Mecânica Analítica

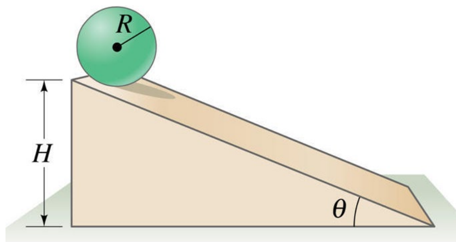
2020-2021

Série 5

Responsáveis: Hugo Terças, Pedro Cosme

Nesta série, ilustramos alguns aspectos da dinâmica de corpo rígido e iniciamos o estudo das pequenas oscilações

⋆ **Problema 1. Desliza ou não desliza?** Considere um disco de raio R que desce um plano inclinado de ângulo θ. Considere que o disco parte, do repouso e sem rotação, de uma altura inicial H, e que o coeficiente de atrito entre as superfícies é μ.



a) Obtenha o Lagrangeano do sistema considerando que existe deslizamento.

Seja x o deslocamento medido em relação ao topo da rampa. Como $z = H - x\sin\theta$, temos

$$L(x, \dot{x}, \varphi, \dot{\varphi}) = \frac{1}{2}M\dot{x}^2 + \frac{1}{2}I\dot{\varphi}^2 + Mgx\sin\theta,$$

onde $I = (1/2)MR^2$.

b) Repita o procedimento considerando a condição de não-deslizamento e obtenha o valor da aceleração do disco.

Neste caso, temos de utilizar condição de não deslizamento, $\dot{x} = R\dot{\varphi}$, que corresponde ao constrangimento $f(x, \varphi) = x - R\varphi$.

$$L(x, \dot{x}) = \frac{3}{4}M\dot{x}^2 + Mgx\sin\theta.$$

Pela equação de Euler-Lagrange

$$\ddot{x} = a_{\mathrm{CM}} = \frac{2}{3}g\sin\theta.$$

c) Através do metódo dos multiplicadores de Lagrange, determine o ângulo de crítico θ_c a partir do qual o disco desliza.

Para utilizar o método dos multiplicadores de Lagrange, vamos considerar que x e φ são independentes. Usamos, para isso, o Lagrangeano do ponto a)

$$L^\lambda(x, \dot{x}, \varphi, \dot{\varphi}) = \frac{1}{2}M\dot{x}^2 + \frac{1}{2}I\dot{\varphi}^2 + Mgx\sin\theta + \lambda f(x, \varphi).$$

As equações do movimento são

$$\begin{cases} M\ddot{x} - Mg\sin\theta = \lambda \\ \\ I\ddot{\varphi} = -\lambda R. \end{cases}$$

Aplicando a restrição, tiramos imediatamente da primeira equação que $\ddot{\varphi} = \lambda/(MR) + (g/R)\sin\theta$. Inserindo na segunda

$$\lambda = -\frac{1}{3}Mg\sin\theta.$$

A condição de não delizamento ocorre quando $|\lambda| = \lambda_{\max} = \mu Mg\cos\theta$, de onde se conclui

$$\tan\theta_c = 3\mu.$$

$\star\star$ **Problema 2. Equações de Euler.** Considere um corpo rígido genérico, de momentos de inércia I_1, I_2 e I_3 em relação aos eixos principais num determinado referencial de inércia.

a) Partindo da relação de transformação entre o referencial de inércia o o referencial do corpo rígido, mostre que as equações de Euler se escrevem

$$\begin{aligned} N_1 &= I_1\dot{\omega}_1 - (I_2 - I_3)\omega_2\omega_3, \\ N_2 &= I_2\dot{\omega}_2 - (I_3 - I_1)\omega_1\omega_3, \\ N_3 &= I_3\dot{\omega}_3 - (I_1 - I_2)\omega_1\omega_2. \end{aligned}$$

Da equação de transformação dos referenciais, temos

$$\left(\frac{d\mathbf{L}}{dt}\right)_{\text{inercia}} = \left(\frac{d\mathbf{L}}{dt}\right)_{\text{corpo}} + \omega \times \mathbf{L},$$

e usando a definição $L_{i,\text{corpo}} = I_{ij}\omega_j \equiv I_i\omega_i$ (no referencial do corpo podemos sempre definir um eixo principal!) e $\dot{L}_{i,\text{inercia}} = N_i$

$$\begin{aligned} N_i &= \dot{L}_{i,\text{corpo}} + \epsilon_{ijk}\omega_j L_k, \\ N_i &= I_i\dot{\omega}_i + \epsilon_{ijk}\omega_j I_k\omega_k. \end{aligned}$$

