

Ficha nº 5 de Estado Sólido

Artur Palha nº 46724

9 Abril de 2003

Exercício 13

O código de Mathematica utilizado para resolver estes exercícios foi o apresentado de seguida. Neste encontram-se as rotinas para integração das equações de movimento das nove molas e para efectuar a transformada de discreta de Fourier por forma a que se visualizem, correctamente, as frequências de oscilação do sistema. No final encontra-se a rotina que desenha o gráfico das frequências ω em função do parâmetro $n = 0, \dots, 9$.

```
del=0.1;
n=4000;
k=(o que se quiser, esta variável é n do enunciado);
q1={N[Cos[2kPi/9]],N[Cos[2kPi/9]]};
q2={N[Cos[2kPi2/9]],N[Cos[2kPi2/9]]};
q3={N[Cos[2kPi3/9]],N[Cos[2kPi3/9]]};
q4={N[Cos[2kPi4/9]],N[Cos[2kPi4/9]]};
q5={N[Cos[2kPi5/9]],N[Cos[2kPi5/9]]};
q6={N[Cos[2kPi6/9]],N[Cos[2kPi6/9]]};
q7={N[Cos[2kPi7/9]],N[Cos[2kPi7/9]]};
q8={N[Cos[2kPi8/9]],N[Cos[2kPi8/9]]};
q9={N[Cos[2kPi9/9]],N[Cos[2kPi9/9]]};

For[i=3,i<n+1,i++,{
  q1=Append[q1,2q1[[i-1]](1-del^2)-q1[[i-2]]+del^2(q9[[i-1]]+q2[[i-1]])],
  q2=Append[q2,2q2[[i-1]](1-del^2)-q2[[i-2]]+del^2(q1[[i-1]]+q3[[i-1]])],
  q3=Append[q3,2q3[[i-1]](1-del^2)-q3[[i-2]]+del^2(q2[[i-1]]+q4[[i-1]])],
  q4=Append[q4,2q4[[i-1]](1-del^2)-q4[[i-2]]+del^2(q3[[i-1]]+q5[[i-1]])],
  q5=Append[q5,2q5[[i-1]](1-del^2)-q5[[i-2]]+del^2(q4[[i-1]]+q6[[i-1]])],
  q6=Append[q6,2q6[[i-1]](1-del^2)-q6[[i-2]]+del^2(q5[[i-1]]+q7[[i-1]])],
  q7=Append[q7,2q7[[i-1]](1-del^2)-q7[[i-2]]+del^2(q6[[i-1]]+q8[[i-1]])],
  q8=Append[q8,2q8[[i-1]](1-del^2)-q8[[i-2]]+del^2(q7[[i-1]]+q9[[i-1]])],
  q9=Append[q9,2q9[[i-1]](1-del^2)-q9[[i-2]]+del^2(q8[[i-1]]+q1[[i-1]])],
}
]
traj1=Table[{i del,q1[[i]]},{i,1,n};
traj2=Table[{i del,q2[[i]]},{i,1,n};
traj3=Table[{i del,q3[[i]]},{i,1,n};
traj4=Table[{i del,q4[[i]]},{i,1,n};
traj5=Table[{i del,q5[[i]]},{i,1,n};
traj6=Table[{i del,q6[[i]]},{i,1,n};
traj7=Table[{i del,q7[[i]]},{i,1,n};
traj8=Table[{i del,q8[[i]]},{i,1,n};
```

```

traj9=Table[{i del,q9[[i]]},{i,1,n}];

ListPlot[traj1, PlotRange->All];
ListPlot[traj2, PlotRange->All];
ListPlot[traj3, PlotRange->All];
ListPlot[traj4, PlotRange->All];
ListPlot[traj5, PlotRange->All];
ListPlot[traj6, PlotRange->All];
ListPlot[traj7, PlotRange->All];
ListPlot[traj8, PlotRange->All];
ListPlot[traj9, PlotRange->All];

intensidade=Abs[Fourier[q1]]^2;
lista=Table[{N[1/400]*j,intensidade[[j]]},{j,1,n}];
ListPlot[lista, PlotRange->{{0,0.5},{0,50}}];
frequencia={999};
For[i=2, i<n/2,i++,{
  If[lista[[i]][[2]]>lista[[i-1]][[2]],
    If[lista[[i]][[2]]>lista[[i+1]][[2]],
      frequencia=Append[frequencia,lista[[i]][[1]],699],0]
  }
]
frequencia>Delete[frequencia,1]

intensidade=Abs[Fourier[q2]]^2;
lista=Table[{N[1/400]*j,intensidade[[j]]},{j,1,n}];
ListPlot[lista, PlotRange->{{0,0.5},{0,50}}];
frequencia={999};
For[i=2, i<n/2,i++,{
  If[lista[[i]][[2]]>lista[[i-1]][[2]],
    If[lista[[i]][[2]]>lista[[i+1]][[2]],
      frequencia=Append[frequencia,lista[[i]][[1]],699],0]
  }
]
frequencia>Delete[frequencia,1]

intensidade=Abs[Fourier[q3]]^2;
lista=Table[{N[1/400]*j,intensidade[[j]]},{j,1,n}];
ListPlot[lista, PlotRange->{{0,0.5},{0,50}}];
frequencia={999};
For[i=2, i<n/2,i++,{
  If[lista[[i]][[2]]>lista[[i-1]][[2]],
    If[lista[[i]][[2]]>lista[[i+1]][[2]],
      frequencia=Append[frequencia,lista[[i]][[1]],699],0]
  }
]
frequencia>Delete[frequencia,1]

intensidade=Abs[Fourier[q4]]^2;
lista=Table[{N[1/400]*j,intensidade[[j]]},{j,1,n}];
ListPlot[lista, PlotRange->{{0,0.5},{0,50}}];
frequencia={999};
For[i=2, i<n/2,i++,{
  If[lista[[i]][[2]]>lista[[i-1]][[2]],

