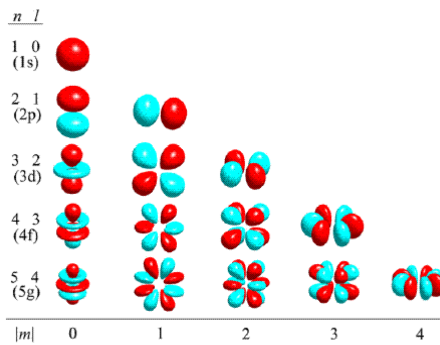
Universidade Federal do ABC

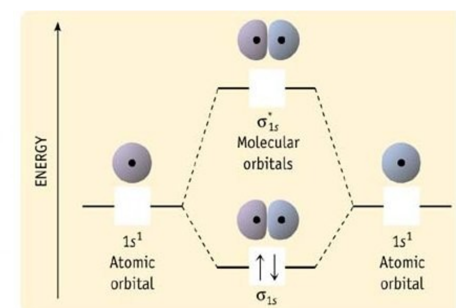
Interações Atômicas e Moleculares

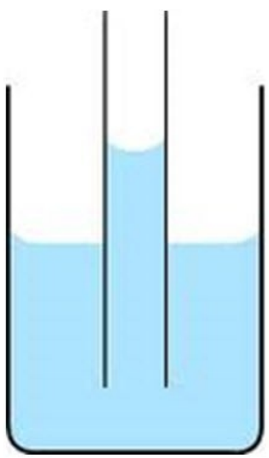


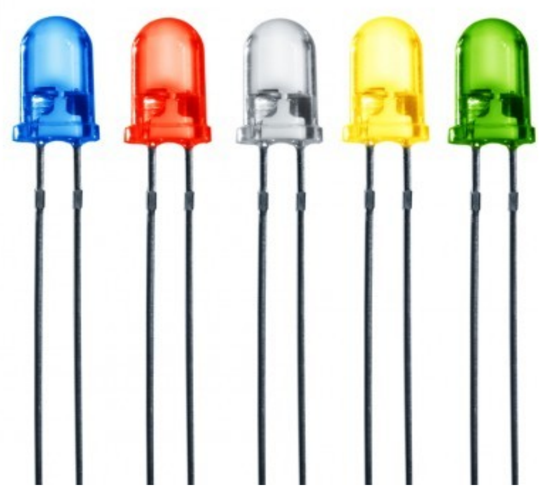
1. Introdução,
Corda Vibrante

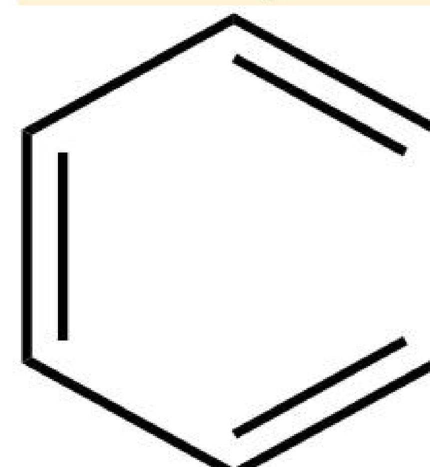
Prof. Pieter Westera
pieter.westera@ufabc.edu.br

http://professor.ufabc.edu.br/~pieter.westera/IAM.html









Interações Atômicas e Moleculares

1ª parte: Uso da Física Quântica para explicar, como os átomos formam moléculas e as propriedades (geometrias, energias) destas moléculas.

2ª parte: Apresentação das Interações Intermoleculares, e como estas explicam algumas propriedades de líquidos e sólidos.

Interações Atômicas e Moleculares

Motivação da disciplina (colado dos slides do prof. Adriano)

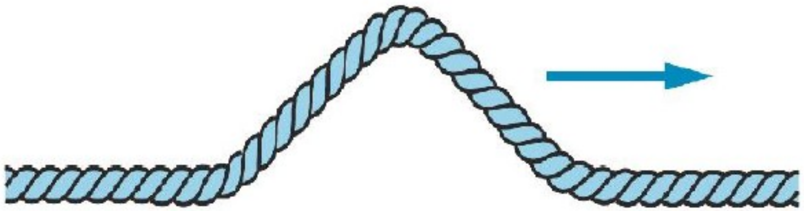
O desenvolvimento tecnológico atual se deve em grande parte a uma compreensão mais profunda da física básica de sistemas microscópios e a possibilidade da manipulação controlada destes sistemas. Portanto, uma compreensão desta física é necessária a qualquer um que queira atuar em áreas associadas a tecnologia.