Por exemplo, para $i = 1$, temos (soma em j e k)

$$N_1 = I_1\omega_1 + \underbrace{\epsilon_{123}}_{=1}\omega_2 I_3\omega_3 + \underbrace{\epsilon_{132}}_{=-1}\omega_3 I_2\omega_2 = I_1\omega_1 - (I_2 - I_3)\omega_2\omega_3.$$

b) Considere agora o caso da rotação livre, i.e. sem torques ($N_i = 0$). Assumindo pequenas perturbações, verifique em que condições a rotação em terno do eixo principal $\mathbf{e_1}$ é estável.

Sem torques, temos $\dot{\omega}_2 = \dfrac{I_3 - I_1}{I_2}\omega_1\omega_3$ e $\dot{\omega}_3 = \dfrac{I_1 - I_2}{I_3}\omega_1\omega_2$. Assumimos rotação sobre o eixo $\mathbf{e}_1$, i.e. $\omega_1 \gg \omega_2, \omega_3$, e que $\dot{\omega}_1 \ll \dot{\omega}_2, \dot{\omega}_3$. Isto corresponde a procurar por rotações mais pronunciadas segundo um dos eixos.

$$\begin{aligned} \ddot{\omega}_2 &= \frac{I_3 - I_1}{I_2}\left(\dot{\omega}_1\omega_3 + \omega_1\dot{\omega}_3\right) \simeq \frac{I_3 - I_1}{I_2}\omega_1\dot{\omega}_3 \\ \Leftrightarrow \ddot{\omega}_2 &+ \underbrace{\frac{I_3 - I_1}{I_2}\frac{I_2 - I_1}{I_3}\omega_1^2}_{\Omega^2}\,\omega_2 = 0. \end{aligned}$$

As rotações são estáveis se Ω for real, i.e. $I_3, I_2 > I_1$ ou $I_3, I_2 < I_1$.

c) Considere o pião simétrico discutido nas aulas teóricas ($I_1 = I_2$). O Lagrangeano correspondente é dado por

$$L = \frac{1}{2}I_1\left(\dot{\theta}^2 + \dot{\phi}^2\sin^2\theta\right) + \frac{1}{2}I_3\left(\dot{\psi} + \dot{\phi}\cos\theta\right)^2 - Mgl\cos\theta.$$

Obtenha, em termos das quantidades conservadas, a seguinte equação para a variável $u \equiv \cos\theta$,

$$\frac{1}{2}\dot{u}^2 + V_{\text{ef.}}(u) = 0.$$

Como $L \neq L(\psi)$ e $L \neq L(\phi)$, temos imediatamente duas quantidades conservadas

$$p_\psi = \frac{\partial L}{\partial\dot{\psi}} = I_3(\dot{\psi} + \dot{\phi}\cos\theta), \quad p_\phi = \frac{\partial L}{\partial\dot{\phi}} = I_1\dot{\phi}\sin^2\theta + I_3\left(\dot{\psi} + \dot{\phi}\cos\theta\right)\cos\theta.$$

Invertendo, temos

$$\dot{\psi} = \frac{p_\psi}{I_3} - \frac{(p_\phi - p_\psi\cos\theta)\cos\theta}{I_1\sin^2\theta}, \quad \dot{\phi} = \frac{p_\phi - p_\psi\cos\theta}{I_1\sin^2\theta}.$$

O terceiro integral do movimento é a energia mecânica (identidade de Beltrami)

$$E = \frac{\partial L}{\partial\dot{q}_i}\dot{q}_i - L = \frac{1}{2}I_1\left(\dot{\theta}^2 + \dot{\phi}^2\sin^2\theta\right) + \frac{1}{2}I_3\left(\dot{\psi} + \dot{\phi}\cos\theta\right)^2 + Mgl\cos\theta.$$

