Propagação de Perturbações em Redes Cristalinas

Afonso Rufino 90373 e Carolina Figueiredo 90383

Neste projeto pretendemos descrever e comparar o modo de propagação de perturbações em redes cristalinas. Para isto criámos duas redes de molas (100x100) de constante de elasticidade k , uma quadrada (semelhante a uma rede cúbica simples plana) e outra hexagonal (semelhante à rede do grafeno).

I. EQUAÇÕES DOS SISTEMAS

1. Rede Quadrada

Na obtenção das equações para esta rede considerou-se que a força elástica é aproximadamente constante para deslocamentos perpendiculares à mola. (A equação em y é omitida por ser igual à em x trocando os índices)

$$\ddot{z}_{i,j} = \frac{F_0}{m \cdot l} \cdot (-4z_{i,j} + z_{i+1,j} + z_{i-1,j} + z_{i,j+1} + z_{i,j-1})$$

$$\ddot{x}_{i,j} = \frac{k}{m}\left(-2x_{i,j} + x_{i+1,j} + x_{i-1,j}\right) + \frac{F_0}{m\, l}\left(-2x_{i,j} + x_{i,j+1} + x_{i,j-1}\right)$$

2. Rede Hexagonal

No caso da rede hexagonal considerou-se a aproximação usada nas redes cristalinas de que, para pequenos deslocamentos relativos ao equilíbrio, o ângulo se mantém constante. Casos em análise, consoante a posição da massa: (1) Coluna ímpar-linha par ou coluna par-linha ímpar; (2) Caso contrário.(A equações em y é omitida por ser igual à em x exceto o ângulo e o valor de Q, sendo o primeiro 60º em x e 30º em y e sendo Q=k/m em x e Q=$F_0/l \cdot m$ em y).

(1)

$$\ddot{z}_{i,j} = \frac{F_0}{m \cdot l} \cdot (-3z_{i,j} + z_{i+1,j} + z_{i-1,j} + z_{i,j+1})$$

$$\ddot{x}_{i,j} = \cos\theta^2 \cdot \frac{k}{m} \cdot (-2x_{i,j} + x_{i+1,j} + x_{i-1,j}) + Q \cdot (x_{i,j+1} - x_{i,j})$$

(2)

$$\ddot{z}_{i,j} = \frac{F_0}{m \cdot l} \cdot (-3z_{i,j} + z_{i+1,j} + z_{i-1,j} + z_{i,j-1})$$

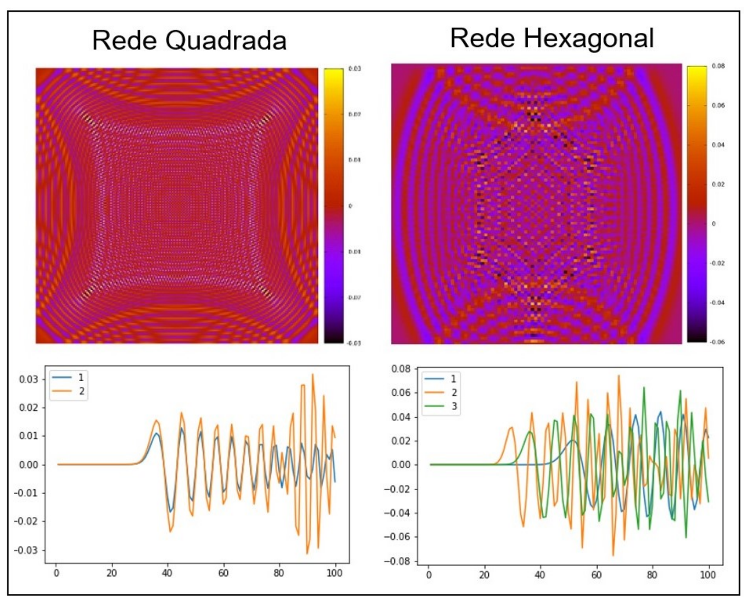
$$\ddot{x}_{i,j} = \cos\theta^2 \cdot \frac{k}{m} \cdot (-2x_{i,j} + x_{i+1,j} + x_{i-1,j}) + Q \cdot (x_{i,j-1} - x_{i,j})$$

II. MÉTODOS E FERRAMENTAS COMPUTACIONAIS

Para resolver as equações diferenciais do movimento utilizámos o método numérico de Euler-Crommer, na linguagem C. Para isto foi necessário atribuir valores às constantes físicas do sistema: k - constante de elasticidade - 1 N/m ; l - distância entre as molas - 1 m ; m - massas pontuais - 1 Kg ; F_0 - força exercida pelas molas no equilibrio - 0,5 N. A escolha destes valores deveu-se à dificuldade em encontrar valores experimentais relativos a estruturas cristalinas. Contudo, isto não põe em causa a validade ou generalidade dos resultados obtidos, sendo que a análise relativa seria a mesma. A escolha de F_0 foi motivada pela introdução de uma direção anisotrópica.

III. ANÁLISE DOS RESULTADOS

As primeiras imagens ilustram o estado da rede, que foi inicialmento perturbada colocanda a massa central em z=2m. Em ambas as redes a perturbação inicial é circular, contudo, decorrente da sua geometria intrínseca estas são moduladas pela forma da geometria da rede. Com base na simulação em vídeo presente no link[1] em baixo, conseguimos identificar duas velocidades distintas: A velocidade de propagação da frente de onda (velocidade de fase) e ainda a velocidade de propagação da modulação (velocidade de grupo). Os segundos gráficos analisam as diferenças de propagação de iguais perturbações longitudinais e transversais para a massa [25,50], diretamente acima da massa central de cada rede. Na rede quadrada, distinguimos apenas duas direções de propagação: (1) em x, (2) em z visto que o caso em y deriva das mesmas equações. Do gráfico conclui-se que a perturbação resultante nesta massa é superior na direção z do que em x, o que se deve ao facto desta massa se localizar na direção perpendicular a x (a maior parte da energia da perturbação inicial em x é transmitida às horizontalmente adjacentes). Já na rede hexagonal é justificável apresentar as 3 direções: (1) em x, (2) em y e (3) em z. O raciocínio anterior pode ser aqui aplicado, sendo na direção paralela à que une a massa ao centro que se verifica uma propagação mais rápida e de maior amplitude (em y).



REFERÊNCIAS

[1]Https://youtu.be/s0-5dchooxI , https://youtu.be/5DhWdCUKtD4.