

# Métodos Computacionales en Nanomateriales

Profesor: Emmanuel de la Cruz Piña

Contacto: emmanuel.delacruz@uabc.edu.mx

21 de marzo del 2018

## Práctica 4

En esta práctica se empleará el método Runge-Kutta y el método de Diferencias Finitas para la resolución del oscilador armónico simple (resorte) y, posteriormente, extender estos métodos para analizar propiedades de fonones en estructuras cristalinas.

*Palabras clave: Fonones, Resorte, Runge\_Kutta, Diferencias Finitas*

### Introducción

Se entiende por fonon como la pseudo-partícula, energía asociada a la vibración de una estructura cristalina. Estas pseudo-partículas permiten la transmisión de momento a lo largo de la estructura cristalina. El estudio de los fonones permite determinar propiedades térmica y eléctrica, tales como la conductividad eléctrica y térmica características de cada material

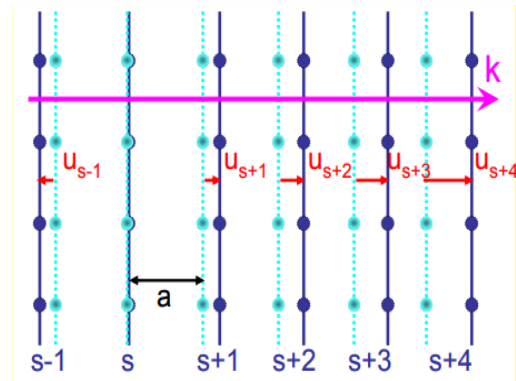


Figura 1. Vibraciones en una estructura Cristalina

Una primera aproximación (con buenos resultados) es suponer que la fuerza que se genera por las vibraciones es lineal al desplazamiento de los átomos, es decir, suponer que los átomos de la estructura transmiten el momento de la vibración por resortes.

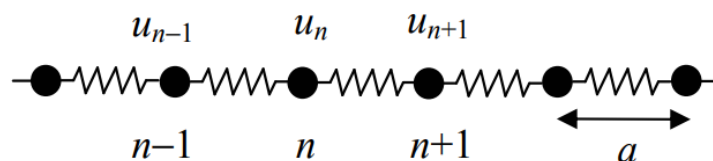
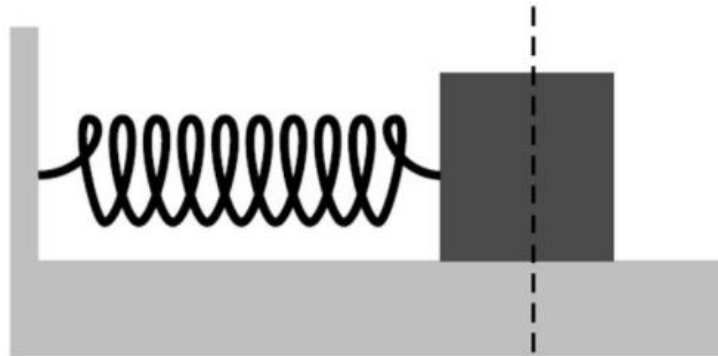


Figura 2. Aproximación por de fonones por osciladores armónicos

Debido a esta aproximación es necesario estudiar y resolver la dinamica del oscilador armónico mas simple, una masa con resorte, y extender este estudio al de los fonones.



*Figura 2. Masa sometida a la fuerza de un resorte*

La dinámica de este sistema está descrito por

$$F(x) = m\ddot{x} = -k(x - L)$$

con  $L$  la distancia de equilibrio del resorte y  $k$  la constante de este.

### **Actividad I:**

- Por el método de Runge-Kutta y Diferencias Finitas resolver la dinámica ( $x(t)$ ) de la masa bajo la fuerza del resorte para  $m=0.5$ ,  $k=0.1$  N/mm y  $L= 1$ m.
- Obtener el número de oscilaciones completas que se generan después de 5 segundos y la posición final de la masa, así como el periodo de las oscilaciones por ambos métodos.
- Obtener el diagrama del espacio fase del resorte en estos 5 segundo.

La energía que es transmitida por fonones es disipada o absorbida debido a deformaciones de la estructura cristalina. Este proceso de disipación se visualiza por oscilaciones clásicas en un medio dispositivo, es decir por el oscilador armónico amortiguado, el cual tiene la siguiente expresión

$$\ddot{x} + 2\gamma\dot{x} + w^2x = 0$$

con  $w$  la frecuencia del oscilador armónico

#### **Actividad II:**

- Obtén la expresión iterativa de correspondiente la ecuación del oscilador armónico amortiguado por el método de diferencias finitas.
- Obtén la gráfica del oscilador armónico amortiguado centrado con el punto de estabilidad en 0 ( $t$  vs  $x$ ) junto con el del oscilador armónico para  $k=0.4$  kg/seg<sup>2</sup>,  $m=0.1$ kg,  $w=2.0$  1/seg,  $x_0=0.5$  m,  $\gamma=0.14$
- Deduce el tiempo que tomará el oscilador amortiguado en reducir su amplitud a la mitad de la amplitud inicial.
- Obtén la frecuencia de oscilación y comparala con la frecuencia del oscilador armónico original.