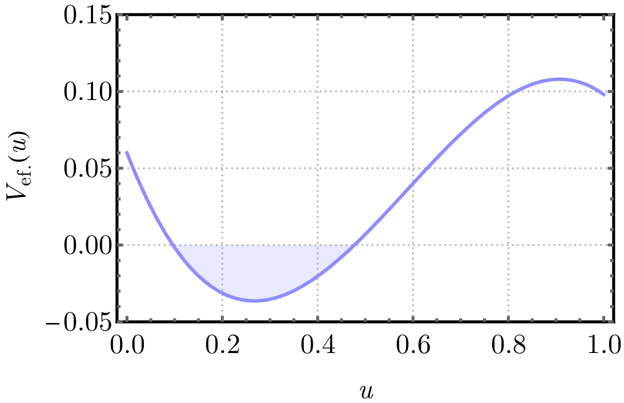
$$\underbrace{E - \frac{p_\psi^2}{2I_3}}_{E'} = \frac{1}{2}I_1\dot{\theta}^2 + \frac{(p_\phi + p_\psi\cos\theta)^2}{2I_1\sin^2\theta} + Mgl\cos\theta.$$

Definindo $u = \cos\theta$, $\dot{u} = -\sin\theta\dot{\theta} = -\sqrt{1-u^2}\dot{\theta}$,

$$\frac{1}{2}\dot{u}^2 + \underbrace{\frac{(p_\phi + p_\psi u)^2}{2I_1^2} + \frac{Mgl}{I_1}u(1-u^2) - \frac{E'}{I_1}(1-u^2)}_{V_{\text{ef.}(u)}} = 0.$$

d) Represente o potencial efectivo $V_{\text{ef.}}(u)$ graficamente e argumente que o movimento de nutação ocorre entre valores limitados de u.

O potencial efectivo, representado na figura abaixo, admite soluções possíveis na zona a sombreado, i.e. para $u_1 < u < u_2$, onde $u_{1,2}$ são os "pontos de viragem".



⋆⋆ **Problema 3. Modos normais.** Considere um sistema de n graus de liberdade descrito pelas coordenadas generalizadas $q_1, q_2, ..., q_n$. Considere o caso em que existe pelo menos um ponto de equilíbrio.

a) Mostre que o Lagrangeano para pequenas oscilações $\eta_i = q_i - q_{0i}$ se escreve

$$L = \frac{1}{2}T_{ij}\dot{\eta}_i\dot{\eta}_j - \frac{1}{2}V_{ij}\eta_i\eta_j.$$

Partindo da definição, $L = T - V$ e atendendo ao facto de $T = T(\dot{q}_i)$ e $V = V(q_i)$, fazemos expansão em torno dos pontos de equilíbrio

$$V = V_0 + \cancel{\left.\frac{\partial V}{\partial q_i}\right|_0}\eta_i + \frac{1}{2}\underbrace{\left.\frac{\partial^2 V}{\partial q_i \partial q_j}\right|_0}_{V_{ij}}\eta_i\eta_j + ...$$

Para a energia cinética, notamos que $T = \frac{1}{2}m_{ij}\dot{q}_i\dot{q}_j = \frac{1}{2}m_{ij}\dot{\eta}_i\dot{\eta}_j$, onde a matriz das massas

$$m_{ij}(q_1, ..., q_n) = \underbrace{m_{ij}(q_{01}, ..., q_{0n})}_{T_{ij}} + ...$$

Como a energia cinética é quadrática em primeira na expansão, ficamos

$$L \simeq T_0 - V_0 + \frac{1}{2}T_{ij}\dot{\eta}_i\dot{\eta}_j - \frac{1}{2}V_{ij}\eta_i\eta_j.$$

Desprezando o termo constante $T_0 - V_0$, chegamos ao resultado pretendido.

b) Teste soluções do tipo $\eta_i = a_i e^{-i\omega t}$. Mostre que a equação do movimento se escreve

$$V_{ij}a_j = \omega^2 T_{ij} a_j$$

e obtenha a equação secular para ω.

Equações de Euler-Lagrange: $\dfrac{d}{dt}\left(\dfrac{\partial L}{\partial \dot\eta_k}\right) - \dfrac{\partial L}{\partial \eta_k} = 0$

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{1}{2}T_{ij}\underbrace{\frac{\partial \dot\eta_i}{\partial \dot\eta_k}}_{\delta_{ik}}\dot\eta_j + \frac{1}{2}T_{ij}\underbrace{\frac{\partial \dot\eta_j}{\partial \dot\eta_k}}_{\delta_{jk}}\dot\eta_i\right) + \frac{1}{2}V_{ij}\underbrace{\frac{\partial \eta_i}{\partial \eta_k}}_{\delta_{ik}}\eta_j + \frac{1}{2}V_{ij}\underbrace{\frac{\partial \eta_j}{\partial \eta_k}}_{\delta_{jk}}\eta_i = 0$$

$$\Leftrightarrow \frac{d}{dt}\left(T_{kj}\dot\eta_j\right) + V_{kj}\eta_j = 0.$$