```

```

        If[lista[[i]][[2]]>lista[[i+1]][[2]],
            frequencia=Append[frequencia,lista[[i]][[1]],699],0]
    }
]
frequencia=Delete[frequencia,1]

intensidade=Abs[Fourier[q5]]^2;
lista=Table[{N[1/400]*j,intensidade[[j]]},{j,1,n}];
ListPlot[lista, PlotRange->{{0,0.5},{0,50}}];
frequencia={999};
For[i=2, i<n/2,i++,{
    If[lista[[i]][[2]]>lista[[i-1]][[2]],
        If[lista[[i]][[2]]>lista[[i+1]][[2]],
            frequencia=Append[frequencia,lista[[i]][[1]],699],0]
        }
]
frequencia=Delete[frequencia,1]

intensidade=Abs[Fourier[q6]]^2;
lista=Table[{N[1/400]*j,intensidade[[j]]},{j,1,n}];
ListPlot[lista, PlotRange->{{0,0.5},{0,50}}];
frequencia={999};
For[i=2, i<n/2,i++,{
    If[lista[[i]][[2]]>lista[[i-1]][[2]],
        If[lista[[i]][[2]]>lista[[i+1]][[2]],
            frequencia=Append[frequencia,lista[[i]][[1]],699],0]
        }
]
frequencia=Delete[frequencia,1]

intensidade=Abs[Fourier[q7]]^2;
lista=Table[{N[1/400]*j,intensidade[[j]]},{j,1,n}];
ListPlot[lista, PlotRange->{{0,0.5},{0,50}}];
frequencia={999};
For[i=2, i<n/2,i++,{
    If[lista[[i]][[2]]>lista[[i-1]][[2]],
        If[lista[[i]][[2]]>lista[[i+1]][[2]],
            frequencia=Append[frequencia,lista[[i]][[1]],699],0]
        }
]
frequencia=Delete[frequencia,1]

intensidade=Abs[Fourier[q8]]^2;
lista=Table[{N[1/400]*j,intensidade[[j]]},{j,1,n}];
ListPlot[lista, PlotRange->{{0,0.5},{0,50}}];
frequencia={999};
For[i=2, i<n/2,i++,{
    If[lista[[i]][[2]]>lista[[i-1]][[2]],
        If[lista[[i]][[2]]>lista[[i+1]][[2]],
            frequencia=Append[frequencia,lista[[i]][[1]],699],0]
        }
]
frequencia=Delete[frequencia,1]

