

Simulação Gráfica em Computador do Comportamento de uma Cadeia Atômica Linear

(Computer graphic simulation of the linear atomic chain behaviour)

Luciano Terra Peixoto e Keydson Quaresma Gomes*

*Departamento de Física,
Universidade Federal do Espírito Santo
29060-900 Vitória, ES, Brasil*

Trabalho recebido em 4 de abril de 1997

No presente trabalho exploramos a possibilidade de uso da computação gráfica para simulação de um laboratório dedicado ao estudo do comportamento dinâmico da cadeia atômica linear. Preliminarmente desenvolvemos um programa para visualizar a construção, passo a passo, da expansão de Fourier de algumas funções. Trabalhamos então com a cadeia linear, buscando visualizar, primeiro dentro da aproximação harmônica, a excitação de modos normais, de ondas estacionárias e de pulsos gaussianos, e depois, extrapolando a aproximação harmônica, o comportamento da cadeia na presença de dois ou mais pulsos gaussianos, neste caso tentando observar o processo de colisão entre excitações localizadas necessário para explicar a condução do calor em sólidos dielétricos.

In this work we explore the possibility of using computer graphics to simulate a laboratory dedicated to the study the dynamical behavior of the linear chain of atoms. Preliminarily we developed a computer program to visualise a step to step construction of functions from their Fourier expansions. Then working with the linear chain, our aim was to visualise, first in the harmonic approximation, the excitation of normal modes, of standing waves and of gaussian pulses, and then, going beyond the harmonic approximation, the behavior of the chain in presence of two or more gaussian pulses, in this case trying to observe the colision process of localized excitations required to explain the heat conduction in dielectric solids.

I. Introdução

A computação gráfica está se tornando um importante instrumento de apoio ao ensino de Física, por permitir, com o recurso de animação de imagens, não só a visualização de fenômenos físicos, mas mesmo a simulação do comportamento dinâmico de sistemas, e dessa forma introduzir um substituto (vantajoso sob muitos aspectos) para o laboratório. É ao mesmo tempo instrutivo lidar com o problema da simulação, pois ele torna explícito a modelagem de sistemas e acaba sempre levantando a questão do desempenho do algoritmo utilizado.

O fenômeno estudado é o comportamento vibracional de uma cadeia atômica linear, tomada como

modelo unidimensional de um sólido. A simulação foi realizada com base na equação de Newton, considerada primeiramente dentro da aproximação harmônica - como se os átomos estivessem ligados por pequenas molas - para se ter a observação da resposta do sistema diante de condições iniciais e de contorno correspondentes a ativação de modos normais, de ondas estacionárias e de pacotes de onda que se propagam ao longo da cadeia. Depois consideramos o efeito não-harmônico da interação entre pacotes de ondas, eles vindo a constituir excitações localizadas necessárias para explicar a condução de calor em sólidos.

A cadeia linear é aqui representada por uma sequência horizontal de pequenos círculos na tela do computador, capazes de se movimentar verticalmente

*Estudante de Física, bolsita de Iniciação Científica (CNPq)

com a passagem de excitações transversais, ou horizontalmente com a passagem de excitações longitudinais. As condições iniciais determinam as posições iniciais dos círculos, mas a partir daí as novas posições são determinadas por solução numérica da equação de Newton.

Uma vez que a construção de um pacote de ondas se baseia na idéia do princípio da superposição, decidimos incluir no trabalho a visualização de como este princípio permite a construção gradativa da forma de uma função

a partir da soma dos termos consecutivos de sua expansão em série de Fourier. Em particular consideramos a função Gaussiana, procurando mostrar como esta função pode ser obtida pela superposição de ondas senoidais. O interesse particular no pacote Gaussiano está em que ele é a forma aqui escolhida para representar excitações localizadas no sistema. Utilizamos aqui a expressão usual da expansão de Fourier de uma função $f(x)$

$$f(x) = A_0(x) + \sum_{n=1}^{\infty} \left(A_n \cos \frac{2\pi n}{L} x + B_n \sin \frac{2\pi n}{L} x \right)$$

onde L é o período da função e os coeficientes são dados por

$$A_n = \frac{2}{L} \int_{-L/2}^{L/2} f(x) \cos \frac{2\pi n}{L} x dx \quad B_n = \frac{2}{L} \int_{-L/2}^{L/2} f(x) \sin \frac{2\pi n}{L} x dx$$