Como $T_{kj} = T_{jk}$, $V_{kj} = V_{jk}$ (tensores simétricos),

$$T_{ij}\ddot\eta_j + V_{ij}\eta_j = 0,$$

onde optámos por mudar o índice mudo $k \to j$. O resultado do enunciado agora é óbvio.

c) Seja $\mathbf{a}_\alpha$ um vector próprio. Mostre que a simetria do tensor T_{ij} implica

$$\mathbf{a}_\alpha^\dagger \cdot \mathbf{T} \cdot \mathbf{a}_\beta = \mathbb{I}\delta_{\alpha\beta}.$$

(De forma equivalente, que se $\mathbf{A}$ for a matriz cujas colunas são os vectores próprios, se tem $\mathbf{A}^T\mathbf{T}\mathbf{A} = \mathbb{I}$.)

Seja $\mathbf{a}_\ell$ um dos vectores próprios do problema ($\lambda_\ell = \omega_\ell^2$)

$$\mathbf{V}\cdot\mathbf{a}_\ell = \lambda_\ell \mathbf{T}\cdot\mathbf{a}_\ell \quad \Rightarrow \quad \mathbf{a}_\ell^\dagger \cdot \mathbf{V} = \lambda_\ell^* \mathbf{a}_\ell^\dagger \cdot \mathbf{T},$$

onde $\mathbf{a}_\ell^\dagger = \mathbf{a}_\ell^{T*}$ (vector adjunto). Multiplicando por $\mathbf{a}_\ell$ e $\mathbf{a}_\ell^\dagger$ e subtraindo,

$$(\lambda_\ell - \lambda_\ell^*)\underbrace{\mathbf{a}_\ell^\dagger\cdot\mathbf{T}\cdot\mathbf{a}_\ell}_{c_\ell} = 0 \Rightarrow c_\ell \in \mathbb{R}.$$

Fazendo a decomposição $\mathbf{a}_\ell = \alpha_\ell + i\beta_\ell$,

$$c_\ell = \alpha_\ell^T\cdot\mathbf{T}\cdot\alpha_\ell + \beta_\ell^T\cdot\mathbf{T}\cdot\beta_\ell + i\underbrace{\left(\alpha_\ell^T\cdot\mathbf{T}\cdot\beta_\ell - \beta_\ell^T\cdot\mathbf{T}\cdot\alpha_\ell\right)}_{=0,\quad (T_{ij}=T_{ji})}.$$

A matriz $\mathbf{T}$ é definia positiva, $c_\ell \geq 0$.

$$\boxed{\lambda_\ell = \lambda_\ell^*}\ [a]$$

A energia cinética pode então escreve-se $T = \frac{1}{2}\eta^T\cdot\mathbf{T}\cdot\eta$
Voltemos à relação usando o facto de $\mathbf{T}$ ser definida positiva,

$$\mathbf{V}\cdot\mathbf{a}_\ell = \lambda_\ell\mathbf{T}\cdot\mathbf{a}_\ell \quad \Rightarrow \quad \mathbf{a}_k^T\cdot\mathbf{V} = \lambda_k^*\mathbf{a}_k^T\cdot\mathbf{T}.$$

Multiplicando por $\mathbf{a}_k^T$ e $\mathbf{a}_\ell$ e subtraindo,

$$(\lambda_k - \lambda_\ell)\underbrace{\mathbf{a}_\ell^T\cdot\mathbf{T}\cdot\mathbf{a}_k}_{c_{\ell k}=c_{k\ell}} = 0.$$

Na ausência de **degenerescência**, $\lambda_k \neq \lambda_\ell$ para $k \neq \ell$, $c_{\ell k} = 0$. Genericamente,

$$c_{\ell k} = \delta_{\ell k}.$$

Isto permite-nos fixar as componentes dos vectores próprios

$$\mathbf{a}_k^T \cdot \mathbf{T} \cdot \mathbf{a}_\ell = \mathbb{I}\delta_{k\ell} \Rightarrow a_{i;k} T_{ij} a_{j;\ell} = \delta_{ij}\delta_{k\ell}\text{[b]}.$$

