

Física Computacional - Av5

Mariana Yano
Universidade Federal do ABC, Santo André.
(Dated: July 14, 2025)

I. INTRODUÇÃO

Modelos de cadeias massa-mola são amplamente utilizados para descrever vibrações em sólidos, especialmente redes cristalinas unidimensionais. Cada átomo é modelado como uma massa conectada por molas, representando as ligações interatômicas. Essa abordagem permite estudar propriedades dinâmicas como frequências naturais, densidade de estados vibracionais e efeitos de defeitos estruturais. Introduzir um defeito (como uma massa diferente) permite investigar fenômenos de localização de modos vibracionais, importantes em materiais com impurezas.

II. METODOLOGIA

A análise baseia-se na construção da matriz dinâmica D , que incorpora as massas e constantes elásticas do sistema. Foram aplicadas condições de contorno periódicas, simulando uma cadeia circular.

- Para a cadeia homogênea: todas as massas $m = 1kg$.
- Para a cadeia com defeito: uma massa central substituída por $m_2 = 5kg$.
- Três tamanhos de cadeia foram simulados: $N = 100, 1000, 10000$.
- As frequências naturais foram obtidas a partir dos autovalores da matriz dinâmica.
- Modos normais (autovetores) foram analisados para os cinco menores e maiores valores de frequência.
- A densidade de estados foi visualizada por histogramas das frequências.
- Todos os cálculos foram realizados via Python (bibliotecas: *numpy, matplotlib, scipy.linalg*).

III. RESULTADOS

A. Histogramas - Densidades de Estado (N=100)

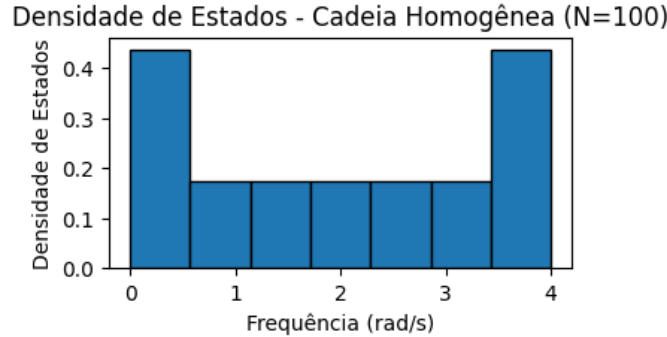


FIG. 1: Densidade de Estados - Cadeia Homogênea (N=100)

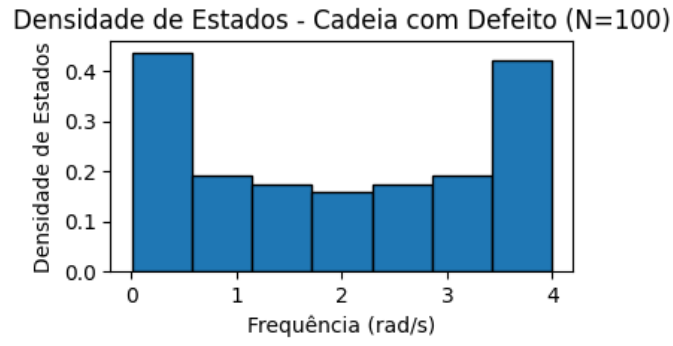


FIG. 2: Densidade de Estados - Cadeia com Defeito (N=100)

B. Gráficos – Modos Normais (N=100)

1. Cinco Menores Freqências - Cadeia Homôgênea

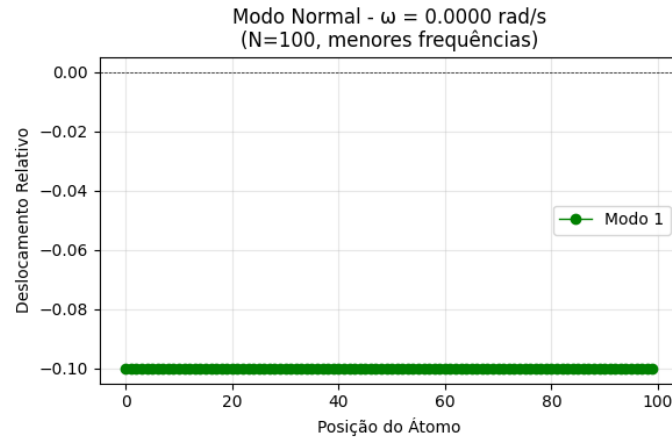


FIG. 3: Primeiro Modo Normal - Cadeia Homôgênea (N=100)

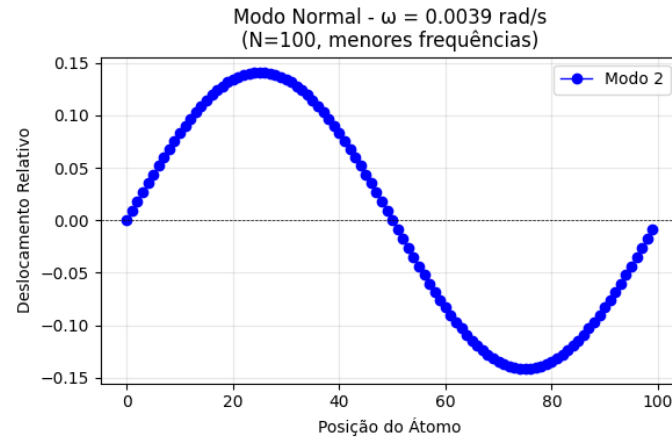


FIG. 4: Segundo Modo Normal - Cadeia Homôgênea (N=100)

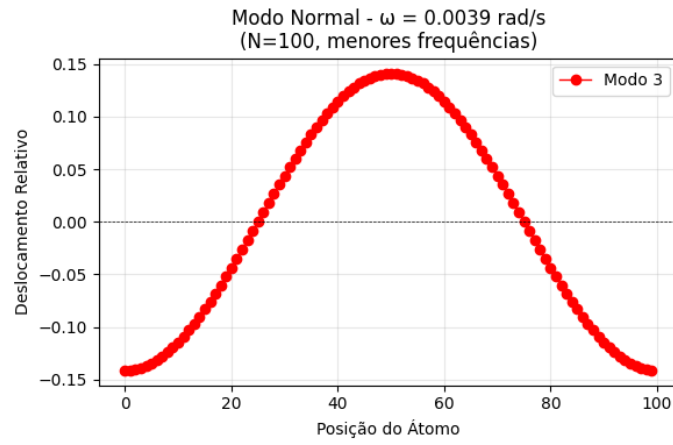


FIG. 5: Terceiro Modo Normal - Cadeia Homogênia (N=100)

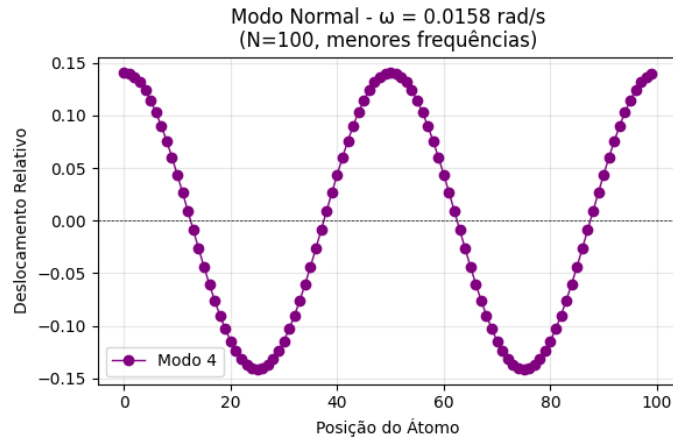


FIG. 6: Quarto Modo Normal - Cadeia Homogênia (N=100)

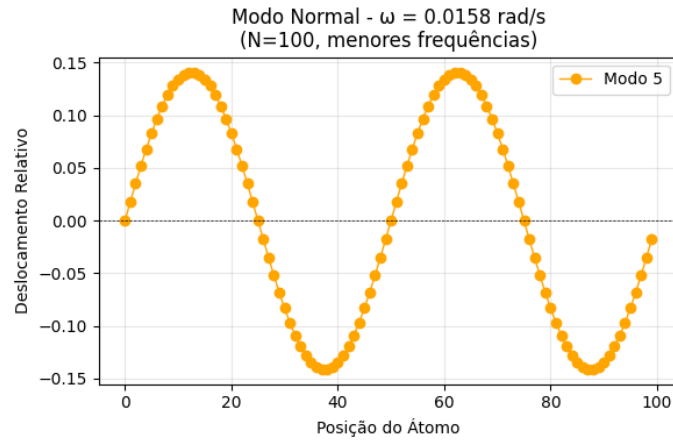


FIG. 7: Quinto Modo Normal - Cadeia Homogênia (N=100)

2. Cinco Maiores Freqüências - Cadeia Homogênea

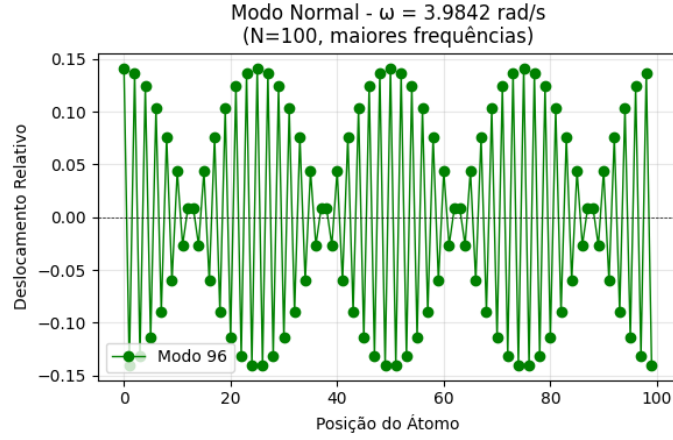


FIG. 8: Modo Normal 1 - Cadeia Homogênea (N=100)