```

```

intensidade=Abs[Fourier[q9]]^2;
lista=Table[{N[1/400]*j,intensidade[[j]]},{j,1,n}];
ListPlot[lista, PlotRange->{{0,0.5},{0,50}}];
frequencia={999};
For[i=2, i<n/2,i++,{
  If[lista[[i]][[2]]>lista[[i-1]][[2]],
    If[lista[[i]][[2]]>lista[[i+1]][[2]],
      frequencia=Append[frequencia,lista[[i]][[1]],699],0]
  }
]
frequencia=Delete[frequencia,1]
<<Graphics 'MultipleListPlot'
freqs={0,0.1125,0.2075, 0.2775, 0.3175, 0.3175, 0.2775, 0.2075, 0.1125, 0};
MultipleListPlot[freqs, PlotRange->{{0,10},{0,0.32}},SymbolShape->PlotSymbol[Box]];

```

a)

O sistema de equações que rege este sistema é:

$$\begin{aligned}
M\ddot{x}_1 &= k(x_2 - x_1) + k(x_9 - x_1) \\
M\ddot{x}_2 &= k(x_3 - x_2) + k(x_1 - x_2) \\
M\ddot{x}_3 &= k(x_4 - x_3) + k(x_2 - x_3) \\
M\ddot{x}_4 &= k(x_5 - x_4) + k(x_3 - x_4) \\
M\ddot{x}_5 &= k(x_6 - x_5) + k(x_4 - x_5) \\
M\ddot{x}_6 &= k(x_7 - x_6) + k(x_5 - x_6) \\
M\ddot{x}_7 &= k(x_8 - x_7) + k(x_6 - x_7) \\
M\ddot{x}_8 &= k(x_9 - x_8) + k(x_7 - x_8) \\
M\ddot{x}_9 &= k(x_1 - x_9) + k(x_8 - x_9)
\end{aligned}$$

Desta forma o algoritmo de Verlet, para a integração numérica deste sistema de equações diferenciais acopladas é:

$$x_i(t + \Delta\tau) = 2x_i(1 - \Delta\tau^2) - x_i(t - \Delta\tau) + \Delta\tau^2(x_{i-1} + x_{i+1})$$

Onde $i = 1, \dots, 9$ e quando $i = 1$, então $i - 1 = 9$ e quando $i = 9$, então $i + 1 = 1$, uma vez que estas duas massas estão ligadas uma à outra pela haste e molas.

Os deslocamentos da terceira massa em função do tempo, para os diversos valores de n são apresentados nas figuras 1.

As frequências de vibração são:

$$0, \quad 0.1125, \quad 0.2075, \quad 0.2775, \quad 0.3175, \quad 0.3175, \quad 0.2775, \quad 0.2075, \quad 0.1125, \quad 0$$

Isto nas unidades naturais do sistema. Para se obter em Hz, há que multiplicar por $\sqrt{\frac{k}{M}}$.

b)

O gráfico de $\omega(n)$ é apresentado na figura 2. De notar que o que é apresentado não é $\omega(n)$ mas sim $\omega(n + 1)$.

