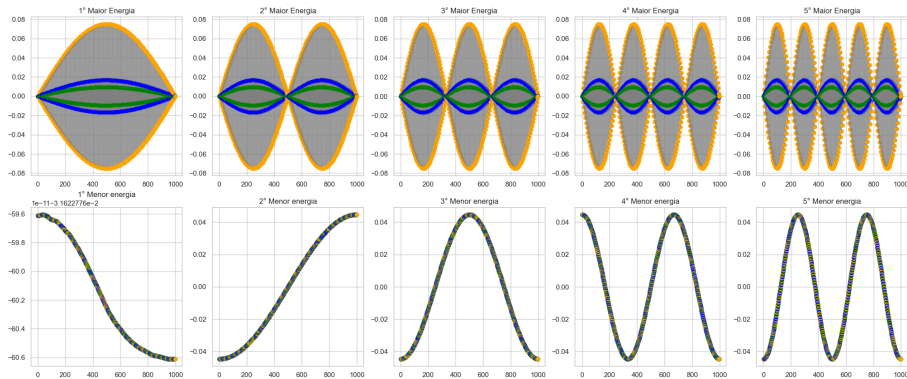


Figure: Padrão ternário preservado, aumento da densidade de modos.

Modos Normais - Ternária ($N = 10000$)

Deslocamentos do Sistema com 1000 Átomos (Ternária)

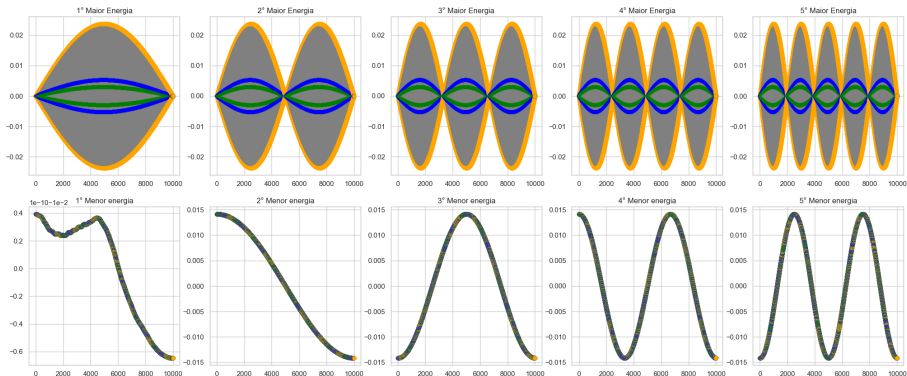


Figure: Estrutura periódica → bandas com lacunas bem definidas.

- Cadeia homogênea:
 - Frequências distribuídas de forma contínua.
 - Modos semelhantes a ondas planas.
- Cadeia ternária:
 - **Band gaps** devido à alternância de massas.
 - Frequência variando com a massa.
- Aumento de N : mais modos, espectro tende ao contínuo, mas periodicidade mantém lacunas.

- Heterogeneidade (ternária) \rightarrow lacunas de frequência, efeito não visto na homogênea.
- Implicações: Determinação de capacidade térmica, condutividade térmica e estabilidade estrutural
- Método escalável para grandes N usando matriz dinâmica.