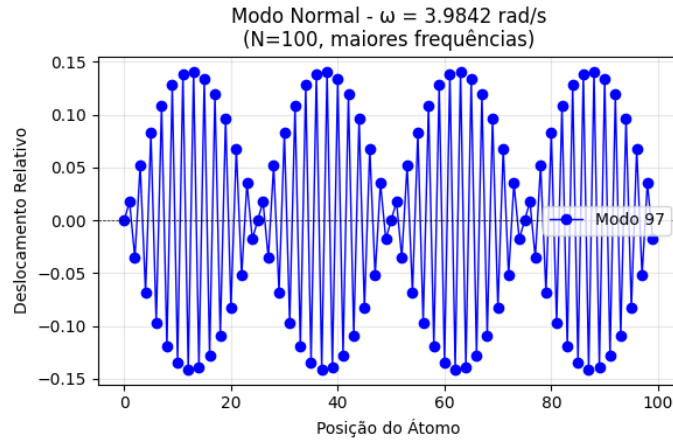


FIG. 9: Modo Normal 2 - Cadeia Homogênea (N=100)

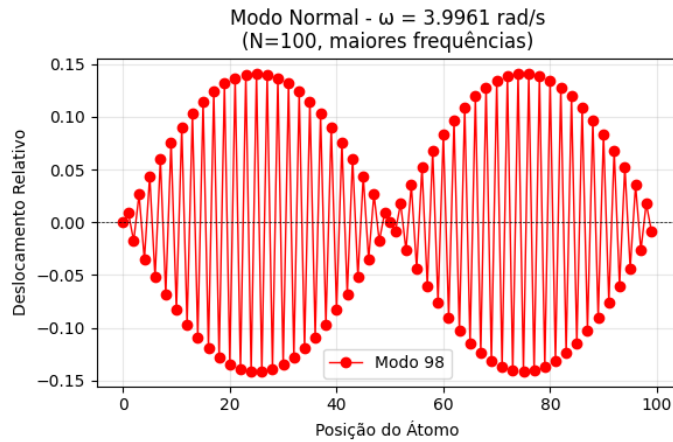


FIG. 10: Modo Normal 3 - Cadeia Homogênea (N=100)

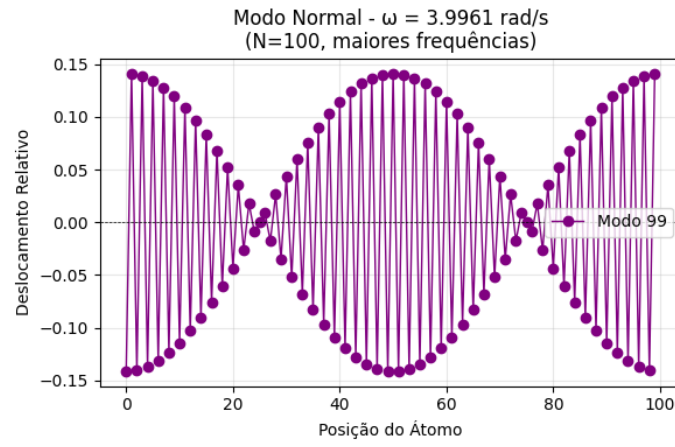


FIG. 11: Modo Normal 4 - Cadeia Homogênea (N=100)

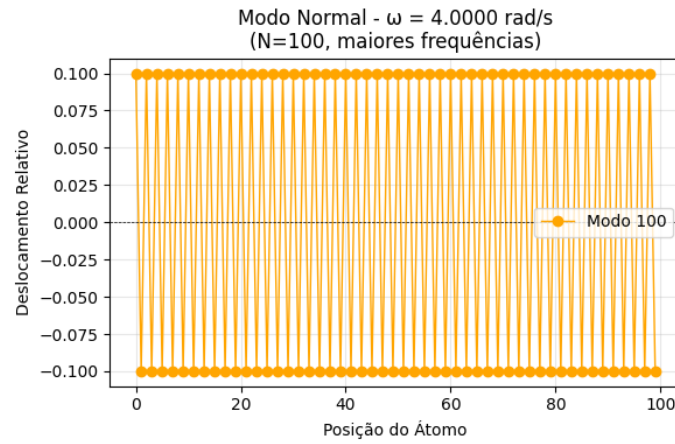


FIG. 12: Modo Normal 5 - Cadeia Homogênea (N=100)

3. Cinco Menores Frequências - Cadeia com Defeito

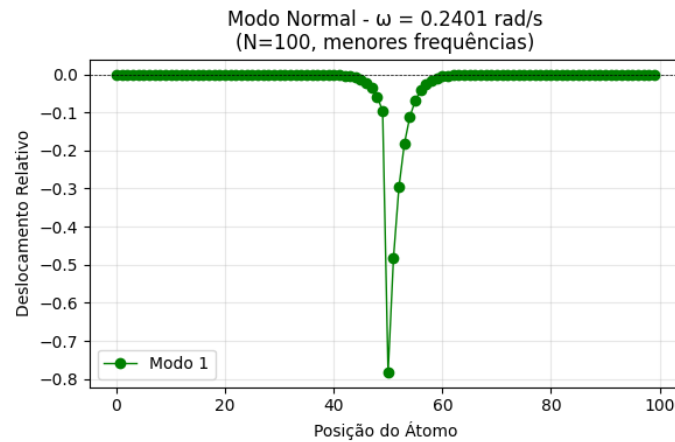


FIG. 13: Primeiro Modo Normal - Cadeia com Defeito (N=100)

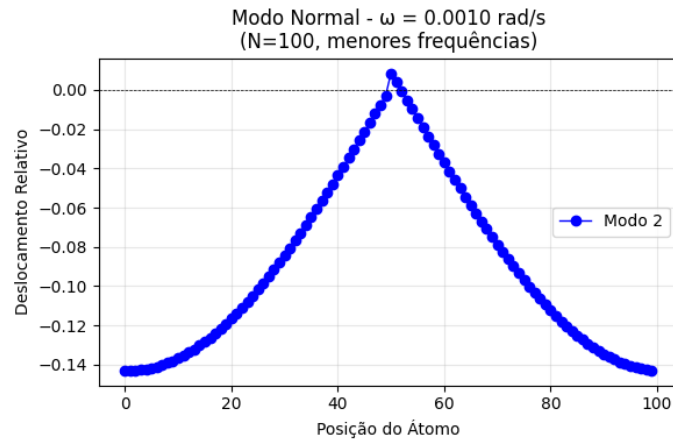


FIG. 14: Segundo Modo Normal - Cadeia com Defeito (N=100)

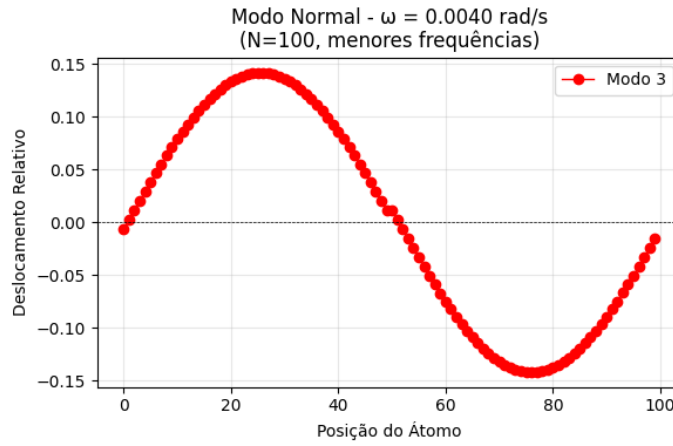


FIG. 15: Terceiro Modo Normal - Cadeia com Defeito (N=100)

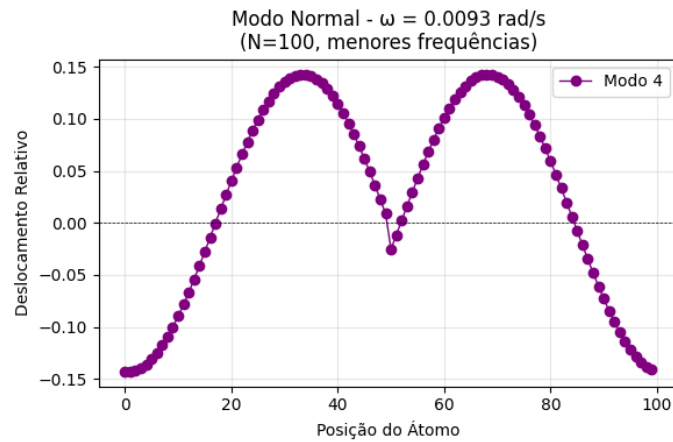


FIG. 16: Quarto Modo Normal - Cadeia com Defeito (N=100)

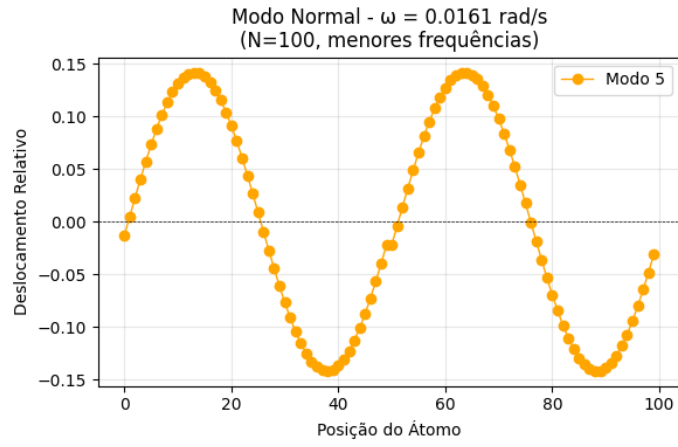


FIG. 17: Quinto Modo Normal - Cadeia com Defeito (N=100)

