DISPERSÃO FONÔNICA EM SUPERCONDUTORES DA FAMÍLIA $CAAL_{1-X}GA_XSI$

Aluno: Gustavo Castro do Amaral
Orientadora: Maria Matos

Introdução

Supercondutores são materiais que, abaixo de certa temperatura, apresentam duas características físicas importantes: diamagnetismo perfeito; e resistividade nula. Muito se estudou sobre esses materiais formidáveis, principalmente na década de oitenta e começo da década de noventa, mas uma teoria sólida que explique esse comportamento em todos os seus aspectos ainda não existe. A teoria mais promissora, e que descreve perfeitamente o fenômeno de supercondutividade em um grupo restrito de supercondutores (Tipo 1) é a Teoria BCS. A base dessa teoria é a interação eletron-fônon dentro dos materiais. Fônons são excitações elementares associadas à energia de vibração da matéria (calor), que podem também apresentar propriedades de partículas; assim como os fótons são as partículas associadas à energia luminosa da matéria (luz). Tendo em vista que os fônons estão associados à vibração numa rede cristalina, o

modelo simplificado que leva em consideração essas interações, é o modelo massa-mola, onde os átomos são representados como massas pontuais e as interações interatômicas são representados como molas. A partir da construção desse modelo simplificado, pretende-se compreender mais sobre o funcionamento estrutural de um supercondutor.

Metodologia

O trabalho apresentado aqui é a continuidade do projeto apresentado em Agosto de 2009. Na ocasião, estudávamos as cadeias finitas e infinitas de massas e molas e fomos capazes de calcular os modos de vibração dessas cadeias. Como os modos importantes para a supercondutividade nos compostos intermetálicos de que trata este trabalho são modos tranversais, iniciamos o estudo de vibrações transversais em cadeias finitas. Esse estudo não foi trivial como o primeiro. Quando montamos as equações referentes à Força de Hooke descobrimos o aparecimento de um fator cúbico na equação diferencial, como veremos a seguir.

O modelo aqui utilizado é idêntico ao das vibrações longitudinais; inicialmente consideramos apenas uma massa ligada a duas paredes fixas através de molas idênticas. Uma força F_y é aplicada sobre a massa (lembrando que o eixo das massas é o eixo x e, portanto, a força F_y, responsável pelas vibrações transversais, é ortogonal a este eixo). Após ter sido perturbado o sistema tentará se restaurar através das molas. Decompondo as forças que as molas exercem em função do ângulo entre o eixo x e a mola inclinada notamos que as componentes em x se cancelarão e as componentes em y se somarão. Dessa forma:

$$F_{TOTAL} = \left(-F_1 sen(\theta)\right) + \left(-F_2 sen(\theta)\right) = -2k(d-a)sen(\theta)$$

A presença do termo (***d-a***) nessa expressão deve-se à suposição de que, na posição de equilíbrio, as molas estão relaxadas. Esse dado é relevante, influenciando diretamente o comportamento das soluções. O caso em que ***a*** é diferente do comprimento da mola será discutido mais adiante e está relacionado às interações inter-moleculares.

O termo ‘d’ diz respeito à distância total entre a parede e a massa depois da deformação da mola, ou seja, é equivalente à hipotenusa do triângulo retângulo formado. O termo ‘a’ é a distância entre parede e massa na situação de equilíbrio e, chamando de ‘y’ o deslocamento da massa Fy, temos o segundo cateto do triângulo. Podemos, agora, escrever ‘d’ em função de ‘a’ e ‘y’:

$$sen(\theta)=\frac{y}{d};d=\left(y^2+a^2\right)^{1/2}\Rightarrow F_{TOTAL}=-2k\left(\left(y^2+a^2\right)^{1/2}-a\right)\frac{y}{\left(y^2+a^2\right)^{1/2}}$$

Aplicamos, aqui, aproximações de primeira ordem:

$$F_{TOTAL}=-2yk\left(1-\left(1+\frac{y^2}{2a^2}\right)\right)=-\frac{y^3k}{a^2}$$

Nota-se nessa expressão a característica não linear da equação diferencial, levando às soluções não harmônicas, discutidas a seguir. A solução para a equação diferencial de segunda ordem cúbica que surge ao escrevermos a Equação de Newton, é uma função do tipo Jacobi Seno e Jacobi Cosseno.

Agora, imaginemos as interações atômicas na rede cristalina. Mesmo com o sistema em repouso, ou seja, sem nenhuma espécie de força externa atuando, está presente a força entre um átomo e outro, isto é, mesmo no repouso essas partículas estão submetidas a uma força que faz com que a distância entre átomos seja ligeiramente menor. Denotamos por ‘a’ a distância entre átomos completamente relaxados, ou no nosso caso, entre um átomo relaxado e uma parede fixa. Admitindo que essa parede interaja da mesma forma, denotemos por ℓ_0 a distância real entre partículas, de forma que esse “stress residual”, ou seja, essa força inerente da interação entre átomos, atue sobre o sistema. Incluindo essa nova parcela nas equações, encontramos resultados interessantes:

$$F_{TOTAL}=-2k\left((d-a)+(a-\ell_0)\right)sen(\theta)$$

Na nova equação, a parcela $(a-\ell_0)$ diz respeito exatamente à contribuição do stress da rede cristalina. Desenvolvemos essa equação de forma similar à primeira vez:

$$F_{TOTAL}=-2k\left(\left(y^2+a^2\right)^{1/2}-\ell_0\right)\frac{y}{\left(y^2+a^2\right)^{1/2}}=-2yk\left(1-\frac{\ell_0}{\left(y^2+a^2\right)^{1/2}}\right)$$

Aplicamos novamente aproximações de primeira ordem e chegamos à equação final, que pode ser dividida em dois termos onde aparece a variável y, um linear e outro cúbico:

$$F_{TOTAL}=-2yk\left(1-\ell_0\right)-\frac{y^3k\ell_0}{a^2}$$

Conclusões

Através do estudo das soluções das equações diferenciais de segunda ordem cúbicas, nos deparamos com termos não harmônicos. Contudo, o aparecimento do termo linear depois da consideração do “stress residual” se mostrou uma candidata à responsável pelas frequências de vibração que produzem fônons supercondutores.

1 - J. NAGAMATSU, N. NAKAGAWA, T. MURANAKA, Y. ZENITANI AND J. AKIMITSU, Nature, 2001, vol 410, 63.

2 - M. IMAI, K. NISHIDA, T. KIMURA AND H. ABE, Applied Physics Letters, 2002, vol. 80, 1019.

3 - T. TAMEGAI, K. UOZATO, S. KASAHARA, T. NAKAGAWA, AND M. TOKUNAGA, Physica C, 2005, vol 208, 426-431.