Dispersão fonônica em supercondutores da família $CaAl_{1-x}Ga_xSi$

Aluno: Gustavo Castro do Amaral
Orientadora: Maria Matos

Introdução

A pesquisa em supercondutividade de compostos intermetálicos cresceu nos últimos anos devido à descoberta de supercondutividade no composto MgB_2 com temperatura crítica de 39K[1]. Os supercondutores intermetálicos de Ca, Sr, Ba, Al, Ga, Si, dos quais fazem parte compostos da família **$CaAl_{1-x}Ga_xSi$**, apresentam interesse especial pois exibem um comportamento anômalo na temperatura crítica T_C em função da concentração das espécies, comportamento esse ainda não completamente compreendido[2,3]. Atualmente o valor máximo, $T_C \approx 7K$, encontra-se do composto intermediário CaAlSi. Para a pesquisa básica, um dos interesses é elucidar o fenômeno do ponto de vista microscópico. Os compostos são supercondutores BCS, sendo então nescessário compreender os mecanismos da interações elétron-fonon. São materiais de estrutura cristalina hexagonal baseada em planos atômicos de Ca (Sr ou Ba) intercalados por planos de Al, Ga, Si (Fig.1).

A fim de desenvolver o estudo da dispersão de fonons, $\omega(\mathbf{k})$, estudamos incialmente vibrações em cadeias lineares de átomos, visando obter subsídios para compreender as vibrações no sólido, com sua estrutura cristalina específica.

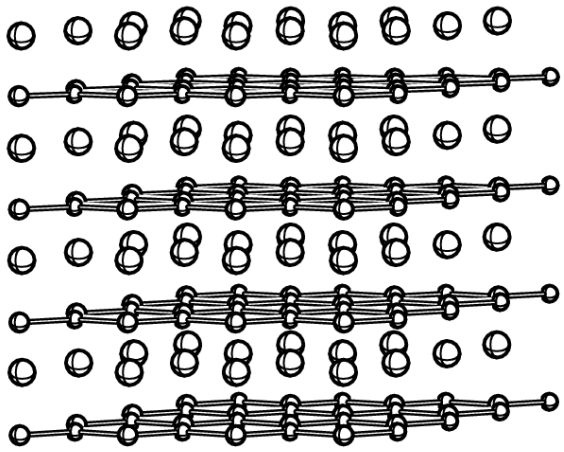

Fig.1 – Estrutura cristalina de CaAlSi (x=0)

Metodologia

Utilizou-se como modelo cristalino a cadeia linear finita de N massas idênticas ligadas por molas idênticas e como condição de contorno foram fixados os extremos em paredes rígidas para simular a interface sólido-vácuo (Fig.2). A interação entre átomos vizinhos foi descrita por um potencial harmônico, com constante de força k uniforme ao longo da cadeia. Foram calculadas as freqüências próprias para cadeias de diferentes tamanhos visando compreender a relação entre freqüência e parâmetros físicos tais como o número de partículas da cadeia, a massa m e a constante k. As freqüências próprias são autovalores de matrizes definidas a partir de um sistema de N equações lineares oriundas da aplicação das leis clássicas de movimento.

Fig.2 – Cadeia finita de N massas ligadas por molas presas a paredes rígidas

Resultados

Verificou-se que a matriz determinante do sistema do tipo é tri-banda. Os autovalores foram obtidos analíticamente, chegando-se a

$$\omega_\ell^{\ 2} = \frac{2k}{m}(1-\cos(\frac{\pi\ell}{N+1})) \qquad \ell = 1,....,N$$

Considerando um sistema clássico onde as massas vibram com freqüências próprias da ordem de 1 Hz, obtém-se $\sqrt{\frac{2k}{m}} \approx 1Hz$ donde

$$\omega_\ell = \sqrt{(1-\cos(\frac{\pi\ell}{N+1}))} \qquad \ell = 1,....,N$$

Para N = 20, 50, 80 e 100 as freqüências próprias ω_ℓ foram plotadas comparativamente em função de ℓ na Fig.3.

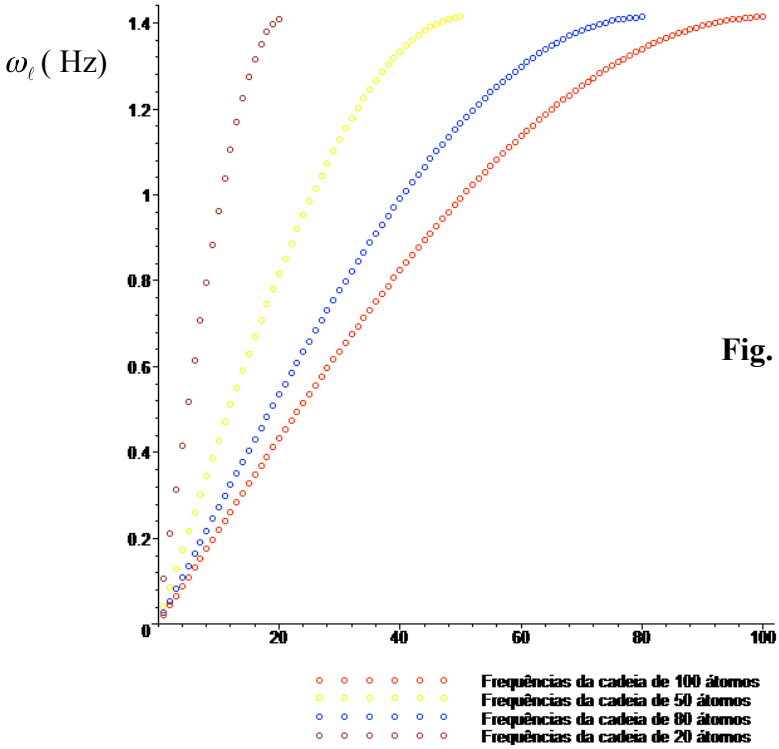

Fig. 3 – ω_ℓ como função de ℓ.

Vê-se da Fig.3 que as freqüências calculadas se agrupam no intervalo $0 \leq \omega_\ell \leq \sqrt{2}Hz$ para os parâmetros utilizados neste modelo. A densidade de pontos é homogênea, crescendo com N e tendendo para uma distribuição contínua quando N → ∞. Vê-se

também a formação de uma banda de largura $d = \sqrt{2}Hz$. Para valores quaisquer de m e k, obtém-se $d = 2\sqrt{\frac{k}{m}}$, crescente com a constante de força e decrescente com m. Fica assim claramente evidenciado o comportamento esperado das freqüências individuas com relação às variáveis m e k. Isto é, interações fortes levam a freqüências maiores, sendo as mesmas decrescentes com a massa atômica.

Conclusões

A importância deste estudo preliminar foi elucidar a relação entre freqüências de vibração de um conjunto interligado de partículas e os parâmetros físicos do sistema, mostrando o aparecimento de bandas como prenúncio das relações de dispersão no sólido. Pretende-se estudar em seguida cadeias alternadas, mais realistas, tendo em vista a composição química dos compostos intermetálicos, seguindo-se o estudo de cadeias infinitas com condições periódicas de contorno.

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.