4. Cinco Maiores Freqüências - Cadeia com Defeito

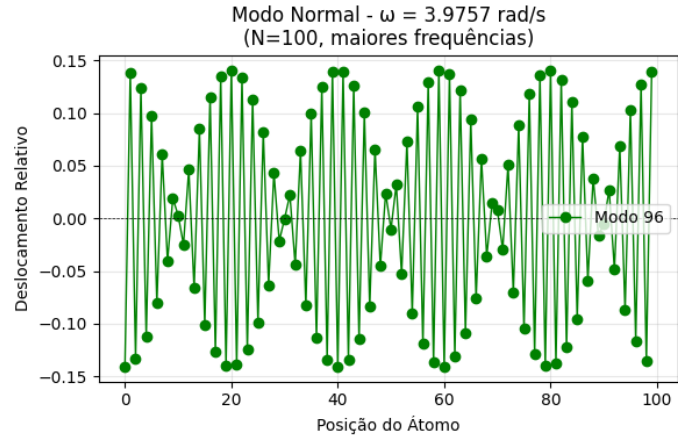


FIG. 18: Modo Normal 1 - Cadeia com Defeito (N=100)

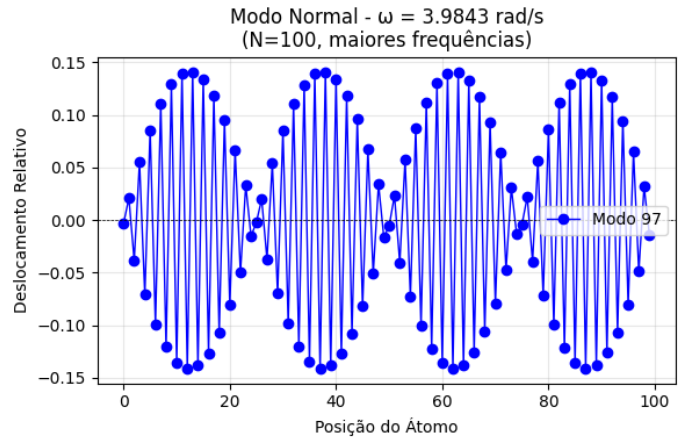


FIG. 19: Modo Normal 2 - Cadeia com Defeito (N=100)

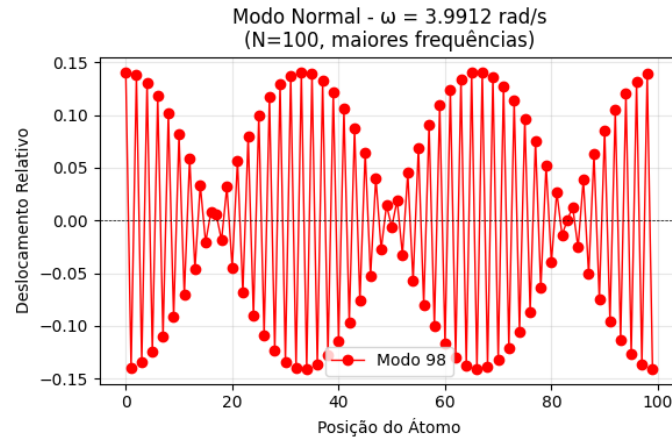


FIG. 20: Modo Normal 3 - Cadeia com Defeito (N=100)

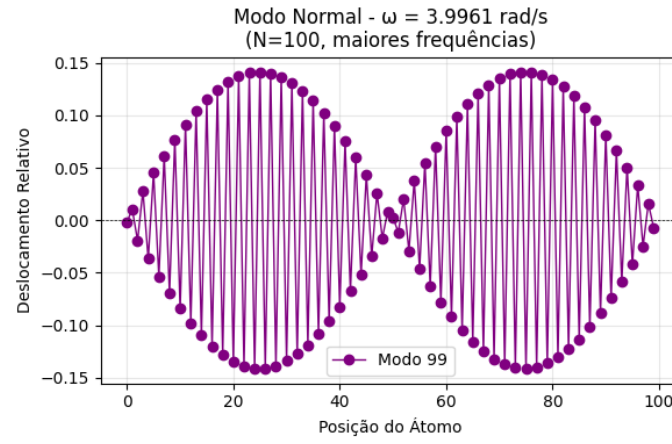


FIG. 21: Modo Normal 4 - Cadeia com Defeito (N=100)

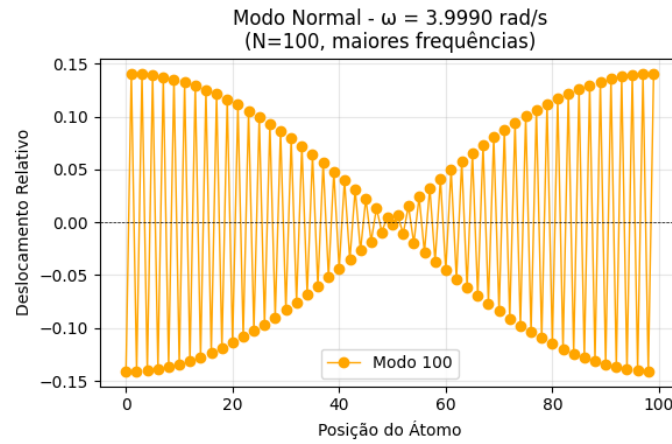


FIG. 22: Modo Normal 5 - Cadeia com Defeito (N=100)

C. Histogramas - Densidades de Estado (N=1000)

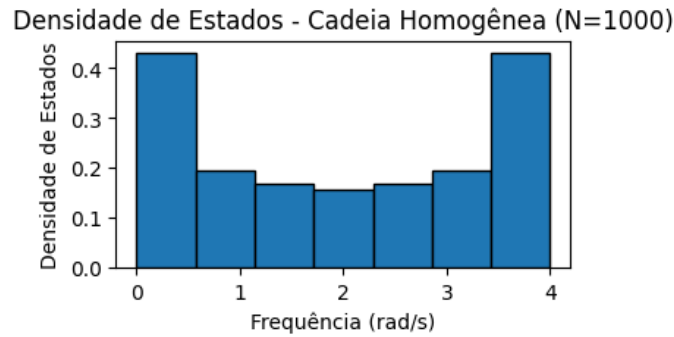


FIG. 23: Densidade de Estados - Cadeia Homogênea (N=1000)

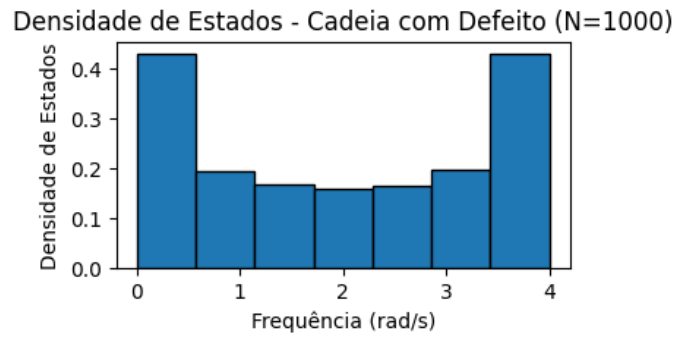


FIG. 24: Densidade de Estados - Cadeia Homogênea (N=1000)

D. Gráficos - Modos Normais (N=1000)

1. Cinco Menores Freqências - Cadeia Homogênea

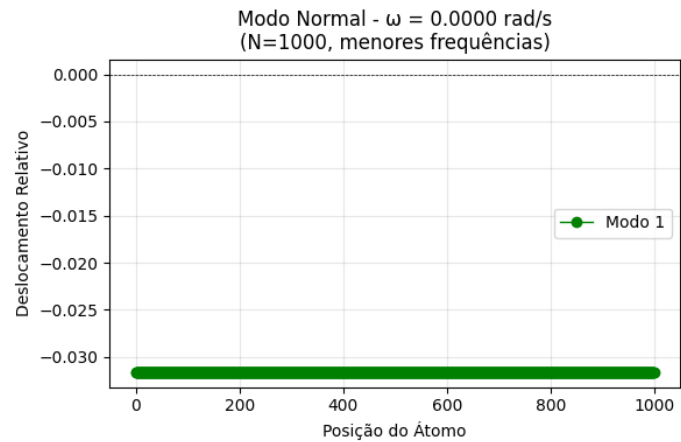


FIG. 25: Primeiro Modo Normal - Cadeia Homogênea (N=1000)

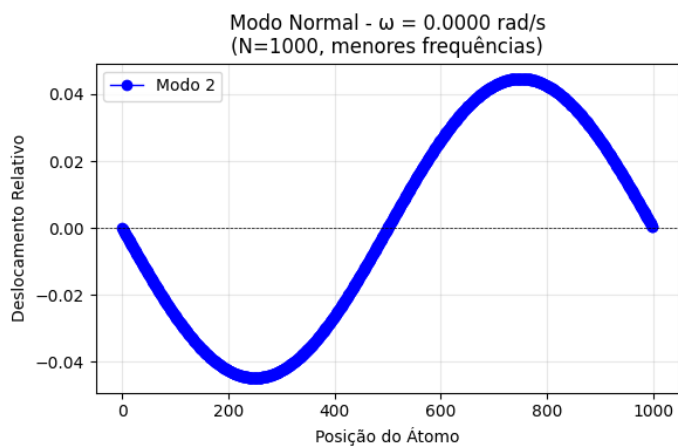


FIG. 26: Segundo Modo Normal - Cadeia Homogênea (N=1000)