II. O algoritmo de simulação

O tratamento do problema consiste em resolver numericamente o par de equações diferenciais ordinárias de 1a. ordem

$$\frac{dv_p(t)}{dt} = \frac{k}{m} [y_{p+1}(t) + y_{p-1}(t) - 2y_p(t)]$$

$$\frac{dy_p(t)}{dt} = v_p(t)$$

onde $v_p(t)$ e $y_p(t)$ representam a velocidade e a posição instantâneas do p -ésimo de uma sequência de N átomos, k é a constante de mola e m a massa do átomo. A primeira delas é a equação de Newton, escrita para a situação em que cada átomo interage apenas com os dois vizinhos mais próximos (ASHCROFT, 1976), e a segunda é a equação de definição da velocidade.

Ao se discretizar este sistema de equações, tendo em vista sua resolução numérica, é importante a busca de algoritmos suficientemente rápidos, para que, ao se im-

primir toda a sequência de círculos na tela do computador em ciclos sucessivos do processamento, se tenha impressão de continuidade de movimento dos mesmos. Neste sentido é apropriada a escolha dos chamados *algoritmos explícitos*, para os quais a variável dependente (v_p ou y_p) só aparece no lado direito da expressão quando válida para um instante anterior. Tais métodos apresentam entretanto o problema da instabilidade, por causa da magnitude do erro numérico - da ordem do próprio incremento do tempo - a que estão sujeitos. Métodos implícitos, por outro lado, podem apresentar erro de segunda ordem no incremento do tempo, e são estáveis, mas tem a desvantagem da maior lentidão, porque um sistema de equações algébricas lineares tem que ser resolvida em cada ciclo de processamento (Butcher, 1994). Utilizamos aqui um algoritmo explícito, em que as velocidades e as posições são dadas em instantes de tempo alternados (Visscher, 1991), capaz de eliminar ambas as desvantagens. Tal método conduz às expressões

$$v_p(t + \delta/2) = v_p(t - \delta/2) + \omega_0^2 \cdot \delta [y_{p+1}(t) + y_{p-1}(t) - 2y_p(t)] \quad (1a)$$

$$y_p(t) = y_p(t - \delta) + \delta v_p(t - \delta/2) \quad (1b)$$

onde ω_0 é a frequência natural de oscilação, dada por $\omega_0 = \sqrt{(k/m)}$, e d é o incremento de tempo.

Em cada ciclo de execução, o programa faz exibir na tela do computador os vários círculos com os respectivos centros nas posições (x_p, y_p) , sendo y_p dado pela expressão acima e x_p dado por $x_p = p.a$, onde a é a separação entre os centros de círculos vizinhos. No Apêndice discutimos o critério de escolha do incremento de tempo adequado ao bom funcionamento do algoritmo.

A resposta do sistema é determinada pela escolha das condições iniciais e de contorno. Consideramos aqui a condição de contorno periódica, $y_{N+1} = y_1$, tal como se os átomos estivessem dispostos ao longo de uma circunferência. Isso permite que as excitações da cadeia, ao atingir uma de suas extremidades, reapareça na outra extremidade, e desde já impõe a escolha de condições iniciais com formas de onda de comprimento de onda igual a uma fração inteira do comprimento da cadeia. Trabalhamos com as seguintes condições iniciais:

$$y_p(-\delta) = A \exp(-((x_p - x_o + \nu\delta)/\gamma)^2)$$

$$v_p(-\delta/2) = -2.A\nu(x_p - x_o + \nu\delta/2)/g^2 \exp(-((x_p - x_o + \nu\delta/2)/\gamma)^2)$$

onde x_o é a posição do centro do pacote no instante inicial, ν e γ são sua velocidade de grupo e sua largura iniciais. Pacotes de onda gaussianos estreitos quando comparados com a largura da tela, como aqueles com que aqui trabalhamos, são gerados pela superposição de ondas com comprimentos de onda em geral não satisfazendo a condição de contorno periódica. Se na expansão de Fourier considerada acima tomássemos L igual ao comprimento da cadeia, satisfaríamos a

Modos normais.

$$y_p(-d) = A \text{sen}(qx_p - \omega_q \delta)$$

$$v_p(-d/2) = A\omega_q \cos(qx_p - \omega_q \delta/2)$$

onde ω_q deve satisfazer a relação de dispersão $\omega_q = 2\omega_o \text{sen}(qa/2)$ (ASHCROFT, 1981), sendo q o número de onda, dado por $q = 2\pi/\lambda$; λ é o comprimento de onda, que deve satisfazer à condição $\lambda = Na/n$ (n inteiro).

Ondas estacionárias.

$$y_p(-\delta) = A \cos(qx_p) \cdot \cos(\omega_q \delta)$$

$$v_p(-\delta/2) = -A\omega_q \cos(qx_p) \text{sen}(\omega_q \delta/2).$$

Também aqui o comprimento de onda deve ser igual a uma fração inteira do comprimento da cadeia.

Pacotes de onda.

condição de contorno, mas teríamos um único pulso ocupando todo o comprimento da cadeia. Por outro lado, é possível relaxar a condição de contorno e verificar qual é exatamente a consequência de sua presença sobre a evolução do sistema.

Colisão de dois pulsos. Dentro da aproximação harmônica, dois pulsos que se propagam em direções opostas, se cruzam sem sofrer modificação. De acordo com a Mecânica Quântica, para se observar efeitos de

colisão é necessário introduzir uma perturbação não-harmônica, que, nos dois termos de ordem mais baixa, modifica a lei de Hooke para

$$F = k(y + cy^2 + dy^3) = k(y) \cdot y$$

$$k(y) = k(1 + cy + dy^2) \quad (2)$$

onde $y = (y_{p+1} - y_p)$ ou $y = (y_{p-1} - y_p)$. O termo em y^2 sozinho produz o efeito de catástrofe, o que leva à inclusão do termo em y^3 . A introdução destes dois termos requer o necessário cuidado quanto à possível violação do argumento desenvolvido no Apêndice, pois em princípio eles alteram a matriz de evolução do sistema, lá introduzida. O argumento pode ser preservado com a escolha apropriada dos valores dos parâmetros c e d da expressão (2), tais que $k(y)$, quando utilizado para determinar a quantidade

$$b(y) = [\omega_0(y)\delta]^2 = (k(y)/m)\delta^2 \quad (3)$$

resulte em valores de $b(y)$ entre 0 e 1, como discutido no Apêndice.

III. Resultados e Conclusões

Os programas foram construídos com a linguagem C++ (Press et al, 1992). A figura 1 mostra o aspecto da tela do computador em dois estágios da execução do programa para a expansão de Fourier da função dente-de-serra. Este aspecto é típico também para a expansão da função onda-quadrada e da função gaussiana. Embora a figura não reflita toda a riqueza de detalhes da tela do computador, verifica-se a convergência para a função desejada e pode-se considerar que o resultado só não é melhor devido à limitação na precisão de cálculo, de tal forma que a propagação de erros acaba se refletindo na forma um pouco difusa da distribuição de pontos ao longo da linha que mostra a forma final da função.

