

Campeonato de Física 2021

Vinícius Ferreira

12 de Julho

Problema 2 - Grupo A

Cristalografia e estabilidade

A Cristalografia é o ramo da Física que estuda o comportamento de certos tipos de sólidos muito peculiares, os cristais. Neste problema, será apresentada uma base teórica para um estudo simplificado da estabilidade de cristais.

Para isso, será necessário um estudo sobre sistemas estáveis que se comportam de forma muito semelhante à estrutura molecular dos cristais.

Parte A - Estudando osciladores clássicos

Um sistema que se encontra em equilíbrio é comumente representado pelo balanceamento das forças que atuam em um corpo. Porém, pode-se interpretar sistemas assim por meio da energia mecânica total. Por isso, o estudo feito a seguir será baseado na elaboração da relação entre equilíbrio, força e energia.

- A.1) Para forças conservativas, pode-se expressar a magnitude de uma força F em função da energia potencial U e do deslocamento Δx a partir da relação:

$$F = -\frac{\Delta U}{\Delta x}$$

em que $\frac{\Delta U}{\Delta x}$ é a taxa de variação da energia potencial por deslocamento. Para pequenos deslocamentos unidimensionais na direção da força, considere-se que a força é constante durante esse pequeno intervalo. Considerando esse regime, **demonstre** a equação acima.

A.2) Movimentos Harmônicos Simples (MHS) são exemplos de sistemas conservativos, cuja energia potencial é conhecida e da forma:

$$U = \frac{kx^2}{2}$$

em que k é uma constante análoga à constante de mola em um sistema massa-mola e x é o análogo à deformação da mola, ou seja, a posição em relação ao equilíbrio. Para esse tipo de potencial, **demonstre** que a força pode ser escrita como:

$$F = -kx$$

ao considerar que a energia potencial varia ΔU quando a distância vai de x até $x + \Delta x$, em que Δx é muito pequeno ($\Delta x \ll x$). Como aproximação, despreze termos de ordem maior ou igual a $(\Delta x)^2$, utilizando a aproximação binomial $(1 + \frac{\Delta x}{x})^n \approx 1 + n\frac{\Delta x}{x}$ para $\frac{\Delta x}{x} \ll 1$.

A.3) **Demonstre** que uma pequena perturbação Δv ($\Delta v \ll v$) na velocidade de um sistema inicialmente com velocidade v corresponde a uma variação da energia cinética:

$$\Delta K = mv\Delta v$$

em que m é a massa do sistema.

A.4) Utilizando as equações demonstradas acima e as equações que relacionam posição x , velocidade v e aceleração a em um MHS, **demonstre** que, ao aplicar uma pequena perturbação $\Delta v \approx a\Delta t$ na velocidade durante um curto intervalo de tempo Δt em que o sistema percorre $\Delta x \approx v\Delta t$, a energia mecânica total não varia ($\Delta E = \Delta U + \Delta K = 0$). Vale ressaltar que, em um MHS, a frequência angular de oscilação vale $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$.

Ao perceber que $\Delta E = 0$ para pequenas perturbações no sistema, pode-se dizer que o sistema é estável. Assim, para verificar se um sistema é estável por meio da sua energia, é preciso garantir que a energia total permanece constante mesmo sob pequenas perturbações.

Parte B - Estabilidade de cristais

O formato de equilíbrio de corpos em gravidade zero é determinado pelo mínimo de sua energia superficial. Assim, por exemplo, o formato de equilíbrio de uma gota de água no espaço acaba sendo esférico, já que a esfera tem a menor área de superfície entre corpos do mesmo volume.

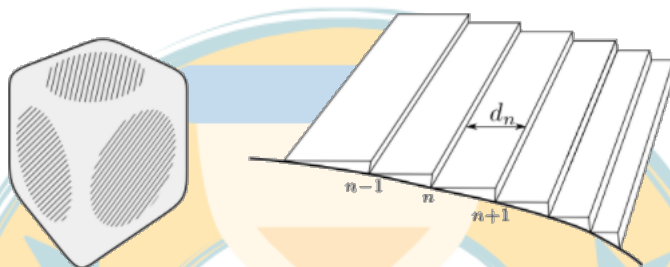
Sob baixas temperaturas, a forma dos cristais consiste em faces planas e vértices curvos conforme mostra a figura a seguir. Essas quinas curvas são, na verdade, em forma de degraus microscópicos que, por serem muito pequenos, parecem ser apenas curvos a olho nu. Esse formato de degraus de escada é regido pela equação:

$$d_n = d_1 \cdot n^{-1/3}$$

em que n é o número respectivo ao n -ésimo degrau, d_n é o comprimento desse degrau (veja a figura) e d_1 é o comprimento do primeiro degrau ($n = 1$). Esse formato de escada é consequência da energia de interação entre degraus adjacentes, que pode ser expressa pela equação:

$$E(d) = \mu \cdot d^\nu$$

e depende apenas da distância entre os degraus elevada a uma potência ν e da constante μ . Isso significa que um degrau n interage com os degraus adjacentes $n - 1$ e $n + 1$, resultando em uma energia $E_n = E(d_{n-1}) + E(d_n) = \mu d_{n-1}^\nu + \mu d_n^\nu$.



A imagem da esquerda retrata a visão macroscópica e a da direita, a visão microscópica de uma quina do cristal

- B.1) Encontre** o valor numérico do expoente ν que torna o cristal descrito acima estável sob uma pequena perturbação Δd na posição do n -ésimo degrau sem mudar o volume total do cristal. Faça aproximações binomiais, $(1 + x)^n \approx 1 + nx$ para qualquer $x \ll 1$, considerando $n \gg 1$ e $\Delta d \ll d_n$ e d_{n-1} .
- B.2) Determine** a força F de interação entre degraus adjacentes em função de μ e d_1 .
- B.3)** Sabendo o valor da força F , considere uma perturbação na estrutura do cristal que faz com que a base do tamanho dos degraus varie de d_1 para $d_1 + \Delta d_1$, em que $\Delta d_1 \ll d_1$. Desconsiderando o termo constante, surge um termo análogo à força restauradora que gera um MHS ($F = -k\Delta d_1$) ao fazer as devidas aproximações binomiais. **Encontre** a constante k e a frequência angular de vibração ω do cristal em função de μ , d_1 e da massa m de cada degrau.

Ao determinar ω , você estará encontrando uma expressão para o quanto as moléculas de um cristal vibram naturalmente entre si dependendo das características do cristal (μ e d_1), o que é essencial para a Cristalografia.