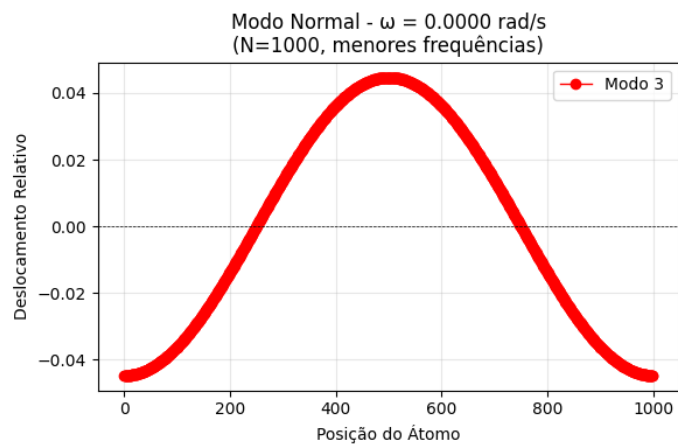


FIG. 27: Terceiro Modo Normal - Cadeia Homogênea (N=1000)

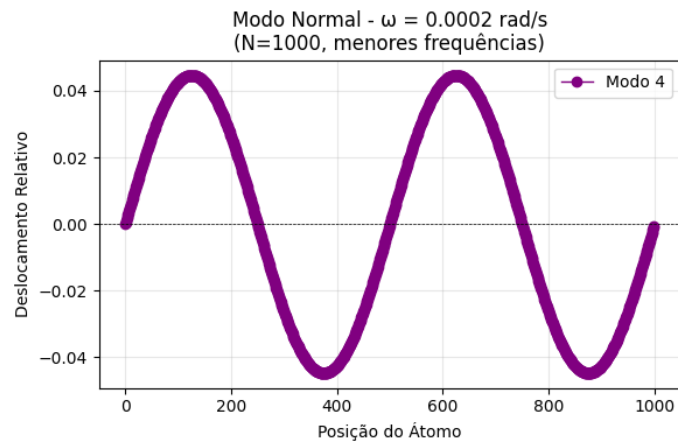
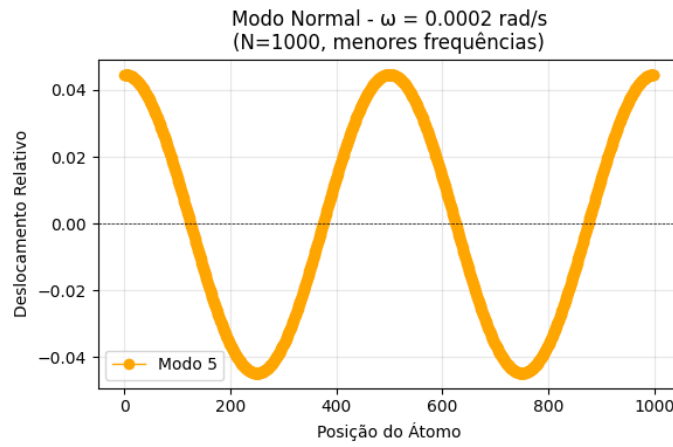
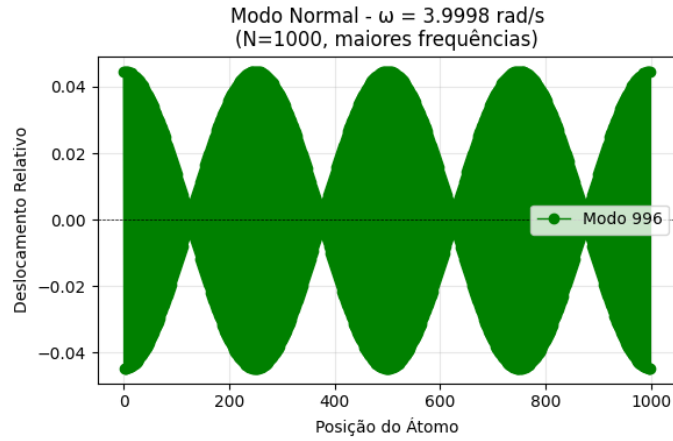
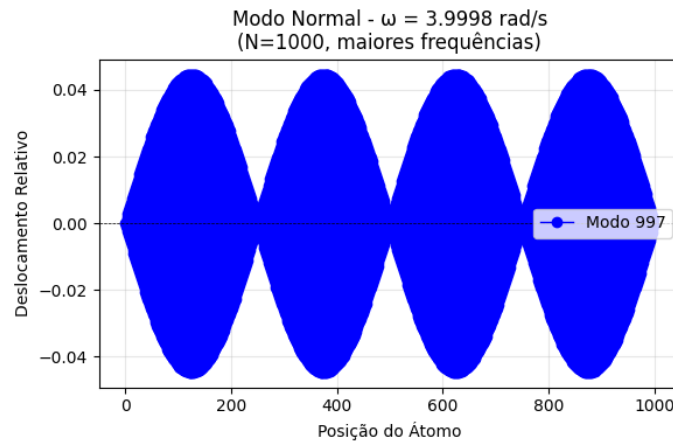


FIG. 28: Quarto Modo Normal - Cadeia Homogênea (N=1000)

FIG. 29: Quinto Modo Normal - Cadeia Homogênea ($N=1000$)

2. Cinco Maiores Frequências - Cadeia Homogênea

FIG. 30: Modo Normal 1 - Cadeia Homogênea ($N=1000$)FIG. 31: Modo Normal 2 - Cadeia Homogênea ($N=1000$)

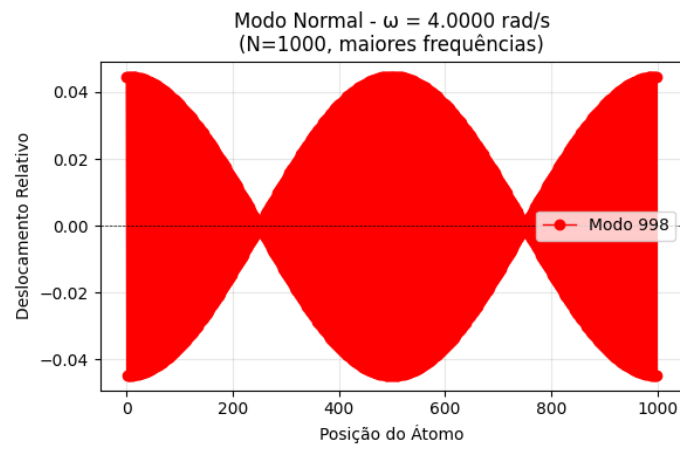


FIG. 32: Modo Normal 3 - Cadeia Homogênea (N=1000)

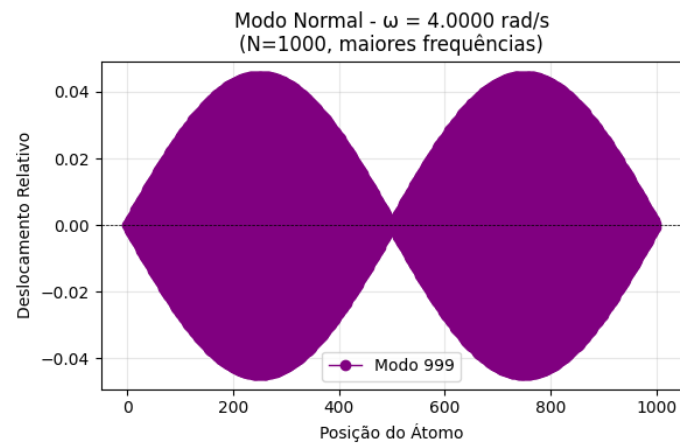


FIG. 33: Modo Normal 4 - Cadeia Homogênea (N=1000)

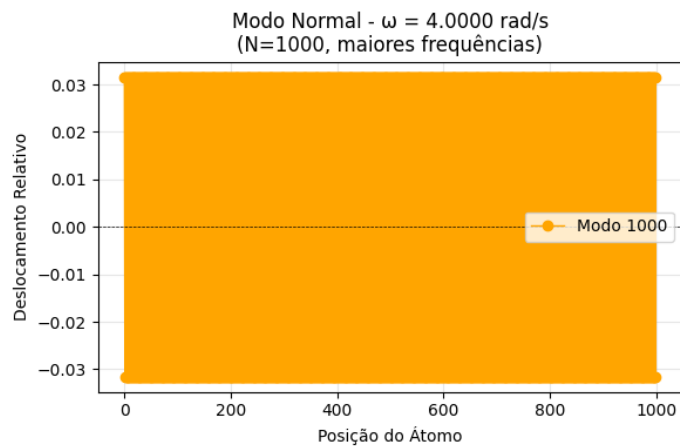


FIG. 34: Modo Normal 5 - Cadeia Homogênea (N=1000)

