Este texto é parte integrante do texto do curso "Introdução Física Quântica de Materiais" que ministro no Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia dos Materiais.

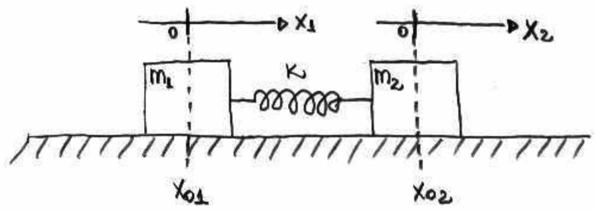
A seção 1.2.1 apresenta um problema simples em que mostro de modo didático o aparecimento de um problema de autovalores e autovetores.

Para quem não se recorda do tratamento completo do sistema massa-mola, após esta seção, reproduzo aquela que seria uma seção anterior.

## 1.2. Sistemas massa-mola acoplados.

### 1.2.1. Duas massas e uma mola.

[C] Veremos agora um tópico um pouco mais complexo, no qual teremos 2 massas $m_1$ e $m_2$ acopladas por uma mola de constante k. A principal questão é escrever corretamente as equações de movimento para cada um dos blocos. A seguir supomos que a solução é do tipo harmônica e resolvemos o sistema de equações resultante em busca das freqüências de vibração do sistema.




Como o movimento é unidimensional, podemos abandonar a notação vetorial e escrever:

$$F_1 = -k.(x_1 - x_2),$$
$$F_2 = -k.(x_2 - x_1).$$

Ou:

$$m_1.\ddot{x}_1 = -k.(x_1 - x_2),$$
$$m_2.\ddot{x}_2 = -k.(x_2 - x_1).$$

Ou:

$$\ddot{x}_1 = -(k/m_1).(x_1 - x_2), \quad (1)$$
$$\ddot{x}_2 = -(k/m_2).(x_2 - x_1). \quad (2)$$

Agora supomos:

$$x_1 = A_1.sen(\omega t) + B_1.cos(\omega t),$$

$x_2 = A_2.sen(\omega t) + B_2.cos(\omega t).$

Calculamos as derivadas em $x_1$:

$$\dot{x}_1 = A_1.\omega.cos(\omega t) - B_1.\omega.sen(\omega t),$$
$$\ddot{x}_1 = -A_1.\omega^2.sen(\omega t) - B_1.\omega^2.cos(\omega t).$$

Como pode-se ver:

$$\ddot{x}_1 = -\omega^2.x_1. \qquad (3)$$

O mesmo procedimento para $x_2$ leva a:

$$\ddot{x}_2 = -\omega^2.\,x_2. \qquad (4)$$

Substituindo (3) e (4) em (1) e (2), chegamos a:

$$-\omega^2.x_1 + (k/m_1).(x_1 - x_2) = 0,$$
$$-\omega^2.x_2 + (k/m_2).(x_2 - x_1) = 0.$$

Para simplificar a escrita definimos:

$$l = \omega^2,$$
$$b_1 = k/m_1,$$
$$b_2 = k/m_2.$$

Assim, ficamos com:

$$-l.x_1 + b_1.x_1 - b_1.\,x_2 = 0,$$
$$-l.x_2 + b_2.x_2 - b_2.x_1 = 0.$$

Ou:

$$\begin{array}{lll} (b_1 - l).x_1 & -\,b_1\,.x_2 & = 0, \\ -b_2.x_1 & +(b_2 - l).x_2 & = 0. \end{array}$$

Vemos que temos um sistema de equações algébricas para resolver, sendo que temos como incógnitas $l, x_1$ e $x_2$. Ou seja, duas equações para três incógnitas, o que normalmente implicaria que seria impossível de obter a solução para o problema. Veremos que, de fato, existe uma solução possível.

Podemos ver as duas equações acima como sendo linhas de uma equação matricial:

$$\begin{bmatrix} (b_1 - l)x_1 & -b_1.x_2 \\ -b_{2.}.x_1 & (b_2 - l)x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \tilde{0}$$

sendo que $\tilde{0}$ é a matriz nula. Ou então como o produto de duas matrizes:

$$\begin{bmatrix} (b_1 - l) & -b_1 \\ -b_2 & (b_2 - l) \end{bmatrix} . \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \tilde{0}$$

Ou ainda como:

$$\left\{ \begin{bmatrix} b_1 & -b_1 \\ -b_2 & b_2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} l & 0 \\ 0 & l \end{bmatrix} \right\} . \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \tilde{0}$$

Usando notação de matrizes:

$$(\tilde{D} - \tilde{I}\,l).\tilde{X} = \tilde{0}\,,$$

sendo que a matriz dinâmica $\tilde{D}$ contém toda a informação sobre a dinâmica do problema e a matriz vetor $\tilde{X}$ simplesmente representa a matriz com os deslocamentos.