Objetivos da disciplina (idem)

Aplicar os conhecimentos adquiridos em física e matemática, até agora no BC&T, para o estudo de sistemas atômicos e moleculares complexos (com mais de um átomo) e desenvolver a descrição adequada destes sistemas e discutir suas implicações nas áreas de ciência e tecnologia.

Ondas

O que é uma onda?



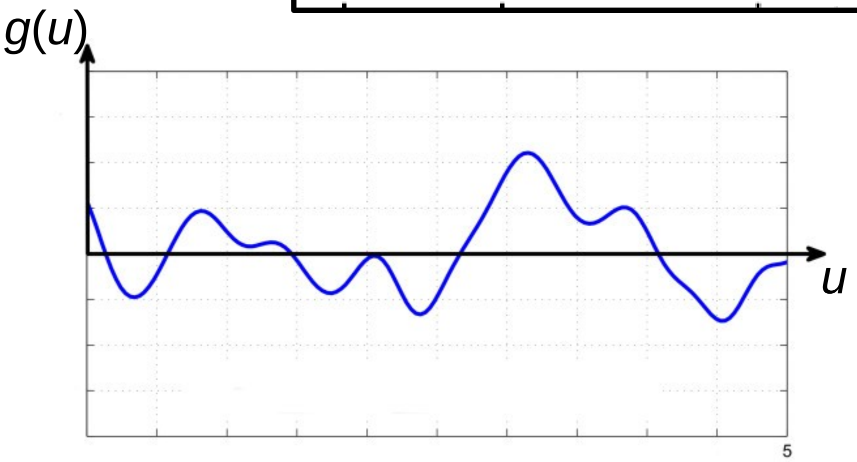
Uma variação, periódica ou não, em alguma grandeza física *y*, que se propaga pelo espaço.
Exemplos: Ondas sonoras: variações na pressão do ar,
Ondas eletromagnéticas: campos elétrico e magnético, etc.

Ela satisfaz a Equação de Onda:
que é derivada dos processos que causam a propagação (para ondas sonoras, as interações entre as partículas do ar, para ondas eletromagnéticas, uma combinação das Leis de Maxwell, ..)

$$\boxed{\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 y}{\partial t^2}}$$

$$\boxed{\frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 y}{\partial t^2}}$$

Ondas



Soluções são:

$y_+(x,t) = g(x - vt)$

e

$y_-(x,t) = h(x + vt)$,

onde g e h podem ser funções quaisqueres (2 vezes deriváveis):

Isto é fácil de mostrar (exemplo y_+):

Chamamos as 1ª e 2ª derivadas de g' e g'':

$\partial y_+/\partial x = g'(x - vt)$

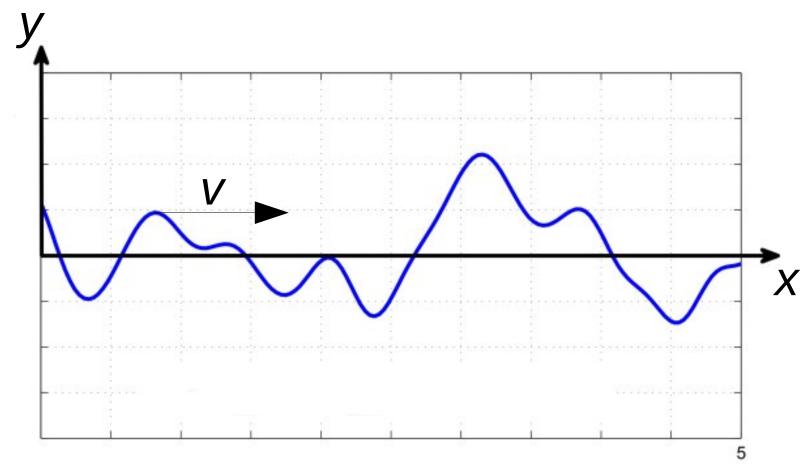
$\partial^2 y_+/\partial x^2 = g''(x - vt)$,

$\partial y_+/\partial t = (-v)\cdot g'(x - vt)$

$\partial^2 y_+/\partial t^2 = (-v)\cdot(-v)\cdot g''(x - vt) = v^2 g''(x - vt) = v^2 \cdot \partial^2 y_+/\partial x^2$ QED

Analogicamente para y_-

Ondas



Como interpretar y_+ e y_-?