3. Cinco Menores Freqências - Cadeia com Defeito

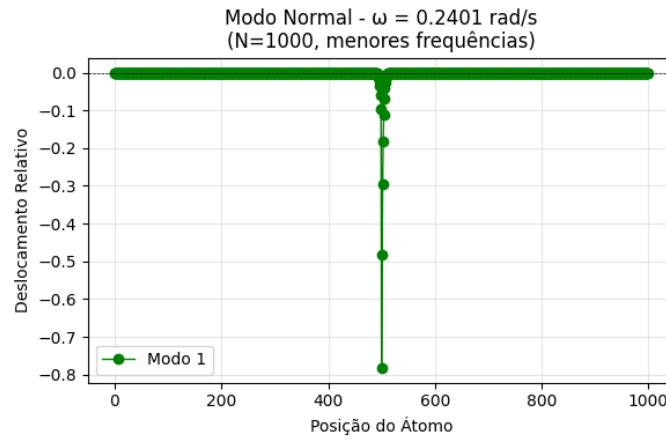


FIG. 35: Primeiro Modo Normal - Cadeia com Defeito (N=1000)

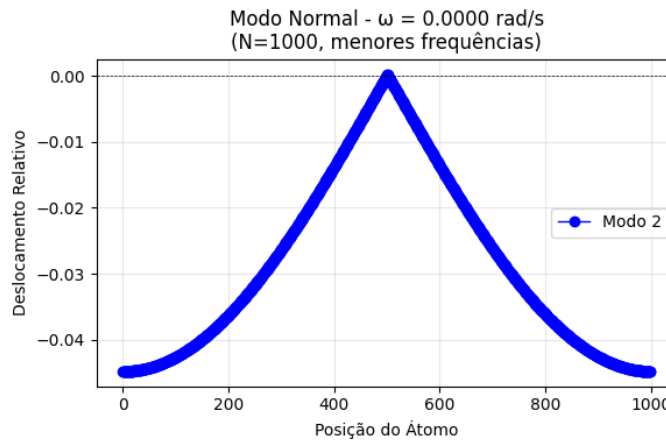


FIG. 36: Segundo Modo Normal - Cadeia com Defeito (N=1000)

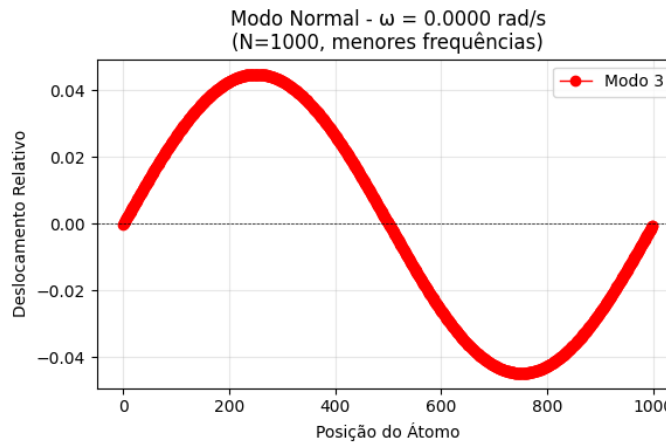


FIG. 37: Terceiro Modo Normal - Cadeia com Defeito (N=1000)

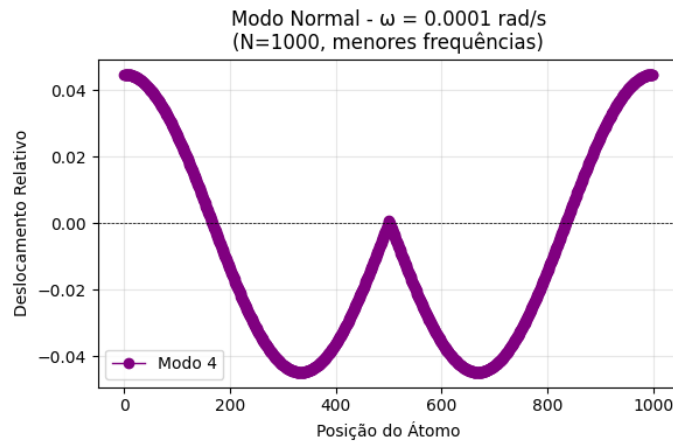


FIG. 38: Quarto Modo Normal - Cadeia com Defeito (N=1000)

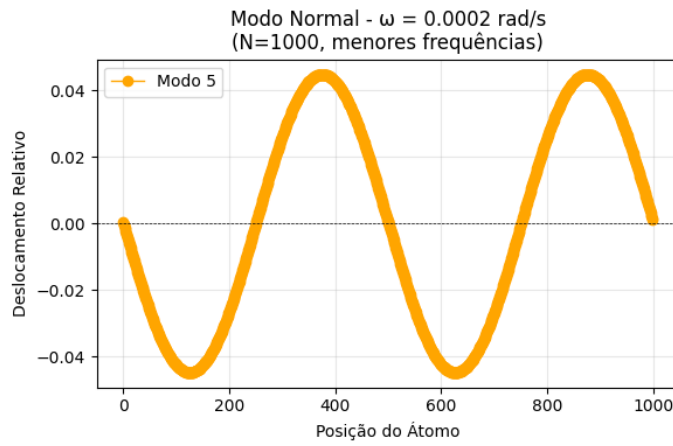


FIG. 39: Quinto Modo Normal - Cadeia com Defeito (N=1000)

4. Cinco Maiores Freqüências - Cadeia com Defeito

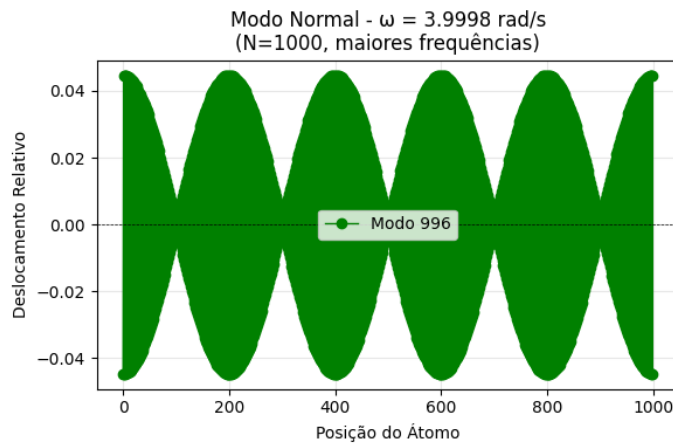
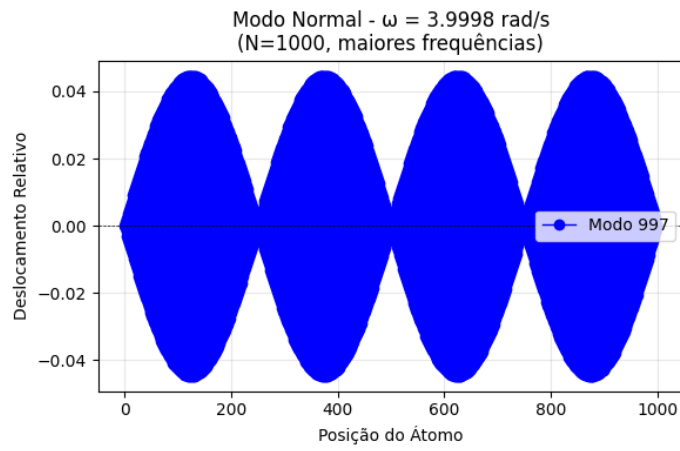
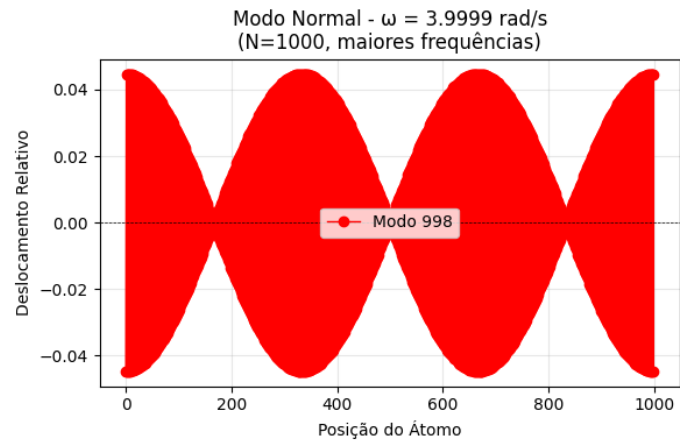
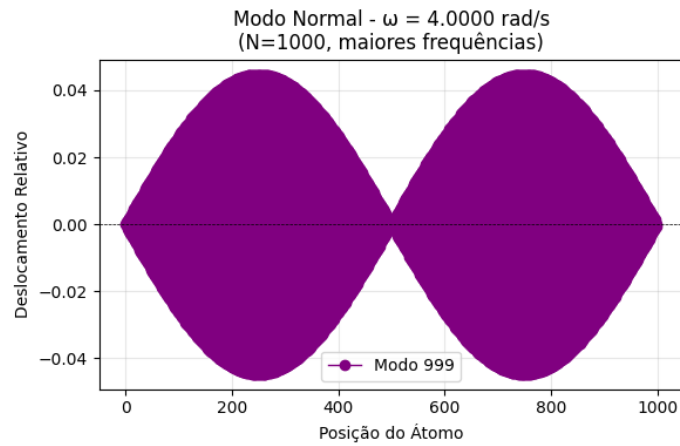


FIG. 40: Modo Normal 1 - Cadeia com Defeito (N=1000)

FIG. 41: Modo Normal 2 - Cadeia com Defeito ($N=1000$)FIG. 42: Modo Normal 3 - Cadeia com Defeito ($N=1000$)FIG. 43: Modo Normal 4 - Cadeia com Defeito ($N=1000$)

