

078

O MODELO DE FRENKEL E KONTOROVA. *Júlio R. Schoffen, Artur O. Lopes* (Depto. de Mat. Pura e Aplicada, Inst. de Matemática, UFRGS).

O modelo de Frenkel e Kontorova descreve o comportamento de uma cadeia infinita de átomos, sendo que apenas a interação de cada um deles com seus vizinhos mais próximos é considerada. A energia potencial de interação é igual à de um oscilador harmônico. Além disso, existem duas outras energias potenciais envolvidas: uma é devida a condições externas, e seu gráfico é uma senóide; a outra é uma energia química. Quando não há energia potencial senoidal, na configuração de mínima energia (que é a que nos interessa) cada átomo está a uma distância fixa do seguinte. Na presença daquela energia, temos que definir uma distância atômica média. O gráfico desta distância versus o coeficiente da energia química varia quando a amplitude da senóide cresce, tornando-se uma "escadaria do diabo" (uma escadaria do diabo é uma figura com infinitos degraus tal que a soma dos comprimentos destes é finita). Quando a amplitude é menor que um certo valor crítico, a escadaria é incompleta. Há uma transição quando ela ultrapassa esse valor, e a escadaria torna-se completa. A prova da existência de uma escadaria do diabo completa pode ser feita rigorosamente se substituirmos a energia senoidal por uma parabólica (mas também periódica). A condição de a energia ser mínima leva à definição de um operador de Schrödinger com diferenças finitas. A próxima etapa do trabalho consiste em procurar ligações entre o problema estudado e a teoria quântica. (CNPq).