Para um mesmo vector,

$$\boxed{\mathbf{a}_\ell^T \cdot \mathbf{T} \cdot \mathbf{a}_\ell = 1}$$

---

[a] **Nota:** Embora $\lambda_\ell \in \mathbb{R}$, isto não implica que ω seja real ($\omega = \pm\sqrt{\lambda_\ell}$!)
[b] (k, ℓ): índice de vector próprio; (i, j): índice de componente de cada vector

d) Defina as coordenadas normais ζ através da relação $\zeta_i = A_{ij}\eta_j$. Mostre que, em termos destas coordenadas, o Lagrangeano é diagonal

$$L = \frac{1}{2}\left(\dot{\zeta}_k^2 - \omega_k^2 \zeta_k^2\right).$$

$$\eta_i = a_{i;k}\zeta_k = A_{ik}\zeta_k \quad (\text{matricialmente: } \eta = \mathbf{A} \cdot \zeta_i)$$

O potencial então escreve-se

$$V = \frac{1}{2}\eta^T \cdot \mathbf{V} \cdot \eta = \frac{1}{2}\left(\mathbf{A} \cdot \zeta\right)^T \cdot \mathbf{AV} \cdot \zeta = \frac{1}{2}\zeta^T \mathbf{A}^T \mathbf{VA} \cdot \zeta.$$

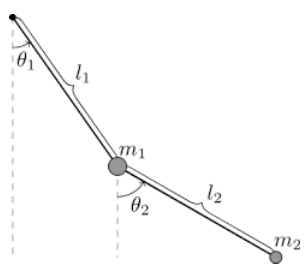
Usando $\mathbf{A}^T\mathbf{VA} = \boldsymbol{\lambda} = \lambda\mathbb{I}$,

$$\boxed{V = \frac{1}{2}\omega_k^2 \zeta_k^2}$$

Para a energia cinética,

$$T = \frac{1}{2}\dot{\zeta}^T \cdot \overbrace{\mathbf{A}^T\mathbf{TA}}^{\mathbb{I}} \cdot \dot{\zeta} \Leftrightarrow \boxed{T = \frac{1}{2}\dot{\zeta}_k\dot{\zeta}_k}$$

⋆⋆ **Problema 4. O pêndulo duplo.** Considere um pêndulo duplo, sujeito a um potencial gravítico constante, de hastes fixas ℓ_1 e ℓ_2. O primeiro pêndulo tem um ponto de suspensão fixo, enquanto que o segundo está suspenso na massa do primeiro.



a) Mostre que o Lagrangeano do sistema pode ser dado por

$$\begin{aligned} L &= \frac{1}{2}m_1\ell_1^2\dot{\theta}_1^2 + \frac{1}{2}m_2\left[\ell_1^2\dot{\theta}_1^2 + \ell_2^2\dot{\theta}_2^2 + 2\ell_1\ell_2\dot{\theta}_1\dot{\theta}_2\cos(\theta_1 - \theta_2)\right] \\ &+ \quad m_1 g\ell_1\cos\theta_1 + m_2 g\left(\ell_1\cos\theta_1 + \ell_2\cos\theta_2\right). \end{aligned}$$

A energia cinética escreve-se $T = \frac{1}{2}m_1(\dot{x}_1^2 + \dot{y}_1^2) + \frac{1}{2}m_2(\dot{x}_2^2 + \dot{y}_2^2)$. Escolhendo o eixo yy a apontar para baixo, começamos por notar que $x_1 = \ell_1 \sin\theta_1$ e $y_1 = \ell_1 \cos\theta_1$. Da mesma forma, $x_2 = x_1 + \ell_2 \sin\theta_2$ e $y_2 = y_1 + \ell_2 \cos\theta_2$. Daqui temos que

$$\dot{x}_1^2 + \dot{y}_1^2 = \ell_1^2\dot{\theta}_1^2,$$
$$\dot{x}_2^2 + \dot{y}_2^2 = \ell_1^2\dot{\theta}_1^2 + \ell_2^2\dot{\theta}_2^2 + 2\ell_1\ell_2\dot{\theta}_1\dot{\theta}_2\underbrace{(\cos\theta_1\cos\theta_2 + \sin\theta_1\sin\theta_2)}_{\cos(\theta_1-\theta_2)}.$$

Para o potencial, $V = -m_1 g y_1 - m_2 g y_2 = -(m_1+m_2)g\ell_1\cos\theta_1 - m_2 g\ell_2\cos\theta_2$. Rearranjando os termos, obtemos o resultado pretendido.

b) Obtenha os pontos de equilíbrio do sistema e discuta a sua natureza.