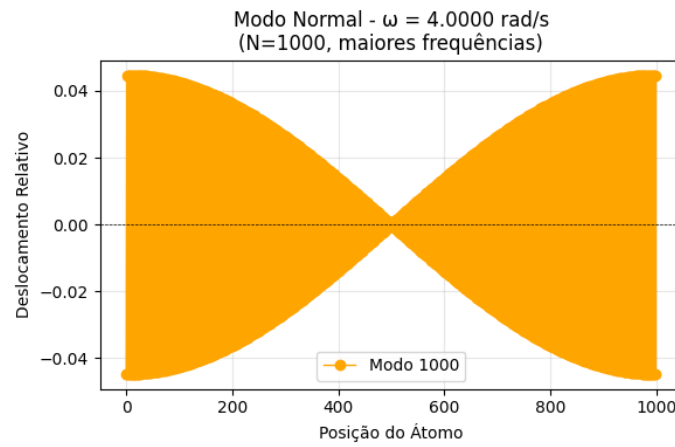


FIG. 44: Modo Normal 5 - Cadeia com Defeito (N=1000)

E. Histogramas - Densidades de Estado (N=10000)

Densidade de Estados - Cadeia Homogênea (N=10000)

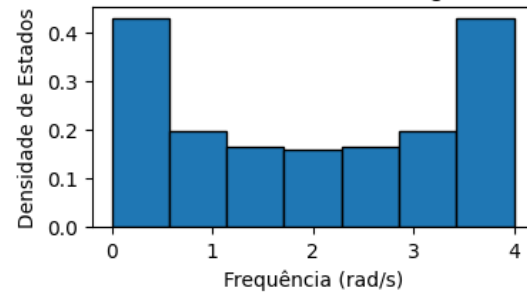


FIG. 45: Densidades de Estados - Cadeia Homogênea (N=10000)

Densidade de Estados - Cadeia com Defeito (N=10000)

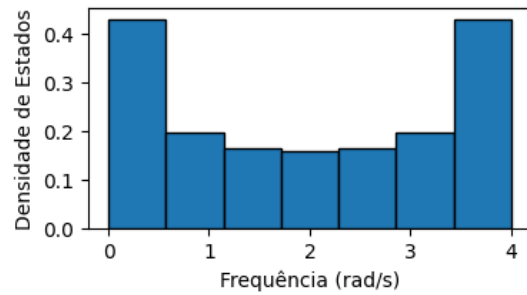


FIG. 46: Densidades de Estados - Cadeia com Defeito (N=10000)

F. Gráficos - Modos Normais (N=10000)

1. Cinco Menores Freqências - Cadeia Homônea

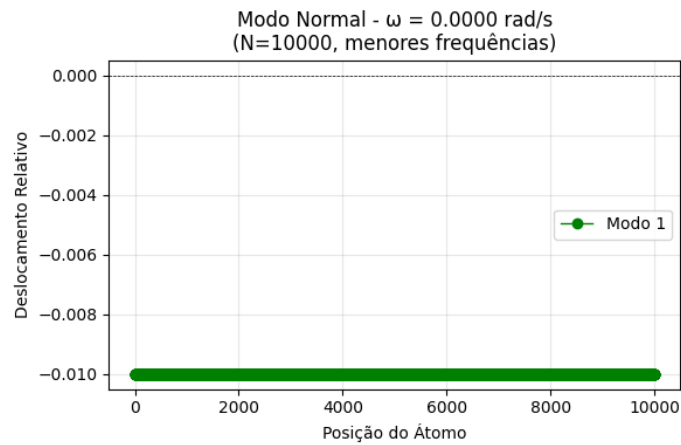


FIG. 47: Primeiro Modo Normal - Cadeia Homogênea (N=10000)

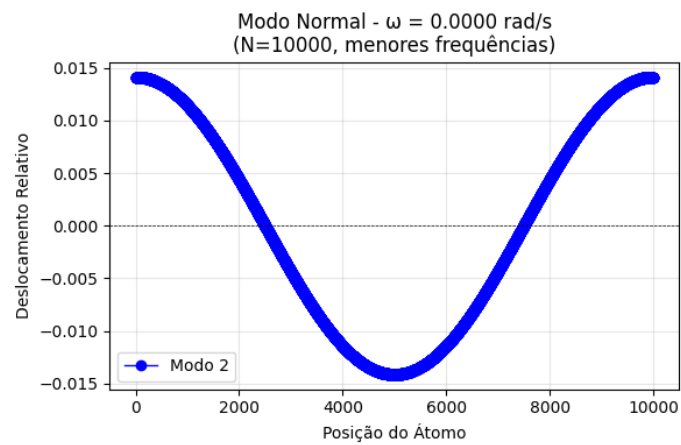


FIG. 48: Segundo Modo Normal - Cadeia Homogênea (N=10000)

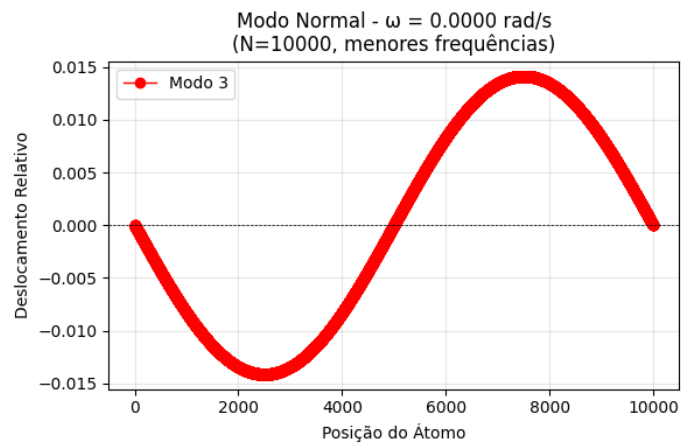


FIG. 49: Terceiro Modo Normal - Cadeia Homogênea (N=10000)

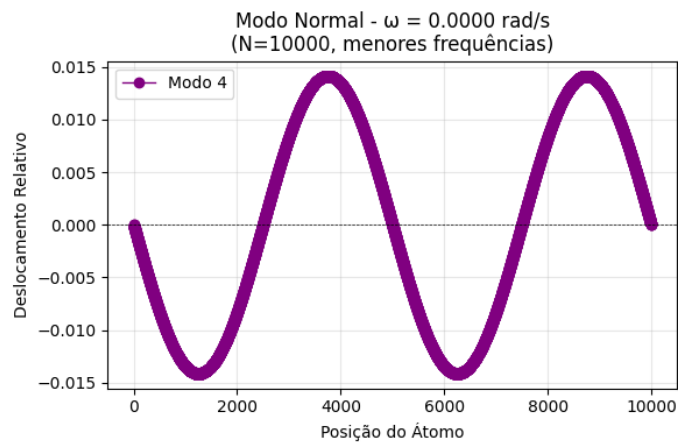


FIG. 50: Quarto Modo Normal - Cadeia Homogênea (N=10000)

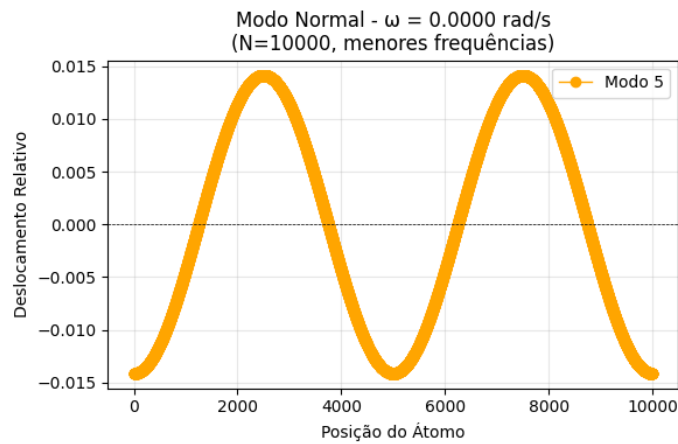


FIG. 51: Quinto Modo Normal - Cadeia Homogênea (N=10000)

2. Cinco Maiores Frequências - Cadeia Homogênea

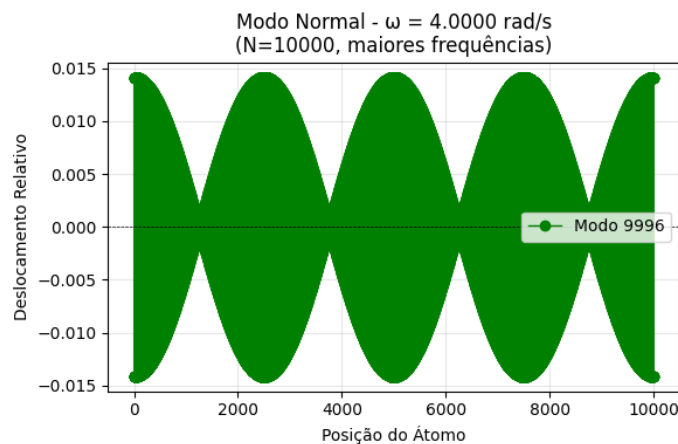


FIG. 52: Modo Normal 1 - Cadeia Homogênea (N=10000)

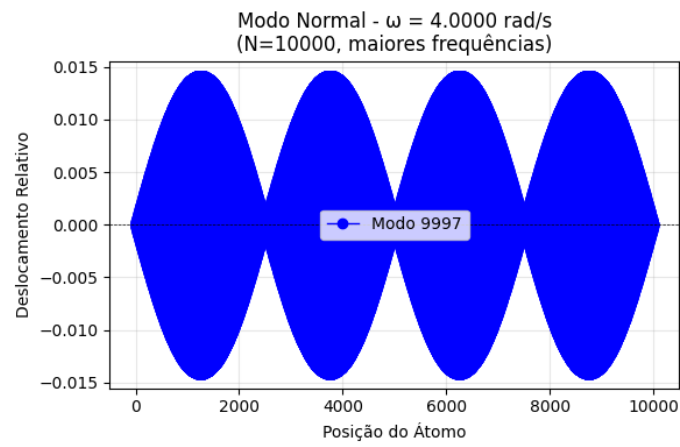


FIG. 53: Modo Normal 2 - Cadeia Homogênea (N=10000)

