Departamento de Física

DISPERSÃO FONÔNICA EM SUPERCONDUTORES DA FAMÍLIA $CaAl_xGa_{1-x}Si$

Aluno: Gustavo Castro do Amaral
Orientador: Maria Matos

Introdução

A supercondutividade foi descoberta, por acaso, em 1911 e, desde então, tem sido amplamente estudada por conta de suas propriedades extremamente importantes, principalmente na década de 80, com o "Bum dos Supercondutores". Apesar disso, não há uma teoria que forneça base completa para o fenômeno. Contudo, para um certo tipo de supercondutores, a chamada teoria BCS fornece todo o embasamento teórico e é comprovada. Na teoria BCS o estado supercondutor se estabelece através da interação eletron-fonon, em estruturas denominadas Pares de Cooper. Fonons são devidos a vibrações da rede cristalina e têm propriedades equivalentes a partículas. Para comprender a supercondutividade num determinado material é importante investigar curvas de dispersão fonônica[1].

Objetivos

Pretende-se estudar a dispersão de fonons em sistemas cristalinos através de modelos uni- e bi-dimensionais. A curva de dispersão fornece as frequências de fonons, ou frequências de modos normais de vibração da rede. Em seguida, usando os resultados obtidos, serão construidos modelos realistas para os supercondutores de interesse.

Metodologia

Pensando na simplificação e modelagem do sistema, construímos um modelo clássico de massas e molas idênticas, ligadas entre si em uma dimensão, para simular as vibrações da rede atômica e, portanto, os fônons. O sistema construído é constituído de dois anteparos fixos conectados a molas que se conectam a massas. As massas, por sua vez, se conectam a outras massas através de molas, de forma que um sistema de N massas, tem N+1 molas. Forçosamente, as massas representam os átomos e as molas representam as interações entre átomos responsáveis pelos fônons.

Usando as Leis de Newton, escrevemos as equações de movimento de cada uma das massas. Notamos, durante esse processo, que variando arbitrariamente o número de massas, há três tipos de equação de movimento: o da primeira massa, que marca o início da cadeia, conectada à esquerda, por uma mola, ao anteparo fixo; o da N-ésima massa, conectada à direita por uma mola ao anteparo fixo, marcando o final da cadeia; e o da i-ésima mola, genérica, conectada à esquerda e à direita, por molas, às massas vizinhas. Através da discriminação desses três casos, foi possível uma maior generalização do problema.

As equações de movimento são equações diferenciais de segunda ordem que descrevem efeitos de forças de restauração na ausência de atrito, o que sugere soluções harmônicas. Primeiro, admitimos soluções simples da forma A cos (ωt), onde ω é a frequência de vibração. Obtém-se assim um sistema de equações que pode ser escrito como:

$$\frac{2\,k\,\mathrm{A}(1)}{m} - \frac{k\,\mathrm{A}(2)}{m} = \omega^2\,\mathrm{A}(1)$$

$$\frac{2\,k\,A(i)}{m} - \frac{k\,A(i+1)}{m} - \frac{k\,A(i-1)}{m} = \omega^2\,A(i)$$

$$\frac{2\,k\,A1(N)}{m} - \frac{k\,A(N-1)}{m} = \omega^2\,A(N)$$

Onde K é a constante de mola e M é a massa das partículas. Esse sistema de equações pode ser escrito na forma matricial. Quer-se determinar os autovalores ω_i que terão V(Ai) como autovetores, determinando-se assim os modos normais do sistema. Verificou-se que essa matriz possui uma propriedade muito interessante, chamada Tribanda, como se mostra a seguir:

$$\frac{k}{m}\begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & \text{"..."} & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & \text{"..."} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & \text{"..."} & 0 & 0 & 0 \\ \text{"..."} & \text{"..."} & \text{"..."} & \text{"..."} & \text{"..."} & \text{"..."} & \text{"..."} & \text{"..."} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \text{"..."} & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \text{"..."} & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \text{"..."} & -1 & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \text{"..."} & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} V(1) \\ V(2) \\ V(3) \\ \text{"..."} \\ V(N-3) \\ V(N-2) \\ V(N-1) \\ V(N) \end{bmatrix} = w^2 \begin{bmatrix} V(1) \\ V(2) \\ V(3) \\ \text{"..."} \\ V(N-3) \\ V(N-2) \\ V(N-1) \\ V(N) \end{bmatrix}$$

Os autovalores de matrizes tribandas, especificamente dessa forma, possuem uma propriedade extremamente importante que nos permite calcular seus autovalores através de uma expressão simples[2]:

$$\lambda(L) = \frac{2\,k\left(1 - \cos\left(\frac{\pi\,L}{N+1}\right)\right)}{m}$$

Isso mostra a distribuição de frequências normais da cadeia homogênea, configurando nesse sistema simples a existência de modos “soft” de vibração, um importante aspecto da supercondutividade. Pretende-se estudar modelos mais complexos, de massas e molas diferentes e em seguida considerar cadeias infinitas.

Conclusões

Obtivemos nesta etapa do trabalho um formalismo simples e geral para descrever as vibrações de um sistema massa-mola linear e homogêneo, finito, o qual permite calcular de modo simples os modos normais.

Referências

[1] Curso “ Supercondutividade”, Escola de Verão, Fevereiro de 2009, *Departamento de Física*, PUC-Rio, Jorge González.

[2] Professor Nicolau Saldanha, Departamento de Informática, PUC-Rio.