A condição de equilíbrio é dada por

$$\frac{\partial V}{\partial\theta_1} = \frac{\partial V}{\partial\theta_2} = 0,$$

de onde resulta $\sin\theta_1 = 0$ e $\sin\theta_2 = 0$. Os pontos de equilíbrio são, portanto

$$\begin{bmatrix}\theta_1\\ \theta_2\end{bmatrix} = \left\{\begin{bmatrix}0\\0\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}\pi\\ \pi\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}0\\ \pi\end{bmatrix}, \begin{bmatrix}\pi\\0\end{bmatrix}\right\}.$$

O primeiro ponto é estável, enquanto os restantes três são instáveis. Matematicamente, basta olhar para as entradas da matriz Hessiana

$$\frac{\partial^2 V}{\partial\theta_i\partial\theta_j} = \begin{bmatrix}(m_1+m_2)g\ell_1\cos\theta_1 & 0\\ 0 & m_2 g\ell_2\cos\theta_2\end{bmatrix}.$$

c) Considere o caso $m_1 = m_2 = m$ e $\ell_1 = \ell_2 = \ell$, por simplicidade. Utilize o formalismo das pequenas oscilações para construir o Lagrangeano para as variáveis θ_1 e θ_2 em torno do ponto de equilíbrio estável que obteve na alínea b).

A matriz V_{ij} é a matriz Hessiana avaliada no ponto $(0,0)$.

$$V_{ij} = \left.\frac{\partial^2 V}{\partial\theta_i\partial\theta_j}\right|_{(0,0)} = \begin{bmatrix}2mg\ell & 0\\ 0 & mg\ell\end{bmatrix}.$$

A matriz T_{ij} obtém-se do termo de energia cinética avaliando a matriz das massas no ponto $(0,0)$,

$$T_{ij} = m_{ij}|_{(0,0)} = \begin{bmatrix}2m\ell^2 & m\ell^2\\ m\ell^2 & m\ell^2\end{bmatrix}.$$

Assim, temos que

$$L = \frac{1}{2}T_{ij}\dot{\theta}_i\dot{\theta}_j - \frac{1}{2}V_{ij}\theta_i\theta_j.$$

d) Obtenha os modos próprios de vibração do sistema e discuta-os fisicamente.

As frequências próprias de vibração são obtidas através de

$$\det(\omega^2 \mathbf{T} - \mathbf{V}) = 0.$$

Dividindo tudo por $m\ell^2$, e definindo $\omega_0 = \sqrt{g/\ell}$,

$$\begin{vmatrix} 2(\omega^2 - \omega_0^2) & \omega^2 \\ \omega^2 & \omega^2 - \omega_0^2 \end{vmatrix} = 0,$$

o que fornece $\omega = \omega_+$ e $\omega = \omega_-$, onde

$$\omega_+ = \sqrt{2 + \sqrt{2}}\,\omega_0 \simeq 1.848\,\omega_0, \quad \omega_- = \sqrt{2 - \sqrt{2}}\,\omega_0 \simeq 0.765\,\omega_0.$$

Os vectores próprios são determinados com $\mathrm{N}(\omega_\pm^2 \mathbf{T} - \mathbf{V})$, i.e. resolvendo o sistema

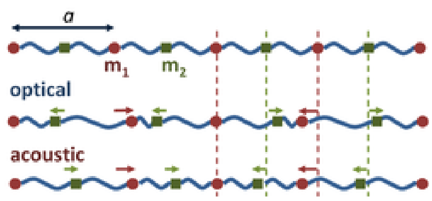
$$\begin{bmatrix} 2(\omega_\pm^2 - \omega_0^2) & \omega_\pm^2 \\ \omega_\pm^2 & \omega_\pm^2 - \omega_0^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \end{bmatrix} = 0,$$

o que resulta em

$$\begin{bmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \end{bmatrix}_+ = A_+ \begin{bmatrix} 1 \\ -\sqrt{2} \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} \theta_1 \\ \theta_2 \end{bmatrix}_- = A_- \begin{bmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \end{bmatrix}.$$

A condição de normalização impõe $A_- = A_+ = 1/\sqrt{3}$. O modo mais rápido é aquele em que os pêndulos oscilam em oposição de fase.