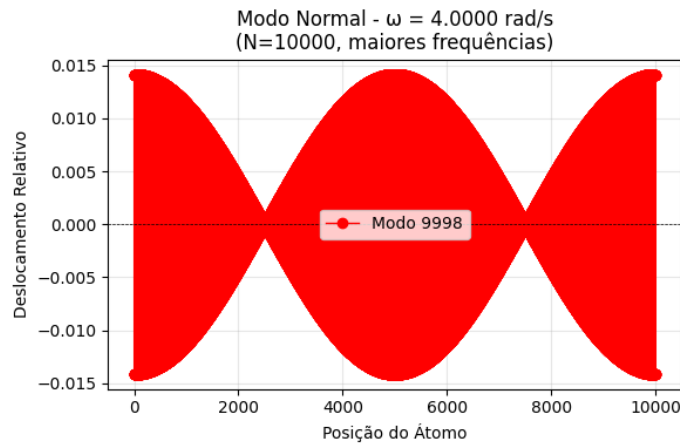


FIG. 54: Modo Normal 3 - Cadeia Homogênea (N=10000)

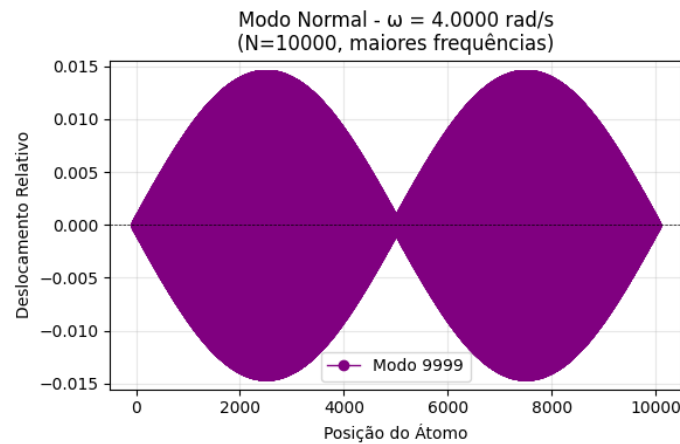


FIG. 55: Modo Normal 4 - Cadeia Homogênea (N=10000)

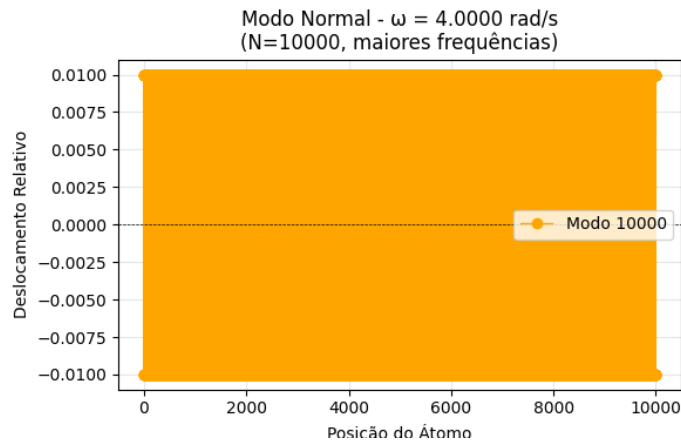


FIG. 56: Modo Normal 5 - Cadeia Homogênea (N=10000)

3. Cinco Menores Frequências - Cadeia com Defeito

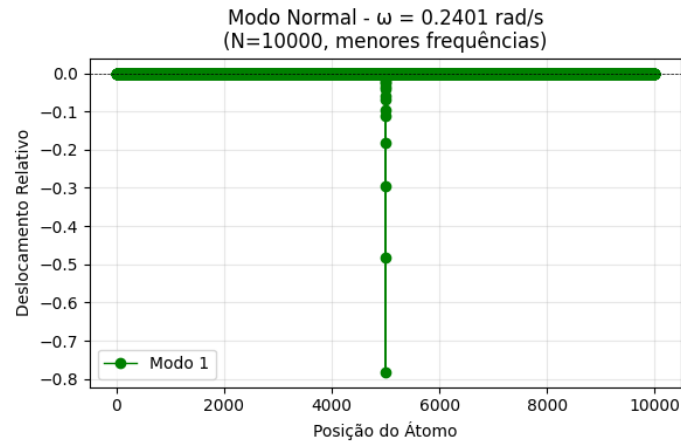


FIG. 57: Primeiro Modo Normal - Cadeia com Defeito (N=10000)

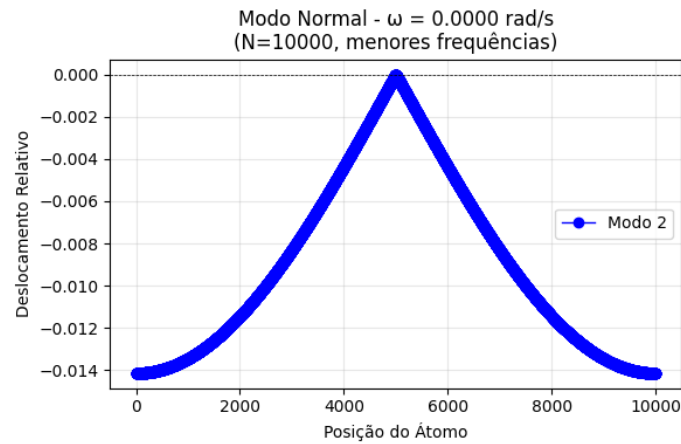


FIG. 58: Segundo Modo Normal - Cadeia com Defeito (N=10000)

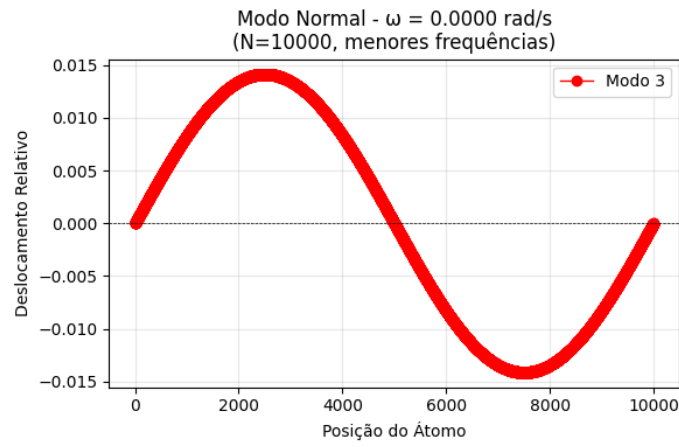


FIG. 59: Terceiro Modo Normal - Cadeia com Defeito (N=10000)

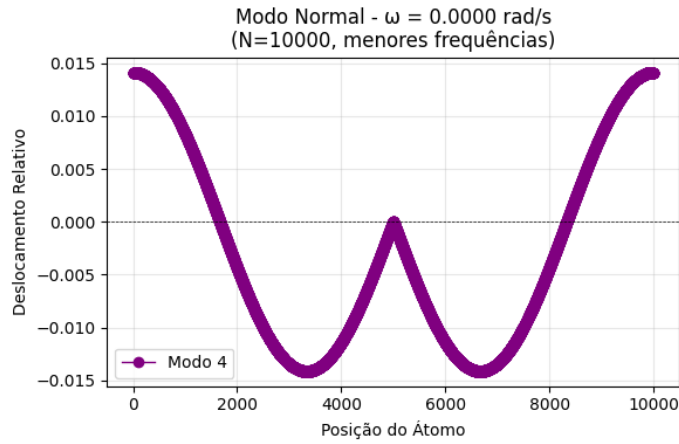


FIG. 60: Quarto Modo Normal - Cadeia com Defeito (N=10000)

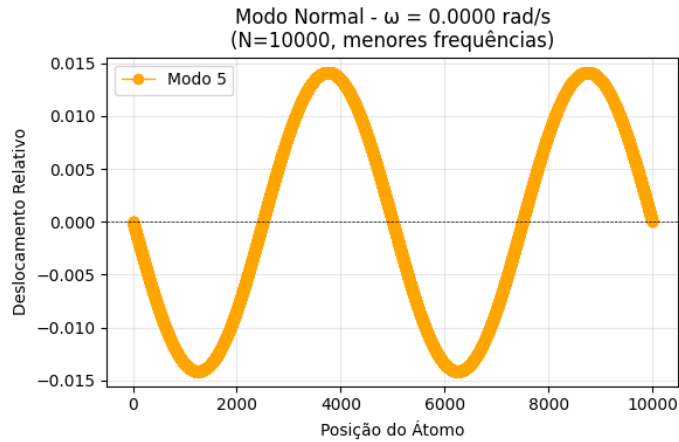


FIG. 61: Quinto Modo Normal - Cadeia com Defeito (N=10000)