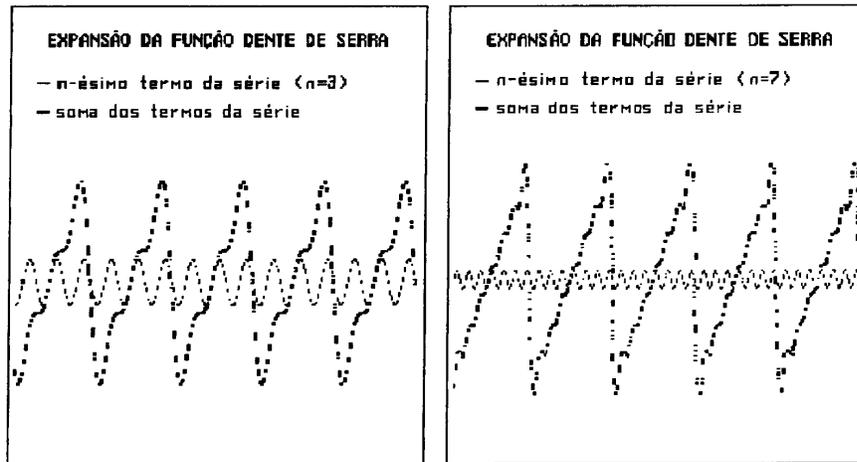


Figure 1. Aspecto da tela do computador em dois estágios do processamento do programa para a expansão de Fourier da função dente-de-serra.

A Figura 2 mostra o aspecto da tela em um instante durante a execução do programa para simulação dos modos normais, no caso o modo normal com comprimento de onda igual a $1/5$ do comprimento da cadeia. Podemos dizer que aqui os objetivos do laboratório são atingidos sem restrições, sendo possível simular modos normais e ondas estacionária de diferentes comprimentos de onda, verificar a invariância do comportamento da rede quando o vetor de onda do modo normal é modificado para outro equivalente fora da primeira zona de Brillouin (ASHCROFT, 1976), e observar a propagação

de pulsos gaussianos. No caso da propagação de pulsos estreitos, o sistema responde com uma forma peculiar de dispersão: aparecem pulsos secundários acompanhando o pulso principal, com intensidade e número que crescem gradativamente. Aí, a diferença significativa que se observa entre a situação com a condição de contorno periódica e a situação sem ela é que, no segundo caso, o pulso sofre reflexão ao atingir uma extremidade da cadeia, ao passo que no primeiro caso ele reaparece na outra extremidade da cadeia. Quando aumentamos a largura do pulso, o efeito de formação dos pulsos se-

cundários diminui, o que se pode então atribuir ao fato de que ele fica menos sensível ao caráter discreto da distribuição de massa. Ou seja, a formação dos pulsos secundários tem a ver com a distribuição discreta de massa e não com a condição de contorno.

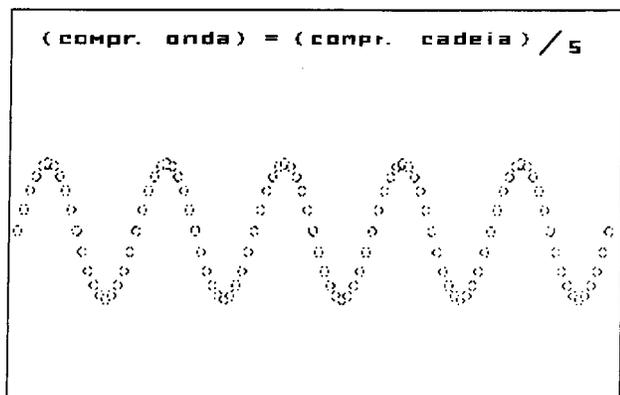


Figure 2. Aspecto do o modo normal correspondente a $N=70$ e $\lambda = 14a$.