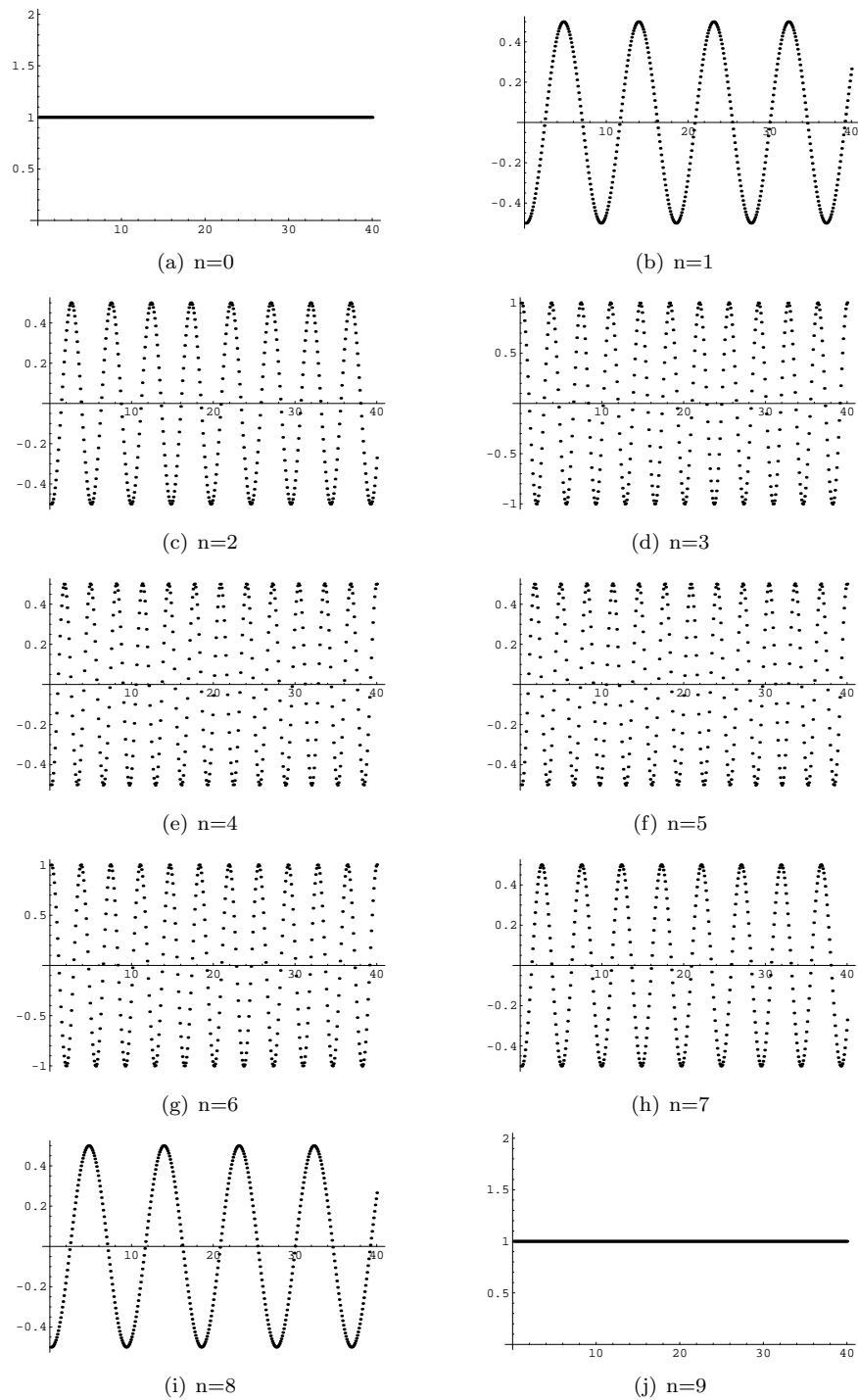


Figura 1: Deslocamento da terceira mola em função do tempo.

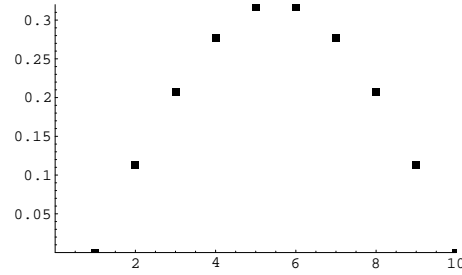


Figura 2: $\omega(n + 1)$.