4. Cinco Maiores Freqências - Cadeia com Defeito

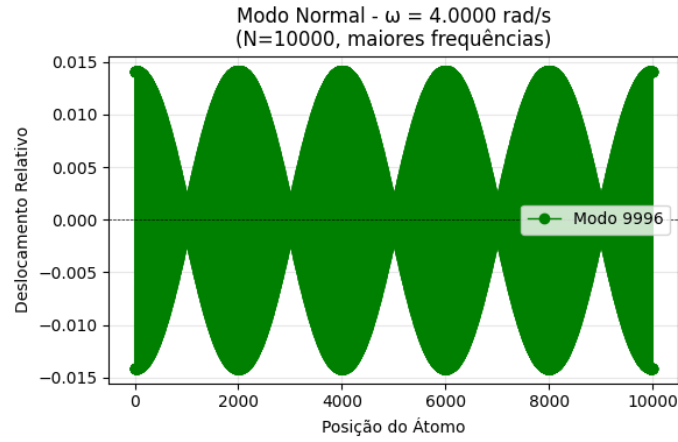


FIG. 62: Modo Normal 1 - Cadeia com Defeito (N=10000)

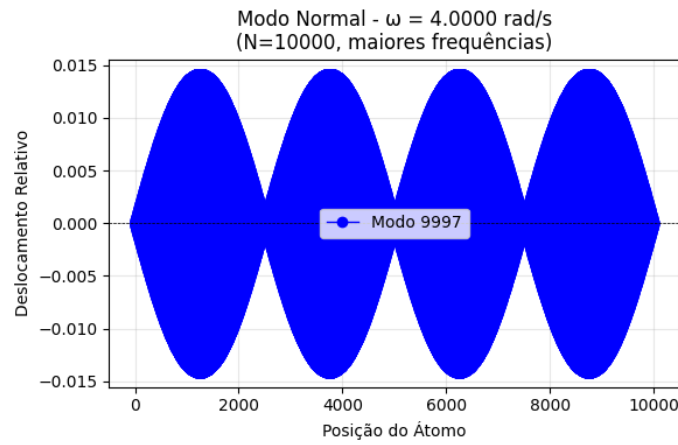


FIG. 63: Modo Normal 2 - Cadeia com Defeito (N=10000)

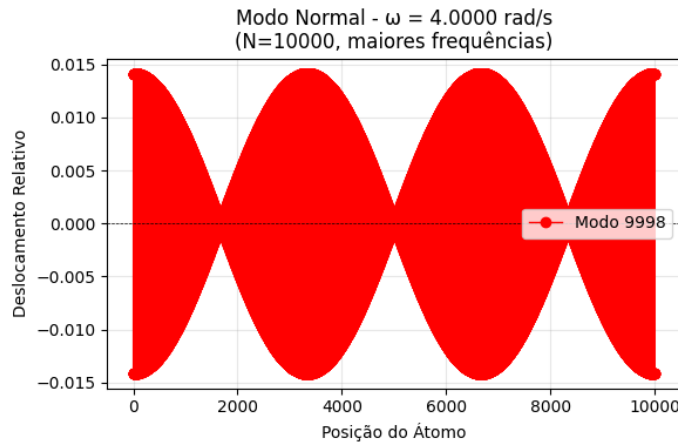


FIG. 64: Modo Normal 3 - Cadeia com Defeito (N=10000)

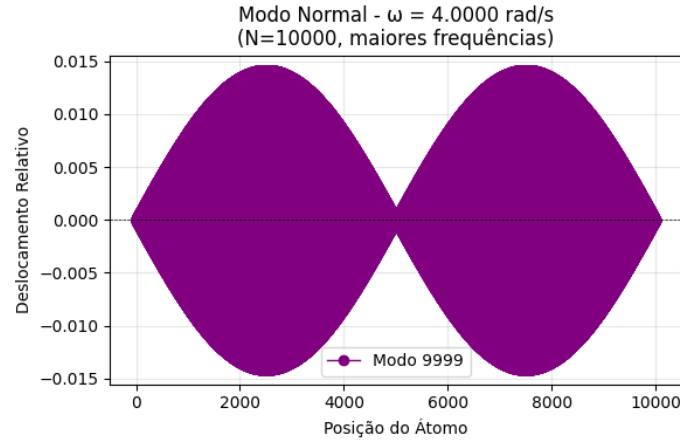


FIG. 65: Modo Normal 4 - Cadeia com Defeito (N=10000)

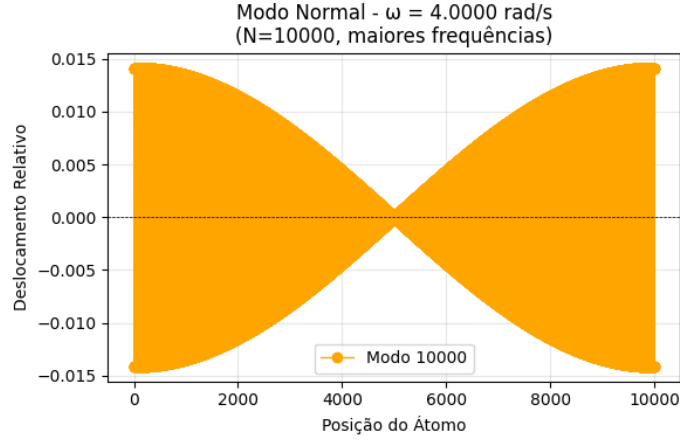


FIG. 66: Modo Normal 5 - Cadeia com Defeito (N=10000)

N	Sistema	Densidade de Estados	Modos de Baixa Frequência	Modos de Alta Frequência	Localização de Modos
100	Homogênea	Distribuição simétrica e suave, com poucos picos.	Deslocamentos amplos e regulares.	Oscilações rápidas e globalmente distribuídas.	Ausente
100	Com Defeito	Pico visível fora da banda principal.	Pouca alteração no padrão global.	Modos com picos localizados próximos ao defeito.	Moderada
1000	Homogênea	DoS mais contínua e densa.	Ondas suaves ao longo da cadeia.	Modos globalmente distribuídos.	Ausente
1000	Com Defeito	Efeitos do defeito mais nítidos na DoS.	Deslocamentos similares à homogênea.	Energia vibracional concentrada no defeito.	Evidente
10000	Homogênea	Distribuição quase contínua, sem distorções.	Modos acústicos bem definidos.	Alta densidade de modos.	Ausente
10000	Com Defeito	Pico isolado claro fora da banda principal.	Leves perturbações locais.	Modos fortemente localizados próximos ao defeito.	Clara

TABLE I: Comparação dos principais resultados obtidos para diferentes tamanhos de cadeia, com e sem defeito de massa.

IV. ANÁLISE E COMPARAÇÃO

A densidade de estados (DoS) evidencia como as frequências naturais se distribuem para diferentes tamanhos de cadeia. Em todas as simulações ($N = 100, 1000, 10000$), a introdução de um defeito de massa ($m_2 = 5Kg$) causa o aparecimento de picos isolados ou alterações no perfil da distribuição. Para cadeias homogêneas, a distribuição tende a ser mais simétrica e contínua, especialmente à medida que N aumenta. Já nas cadeias com defeito, surgem irregularidades — principalmente na região de baixas frequências — associadas à quebra da uniformidade estrutural.

O aumento de N também influencia a suavização da DoS. Para $N = 100$, a densidade ainda apresenta poucos picos definidos. Em $N = 10000$, a DoS se aproxima do comportamento do contínuo, permitindo visualizar com maior clareza os efeitos localizados do defeito, que se manifestam como picos fora da banda principal.

Nos modos normais da cadeia homogênea, os deslocamentos se distribuem de maneira regular e global, com simetria espacial típica de ondas estendidas. Os modos de menor frequência apresentam variações lentas ao longo da cadeia (modos acústicos), enquanto os de maior frequência exibem oscilações rápidas (modos ópticos).

Quando o defeito é introduzido, os padrões de deslocamento mudam substancialmente. Alguns modos — principalmente entre os de maior frequência — tornam-se localizados, concentrando as amplitudes de oscilação em torno do defeito. Essa localização é uma manifestação típica da quebra de simetria translacional: o defeito "aprisiona" parte da energia vibracional em sua vizinhança imediata.

A localização é mais evidente em modos normais de altas frequências, nas cadeias com defeito. Observa-se que, ao redor da posição da massa mais pesada, surgem modos com amplitudes significativamente maiores, enquanto o restante da cadeia permanece praticamente imóvel. Este fenômeno indica que tais modos são localizados e estão diretamente associados à presença do defeito.

Esse tipo de comportamento é importante, pois está relacionado a propriedades como transporte térmico e propagação de vibrações em sólidos reais. A massa defeituosa atua como uma barreira ou armadilha, impedindo que certos modos vibracionais se propaguem eficientemente ao longo do material.

V. CONCLUSÃO

A análise computacional das cadeias massa-mola permitiu compreender como o tamanho do sistema e a presença de um defeito afetam seu comportamento vibracional. Observou-se que a densidade de estados se torna mais contínua e suave com o aumento do número de massas, aproximando-se do limite contínuo. A introdução de um defeito de massa, por outro lado, provoca distorções pontuais nessa distribuição, com o aparecimento de picos fora da banda principal, indicando alterações significativas nas frequências naturais do sistema.

Nos modos normais, as cadeias homogêneas apresentaram deslocamentos regulares e distribuídos ao longo de toda a estrutura, caracterizando modos estendidos. Já nas cadeias com defeito, surgiram modos com energia vibracional concentrada nas proximidades da massa diferente, evidenciando o fenômeno de localização. Esse efeito foi mais marcante em modos de alta frequência e se tornou mais evidente à medida que o tamanho da cadeia aumentou.

Esses resultados demonstram como pequenas alterações estruturais podem influenciar profundamente as propriedades dinâmicas do sistema, destacando a utilidade de modelos discretos para investigar fenômenos vibracionais em materiais com imperfeições.