$y_+(x,t) = g(x - vt)$:

A função é "igual" (mesmo valor e comportamento) sempre, quando o argumento de g é igual, isto é, para todas as combinações x e t, para aquelas $x - vt$ dá o mesmo valor.

Chamando este valor de x_0 (já que é $x - vt$ para $t = 0$):

$x - vt = x_0 \Rightarrow x = x_0 + vt$

O ponto da curva se movimenta com velocidade v na direção x.

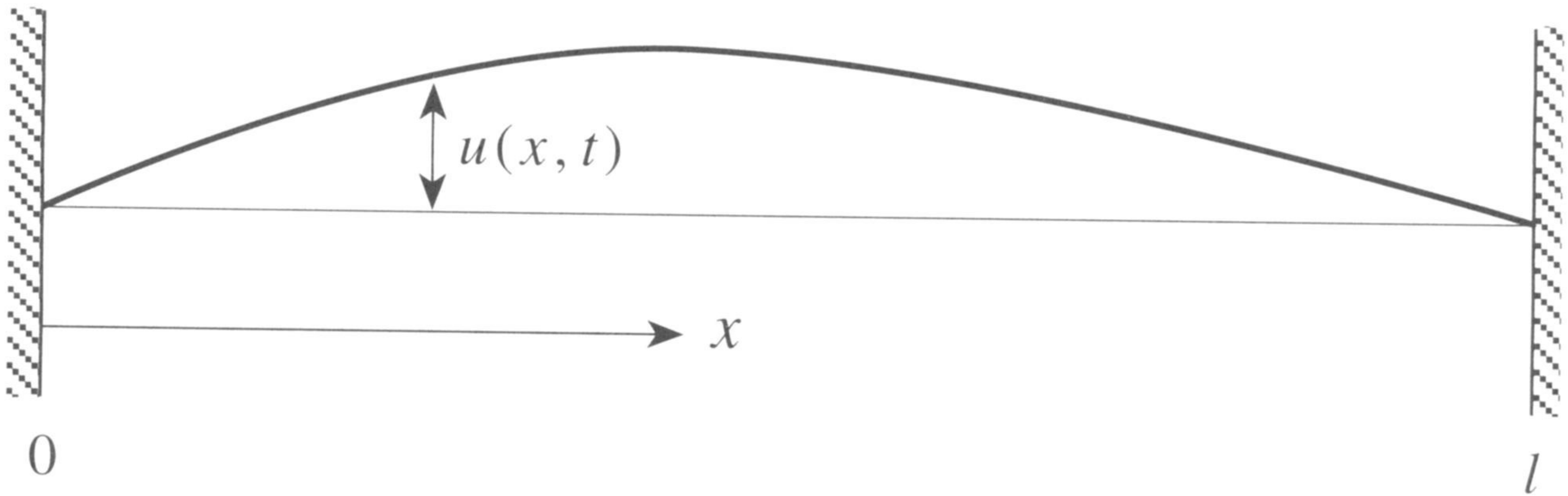
Analogicamente para y_-.

Então:

$y_+(x,t) = g(x - vt)$: onda de forma $g(x)$ propagando-se com velocidade v na direção $+x$, e

$y_-(x,t) = h(x + vt)$: " $h(x)$ " na direção $-x$.

Corda Vibrante



Para a corda vibrante, presa em x = 0 e x = l, a grandeza que se propaga é o deslocamento transversal $u(x,t)$.