Na tentativa de caracterizar a colisão entre dois pulsos, verificamos que dentro da aproximação harmônica não há alteração da forma quando eles se cruzam, o que, no caso, caracteriza a ausência de interação. Quando introduzimos os termos não-harmônicos na expressão da lei de Hooke, também não há alteração visível na forma dos pulsos, mas a cadeia como um todo passa a se deslocar transversalmente. O deslocamento ocorre na direção de y , positiva ou negativa, em que a curva de $V(y)$ passa a exibir o mínimo secundário pela presença dos termos não-harmônicos (na direção contrária, os termos não harmônicos fazem $V(y)$ crescer). A direção pode ser controlada trocando-se o sinal dos termos não-harmônicos, e de fato, ela fica invertida quando invertemos os sinais dos termos de segunda e terceira ordem na expressão (2). Na Figura 3 indicamos a situação em que $V(y)$ exibe o mínimo secundário na direção positiva de y . Ocorre neste caso um favorecimento ao deslocamento da posição média de cada átomo na direção positiva de y , que se reflete produzindo o movimento da cadeia como um todo.

Este movimento, no caso de pulsos longitudinais, se dá ao longo do comprimento da cadeia. E ele, como verificamos tanto para pulsos transversais como para longitudinais, é tão mais rápido quanto maior o número de pulsos iniciais presentes. Este resultado, em termos de uma cadeia real, corresponde a ela possuir uma temperatura mais elevada. Assim, de acordo com o

nosso modelo clássico, um sólido não-harmônico livre no espaço é incapaz de sofrer dilatação térmica, mas simplesmente experimenta um movimento contínuo de translação, tanto mais rápido quanto mais elevada a temperatura. Fixando-se o átomo de uma das extremidades, de modo a impedir sua translação mas não sua oscilação, o resultado, em termos da presença de pulsos longitudinais, é um aumento do comprimento médio da cadeia, aumento tanto maior (e com menor flutuação de valor) quanto maior o número de pulsos presentes.

Neste ponto, vale a pena acrescentar que imaginávamos tirar proveito do poço de potencial secundário que aparece na curva de $V(y)$ quando escolhemos apropriadamente os coeficientes dos termos não-harmônicos. Novamente a Figura 3 serve de ilustração. Com a superposição de dois ou mais pulsos, um átomo, que de outro modo estaria oscilando dentro do poço principal, poderia cair no poço secundário e aí, desde que oscilasse com amplitude inferior á largura do poço, permanecer. Como y representa a separação entre átomos vizinhos, tal efeito, considerados pulsos longitudinais, implicaria no aumento do comprimento da rede. A explicação da falha do argumento é dada na mesma Figura 3. No gráfico da esquerda, a condição $0 < b(y) < 1$ (ver eq. (3)) é satisfeita, mas mostramos que para ocorrer a transição da posição de equilíbrio para o poço secundário os valores de y devem superior 1500 unidades. No gráfico da direita mostramos, dentro da mesma escala de unidades, os valores de y atingidos na nossa simulação: para eles, no entanto, não se cumpre a condição de estabilidade. O gráfico da esquerda mostra ainda a possibilidade de efeito de catástrofe quando tomamos $d = 0$ (situação indicada pela linha tracejada).

Contudo, no nosso tratamento já encontramos, no efeito de dispersão caracterizado acima, a explicação do processo de condução de calor. Uma vez que a distribuição de massa em um sólido real é discreta, se de início concentrarmos vários pulsos em uma região do sistema, com o tempo teremos um maior número de pulsos com menor amplitude distribuídos pela cadeia como um todo, correspondendo à situação em que, injetado calor em um ponto do sólido, o aumento local de temperatura acaba se expandindo para o resto da barra, até que seja atingida a temperatura de equilíbrio.

Uma versão experimental do programa para simulação pode ser solicitado pelo endereço eletrônico lu-

ciano@cce.ufes.br.