$\star\star\star$ **Problema 5. Vibrações em cristais: os fonões.** Em física do estado sólido, as vibrações das estruturas cristalinas dos diferentes materiais (metais, semi-metais, semicondutores e dieléctricos) têm um papel fundamental nas propriedades termodinâmicas do sistema. O calor específico dos sólidos, por exemplo, depende fortemente da maneira como os as estruturas cristalinas vibram. Da mesma forma, a condutividade eléctrica é afectada pela maneira como os electrões (considerados livres, em primeira aproximação) interagem com o potencial criado pelos iões da rede.



Acontece que, no caso de sistemas muito grandes (no limite analítico, infinitos), os modos de vibração adquirem um carácter colectivo, comportando-se como ondas acústicas. Aos elementos (quanta) de vibração destes modos nos sólidos dá-se o nome de *fonão*.

Consideremos um cristal unidimensional, que em primeira aproximação é uma colecção infinita e periódica de osciladores harmónicos acoplados. Seja $x_n = na$ a posição do n-ésimo ião da rede, onde a é a constante da rede. Consideremos, ainda, que todos os osciladores têm a mesma massa m e constante de mola k, restringindo a interacção a primeiros vizinhos.

a) Mostre que o Lagrangeano do sistema pode ser escrito na forma

$$L = \frac{1}{2} m \sum_n \dot{u}_n^2 - \frac{1}{2} k \sum_n (u_{n+1} - u_n)^2, \tag{1}$$

onde $u_n = x_n - na$ é o deslocamento em relação à posição de equilíbrio.

$$L = \frac{1}{2} m \sum_n \dot{x}_n^2 - U(x_1, x_2, ...x_N).$$

O potencial é aproximado aos primeiros vizinhos, $U(x_1, x_2, ...x_N) \simeq \frac{1}{2}\left[U(x_{n+1} - x_n) + U(x_n - x_{n-1})\right] = U(x_{n+1} - x_n)$, onde este último passo ocorre por simetria.[a] Assumindo que o potencial é harmónico para pequenos deslocamentos da rede,

$$U(x_{n+1} - x_n) = \frac{1}{2} k \left[x_n + 1 - x_n - (n+1)a - na\right]^2 .$$

Definindo $u_n = x_n - na$, chegamos ao resultado pretendido.

[a] Na verdade, podemos absorver os factores numéricos na definição da constante k, pelo que é indiferente incluir, ou não, a diferença $x_n - x_{n-1}$.

b) Escreva as equações do movimento e determine a relação de dispersão do *modo acústico* dos fonões

$$\omega(q) = 2\omega_0 \sin\left(\frac{qa}{2}\right). \tag{2}$$

Para longos comprimentos de onda, $qa \ll 1$, obtemos a relação da dispersão das ondas acústicas, $\omega = v|q|$, onde $v = 2\omega_0 a$. O desvio próximo da *zona de Brillouin*, i.e. para $q \simeq \pi/a$, reflecte a estrutura discreta da rede.

Podemos escrever as equações de Euler-Lagrange na forma

$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{u}_m} - \frac{\partial L}{\partial u_m} = 0$$

$$\Leftrightarrow \frac{d}{dt}\left(m\dot{u}_n \underbrace{\frac{\partial \dot{u}_n}{\partial \dot{u}_m}}_{\delta_{mn}}\right) + k\left[(u_{n+1} - u_n)\underbrace{\frac{\partial}{\partial u_m}(u_{n+1} - u_n)}_{\delta_{m,n+1} - \delta_{m,n}}\right] = 0$$

$$\Leftrightarrow m\ddot{u}_m + k\left(2u_m - u_{m+1} - u_{m-1}\right) = 0.$$

Mudando os índices mudos, $m \to n$ (só por conforto), temos ($\omega_0 = \sqrt{k/m}$)

$$\ddot{u}_n = -\omega_0^2\left(2u_n - u_{n+1} - u_{n-1}\right).$$

Neste caso, esperamos soluções periódicas no espaço e no tempo (ondas), $u_n(t) = Ae^{-i\omega t}e^{iqna}$, o que implica

$$-\omega^2 A e^{\varphi} = -\omega_0^2\left[\left(2 - e^{iqa} - e^{-iqa}\right) A e^{\varphi},\right.$$

onde $\varphi = -i(\omega t - qna)$. Simplificando, temos

$$\omega^2 = \omega_0^2[2 - 2\cos(qa)] = 4\omega_0^2\left(\frac{1 - \cos(qa)}{2}\right) = 4\omega_0^2 \sin^2\left(\frac{qa}{2}\right),$$

de onde se obtém, finalmente, o resultado pretendido.