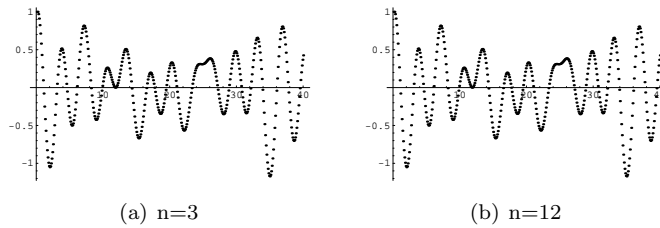


Figura 3: Deslocamentos em função do tempo, da massa 3 sem haste.

c)

O sistema de equações diferenciais acopladas para este sistema é idêntico ao anterior com a exceção para a massa 1 e para a massa 9. Estas ficam:

$$\begin{aligned} M\ddot{x}_1 &= k(x_2 - x_1) \\ M\ddot{x}_9 &= k(x_8 - x_9) \end{aligned}$$

Os gráficos dos deslocamentos, em função do tempo, da terceira massa são apresentados na figura 3.

Exercício 14

a)

Para deslocamentos do tipo $u_n = A \cos(\omega t - qna)$ as energias potencial e cinética são dadas por:

$$\begin{aligned} E_p^{\text{total}} &= \sum_{n=1}^N \frac{1}{2} k u_n^2 \\ &= \frac{1}{2} k A^2 \sum_{n=1}^N \cos^2(\omega t - qna) \\ E_c^{\text{total}} &= \sum_{n=1}^N \frac{1}{2} M \dot{u}_n^2 \\ &= \frac{1}{2} m A^2 \omega^2 \sum_{n=1}^N \sin^2(\omega t - qna) \end{aligned}$$

b)

O valor médio da energia por átomo, média temporal, é dada por:

$$\langle E_{\text{TOT}}^{\text{total}} \rangle = \langle E_{\text{p}}^{\text{total}} \rangle + \langle E_{\text{c}}^{\text{total}} \rangle$$

Mas:

$$\begin{aligned} \langle E_{\text{p}}^{\text{total}} \rangle &= \frac{\int_0^T E_{\text{p}}^{\text{total}} dt}{T} \\ &= \frac{1}{2} kA^2 \sum_{n=1}^N \frac{\omega}{2\pi} \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} \cos^2(\omega t - qna) dt \\ &= \frac{1}{2} kA^2 \sum_{n=1}^N \frac{1}{2} \\ &= \frac{N}{4} kA^2 \end{aligned}$$

E:

$$\begin{aligned} \langle E_{\text{c}}^{\text{total}} \rangle &= \frac{\int E_{\text{c}}^{\text{total}} dt}{T} \\ &= \frac{1}{2} mA^2\omega^2 \sum_{n=1}^N \frac{\omega}{2\pi} \int_0^{\frac{2\pi}{\omega}} \sin^2(\omega t - qna) dt \\ &= \frac{1}{2} mA^2\omega^2 \sum_{n=1}^N \frac{1}{2} \\ &= \frac{N}{4} mA^2\omega^2 \end{aligned}$$

Logo a energia total média é:

$$\langle E_{\text{TOT}}^{\text{total}} \rangle = \frac{N}{4} kA^2 + \frac{N}{4} mA^2\omega^2$$

O valor desta energia média, por átomo é dada por:

$$\frac{\langle E_{\text{TOT}}^{\text{total}} \rangle}{N} = \frac{1}{4} kA^2 + \frac{1}{4} mA^2\omega^2$$

Facilmente se verifica que os dois termos da direita na igualdade são idênticos, pelo que:

$$\frac{\langle E_{\text{TOT}}^{\text{total}} \rangle}{N} = \frac{1}{2} mA^2\omega^2$$