=> Equação de onda para este caso: $$\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial t^2}$$

As condições de contorno são: $u(0,t) = u(l,t) = 0$

Corda Vibrante

Para solucionar a equação podemos utilizar a técnica de separação de variáveis, supondo que a solução pode ser escrita como o produto de uma função que depende apenas de *x*, *X*(*x*), e uma que depende só de *t*, *T*(*t*):

$$u(x,t) = X(x)T(t)$$

Assim:

$$\frac{\partial^2 (X(x)T(t))}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2 (X(x)T(t))}{\partial t^2}$$

$$T(t)\frac{d^2 X(x)}{dx^2} = \frac{X(x)}{v^2}\frac{d^2 T(t)}{dt^2}$$

Dividindo tudo por *X*(*x*)*T*(*t*), obtemos:

$$\frac{1}{X(x)}\frac{d^2 X(x)}{dx^2} = \frac{1}{v^2 T(t)}\frac{d^2 T(t)}{dt^2}$$

Corda Vibrante

Dessa forma, podemos igualar cada lado da equação a uma constante, chamada constante de separação:

$$\frac{1}{X(x)}\frac{d^2X(x)}{dx^2} = K$$

$$\frac{1}{v^2T(t)}\frac{d^2T(t)}{dt^2} = K$$

Temos agora duas equações diferenciais ordinárias de primeira ordem a resolver:

(I) $$\frac{d^2X(x)}{dx^2} - KX(x) = 0$$

(II) $$\frac{d^2T(t)}{dt^2} - Kv^2T(t) = 0$$

Corda Vibrante

Caso *K* > 0:

Definimos: $K = k^2$ e $X(x) \equiv y(x)$

Substituindo em (I): $\dfrac{d^2y(x)}{dx^2} - k^2 y(x) = 0$

=(IEDO)=> $y(x) = e^{\alpha x}$ => $\dfrac{d^2y(x)}{dx^2} = \alpha^2 e^{\alpha x} = \alpha^2 y(x)$

=> $(\alpha^2 - k^2)y(x) = 0$ => $\alpha^2 - k^2 = 0 \Rightarrow \alpha = \pm k$

=> Solução geral: $\boxed{y(x) = C_1 e^{kx} + C_2 e^{-kx}}$

Infelizmente, esta solução não é compatível com as condições de contorno (a não ser que $C_1 = C_2 = 0$, o que é a solução trivial)

Corda Vibrante

Caso $K < 0$:

Definimos agora: $-K = k^2$ e $X(x) \equiv y(x)$

Substituindo em (I): $\dfrac{d^2y(x)}{dx^2} + k^2y(x) = 0$

=> Solução (real) geral: $y(x) = A_1 \cos kx + A_2\, sen\, kx$

Pelas condições de contorno: $X(0) = A_1 \cos 0 + A_2 \text{ sen } 0 = A_1 = 0$
e $X(l) = A_2 \text{ sen } kl = 0$ => $kl = n\pi$ ou $k_n = n\pi/l$, $n = 1, 2, 3, ...$

=> $X_n(x) = A_2 \text{ sen } n\pi x/l$,

$\lambda_n = 2\pi/k_n = 2l/n$

Corda Vibrante

Agora podemos resolver a parte temporal: $\frac{d^2T(t)}{dt^2} + k^2v^2T(t) = 0$

definindo $k^2v^2 = \omega^2$ a equação vira: $$\frac{d^2T(t)}{dt^2} + \omega^2T(t) = 0$$

com a solução geral: $T(t) = D\cos\omega_n t + E\, sen\,\omega_n t$

=> A onda com forma A_2 sen $n\pi x/l$ oscila com frequência angular $\omega_n = k_n v = n\pi v/l = 2\pi v/\lambda_n$

=> Onda estacionária:
Não se propaga ao longo da corda, pode ser interpretada como a sobreposição de uma onda propagando-se na direção +*x* e uma propagando-se na direção -*x* (e que se cancelam nos nós).