c) Considere agora um cristal diatómico, constituído por massas m_1 e m_2. Mostre que, nesse caso, obtemos dois modos distintos

$$\omega(q)^2 = \omega_{\mathrm{O}}^2 \pm \sqrt{\omega_{\mathrm{O}}^4 - 4\omega_{\mathrm{A}}^4 \sin^2(qa)}, \tag{3}$$

onde

$$\omega_{\mathrm{O}} = \sqrt{k\frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2}}, \quad \text{e} \quad \omega_{\mathrm{A}} = \sqrt{\frac{k}{\sqrt{m_1 m_2}}}. \tag{4}$$

O modo de fonão de maior frequência recebe o nome de *modo óptico*, e apresenta um hiato no limite dos largos comprimentos de onda $q \to 0$ (ver Figura abaixo). Tem, portanto, uma natureza diferente do modo acústico determinado na alínea anterior (e que corresponde aqui ao modo de menor frequência), recebendo este nome por poder ser excitado com de feixes luminosos. Aproveite para se convencer de que no caso $m_1 = m_2$ recuperamos o caso descrito anteriormente.

A resolução segue o mesmo esquema anterior, com a modificação de que, agora, temos dois graus de liberdade acoplados: u_n e v_n, descrevendo os desvios dos átomos de massa m_1 e m_2, respectivamente.

$$L = \frac{1}{2}m_1\dot{u}_n^2 + \frac{1}{2}m_2\dot{v}_n^2 - \frac{1}{2}k\left(u_{n+1} - v_n\right)^2 - \frac{1}{2}k\left(u_{n-1} - v_n\right)^2$$

As equações do movimento serão

$$m_1\ddot{u}_n = k\left(v_{n-1} - 2u_n + v_{n+1}\right), \quad \ddot{m}_2 v_n = k\left(u_{n+1} - 2v_n + u_{n-1}\right).$$

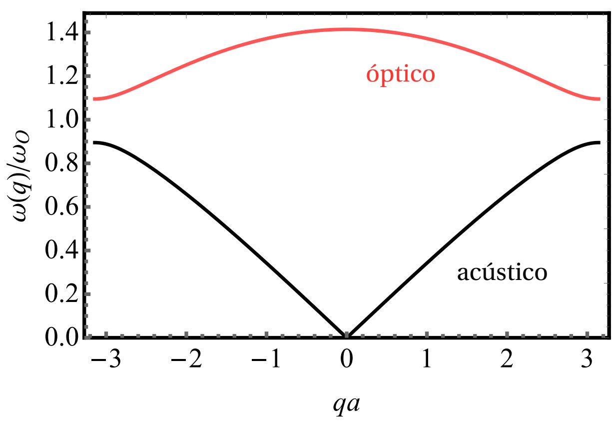
Procurando soluções do tipo $u_n(t) = Ae^{-i\omega t}e^{iqna}$ e $v_n(t) = Be^{-i\omega t}e^{iqna}$ (considerando que a distância entre primeiros vizinhos continua a ser a, para podermos comparar os resultados...), obteríamos a seguinte equação secular

$$\begin{vmatrix} m_1\omega^2 - 2k & 2k\cos(qa) \\ 2k\cos(qa) & m_2\omega^2 - 2k \end{vmatrix} = 0,$$

cujas soluções seriam

$$\omega^2 = \omega_\pm^2 = k\frac{m_1 + m_2}{m_1 m_2}\left(1 \pm \sqrt{1 - 4\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}\sin^2(qa)}\right).$$

Re-arranjando um pouco os termos, obtemos o resultado do enunciado. O modo ω_- corresponde ao modo acústico (oscilação de fase). Trata-se de um modo de compressão e, por isso, $\omega_- \sim q$. O modo ω_+ tem um hiato na origem, $\omega_+(q = 0) = \omega_O$, e corresponde à oscilação das massas m_1 e m_2 em oposição de fase. Este modo recebe o nome de "óptico" porque pode ser excitado com ondas electromagnéticas nos cristais.


1.4
1.2
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0
ω(q)/ωo
óptico
acústico
−3
−2
−1
0
1
2
3
qa