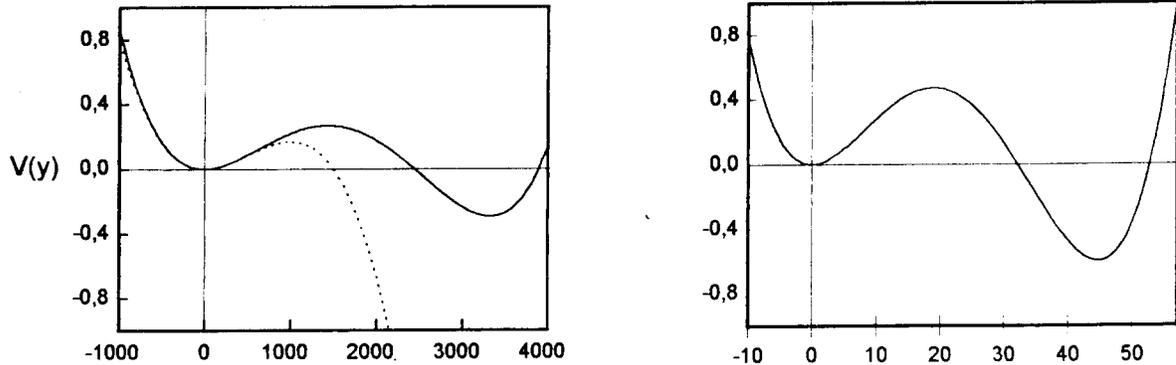


Figure 3. Gráfico de $V(y) = y^2 - |c|y^3/3 + |d|y^4/4$; para os valores de y á esquerda a condição $0 < b(y) < 1$ é satisfeita (a linha tracejada vale para $d = 0$); á direita mostramos o intervalo de valores de y alcançados na nossa simulação, mas com a condição de estabilidade violada.

Apêndice

O algoritmo para o presente tipo de cálculo pode também ser unitário, no sentido de que, escrevendo-se a equação de evolução do sistema na forma (aqui, para simplificar, escrita para uma cadeia com 4 átomos),

$$\begin{bmatrix} v_1(t+\delta/2) \\ v_2(t+\delta/2) \\ v_3(t+\delta/2) \\ v_4(t+\delta/2) \\ y_1(t) \\ y_2(t) \\ y_3(t) \\ y_4(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1-2b & b & 0 & b & -2b & b & 0 & b \\ b & 1-2b & b & 0 & b & -2b & b & 0 \\ 0 & b & 1-2b & b & 0 & b & -2b & b \\ b & 0 & b & 1-2b & b & 0 & b & -2b \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1(t-\delta/2) \\ v_2(t-\delta/2) \\ v_3(t-\delta/2) \\ v_4(t-\delta/2) \\ y_1(t-\delta) \\ y_2(t-\delta) \\ y_3(t-\delta) \\ y_4(t-\delta) \end{bmatrix}$$

se acontecer da matriz de transformação possuir todos autovalores com módulo igual a 1. Utilizamos o programa Mathematica e constatamos que tal acontece se o parâmetro $b = (\omega_o d)^2$ tiver valores entre 0 e 1, independentemente da ordem da matriz. A propriedade unitária garante que a soma dos quadrados dos elementos da matriz coluna jamais excederá o valor inicial, e ter-se-á desta forma a desejada estabilidade do sistema. Notar que, dado o valor de b , a escolha de ω_o ou d é arbitrária, de modo que a rapidez de oscilação do sistema é determinada pela escolha do próprio b : quanto mais alto for este valor, mais rápida será a oscilação.

Referências Bibliográficas

- N. W. Ashcroft e N. D. Mermin. *Solid State Physics*. Philadelphia, Holt-Saunders, 1976.
- J. C. Butcher. *Computers in Physics* **8**(4): 411-15, 1994.
- B. P. Flannery, W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling,. *Numerical Recipes in C: the Art of Scientific Computing*. Cambridge, Cambridge University Press, 1992.
- P. B. Visscher. *Computers in Physics* nov/dec 1991: 596-98.