Corda Vibrante

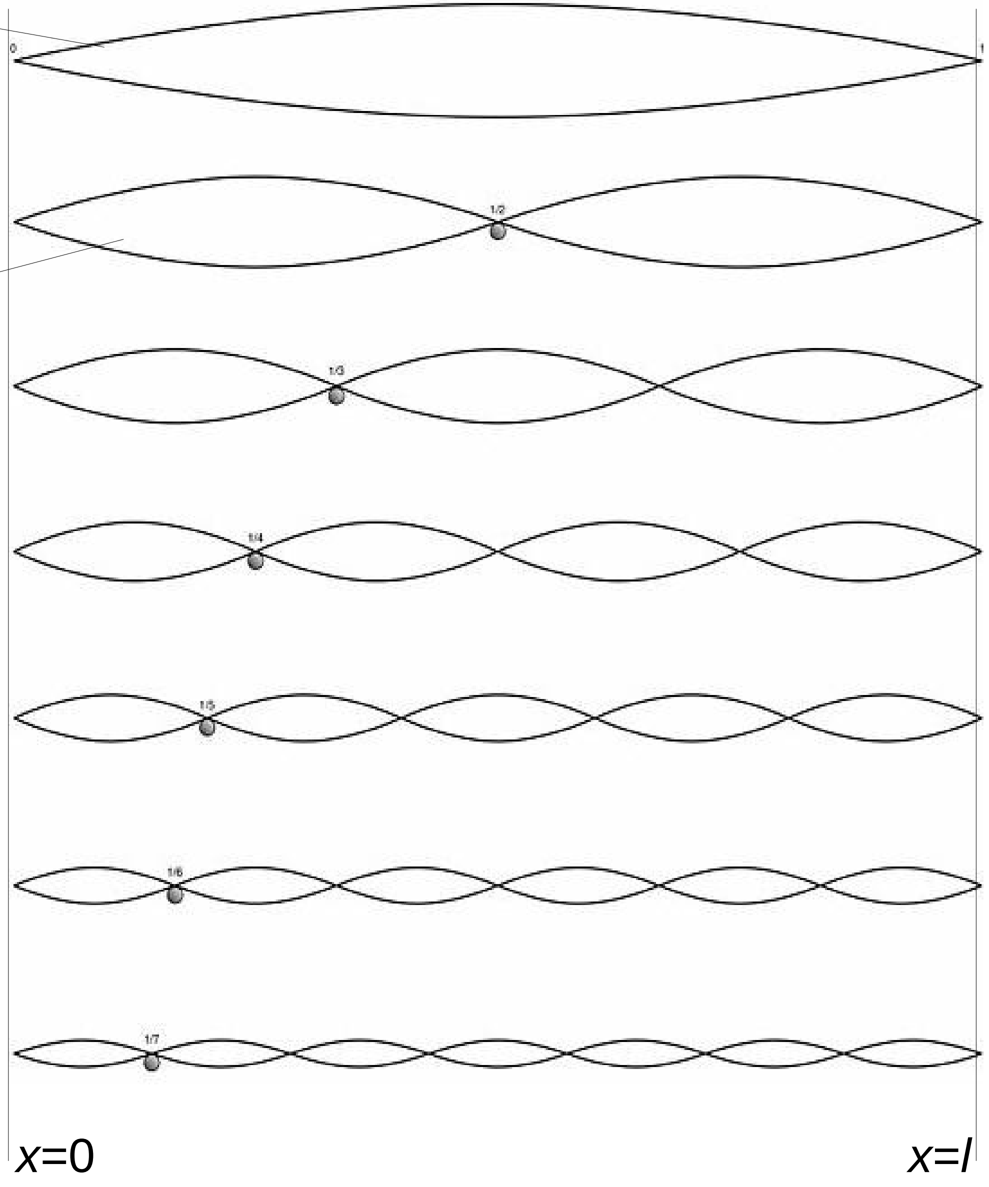
n = 1, λ = 2l, ω = $\pi v/l$:
modo fundamental ou
primeiro harmônico

n = 2, λ = l, ω = 2$\pi v/l$:
segundo harmônico

n = 3, λ = 2l/3, ω = 3$\pi v/l$:
terceiro harmônico

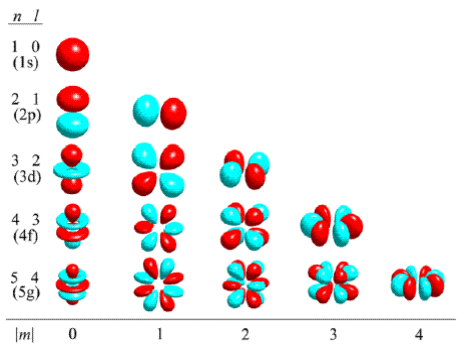
.
.
.

n-ésimo harmônico:
$\lambda = 2l/n$, $\omega = n\pi v/l$:



Universidade Federal do ABC

Interações Atômicas e Moleculares



FIM PRA HOJE