Este tipo de sistema de equações é tão comum, que é chamado de "problema de **AUTOVALORES E AUTOVETORES**". No nosso caso, os autovalores seriam as freqüências a serem calculadas e os autovetores seriam os vetores, ou conjuntos, de deslocamentos relativos associados a cada um dos autovalores. O problema admite uma solução não-trivial se, e somente se, o determinante da matriz $(\tilde{D} - \tilde{I}\,l)$ for igual a zero. Assim:

$$\left| \tilde{D} - \tilde{I}\,l \right| = 0$$

$$\begin{vmatrix} b_1 - l & -b_1 \\ -b_2 & b_2 - l \end{vmatrix} = 0$$

$$(b_1 - l)(b_2 - l) - b_1 . b_2 = 0$$

$$l^2 - l.(b_2 + b_1) = 0$$

As raízes são dadas por:

$$l = \frac{+(b_1 + b_2) \pm \sqrt{(b_1 + b_2)^2 - 0}}{2}$$

É fácil ver que as raízes são:

$l' = 0,$
$l'' = (b_1 + b_2).$

Ou seja:

$\omega' = 0,$

$\omega'' = (b_1 + b_2)^{1/2}.$

Tomamos somente as raízes positivas para ω pois esta é uma grandeza definida positiva. Substituindo os valores de $b_1$ e $b_2$, teremos o valor de ω":

$$\omega'' = \sqrt{\frac{(m_1 + m_2)k}{m_1 m_2}}\ .$$

Como pode-se ver, trata-se, em unidades, de uma raiz quadrada da razão de uma constante de mola por uma massa, tal como tínhamos no sistema uma massa-uma mola.

Uma vez que já calculamos os autovalores, passemos para o cálculo dos autovetores, ou conjuntos de deslocamentos, do sistema. Isto deve ser feito para cada autovalor: volta-se para aquela equação matricial na qual *l* era uma incógnita, substituí-se o valor apropriado de *l* e resolve-se o sistema de equações assim gerado. Assim:

*l = 0:*

$$\begin{bmatrix} b_1 & -b_1 \\ -b_{2.} & b_2 \end{bmatrix} . \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \bar{0}\,,$$

ou:

$$b_1 .x_1 - b_1 .x_2 = 0,$$
$$-b_2 .x_1 + b_2 .x_2 = 0.$$

Somando as duas equações acima, teremos:

$$(b_1 - b_2)x_1 - (b_1 - b_2)x_2 = 0,$$

ou:

$$x_1 = x_2.$$

Ou seja: para ω = 0, ambas as coordenadas são iguais o tempo todo. Se um bloco se move de +δ, o outro também se move de +δ. Pelo sistema de coordenadas que adotamos, isto implica que os dois se movem sempre no mesmo sentido, pois para os dois eixos ($x_1$ e $x_2$) o sentido positivo aponta para a direita.

Interpretação do resultado: Que ambas as coordenadas teriam que ser iguais, isto já poderia ser esperado. A freqüência nula implica que não há vibração nenhuma e, portanto, as massas deveriam estar sempre em repouso. Por outro lado, se as duas massas vibrarem ao redor das suas posições de equilíbrio, ou se transladarem, **uniformemente** (isto é possível, uma vez que elas estão livres), de tal modo que os valores das coordenadas sejam sempre iguais, a mola não é nem comprimida nem esticada. Logo, ela não pode fazer com que haja vibração das massas. Se alguma houver, não provém desta mola.

*$l = b_1 + b_2$:*

$$\begin{bmatrix} b_1 - (b_1 + b_2) & -b_1 \\ -b_{2.} & b_2 - (b_1 + b_2) \end{bmatrix} . \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \bar{0},$$

$$\begin{bmatrix} -b_2 & -b_1 \\ -b_2 & -b_1 \end{bmatrix} . \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \bar{0},$$

$$-b_2\, x_1 - b_1\, x_2 = 0,$$
$$-b_2\, x_1 - b_1\, x_2 = 0.$$

Somando as duas equações:

$$-2\, b_2\, x_1 - 2\, b_1\, x_2 = 0,$$
$$x_1 = -(b_1 / b_2)\, x_2,,$$

Substituindo $b_1$ e $b_2$ :

$$x_1 = -\, (m_2 / m_1)\, x_2 \, .$$

Ou seja, para $\omega'' = \sqrt{\dfrac{(m_1 + m_2)k}{m_1 m_2}}$, as duas massas vibram em "oposição de fase" (uma contra a outra). Note que se $m_1 = m_2$ , os movimentos opostos se tornam claríssimos, pois então teremos $x_1 = -x_2$ .

<u>Interpretação do resultado</u>: este é na realidade o único modo de vibração que podemos esperar para este sistema. Se pensarmos em como iniciar qualquer movimento, qualquer opção vai nos levar a uma vibração em oposição de fase das massas.

[C] Note que a solução encontrada para o problema até o momento, sem aplicar as condições iniciais, não nos permite determinar exatamente a equação de movimento para cada massa.

[C] Com o cálculo dos autovalores e autovetores do sistema, damos por encerrados os cálculos para este sistema. Não calcularemos as constantes $A_1$, $A_2$, $B_1$ e $B_2$ pelo motivo que, num sistema como este, é mais interessante conhecer os autovalores e autovetores do que propriamente as amplitudes do movimento. Estes modelos são bastante utilizados no estudo simples de moléculas, nos quais não há como determinar as condições iniciais (que são necessárias para determinar as constantes). Por outro lado, há como determinar se as vibrações estão em fase ou não. Ou seja, o cálculo se restringe àquilo que consideramos importante conhecer.

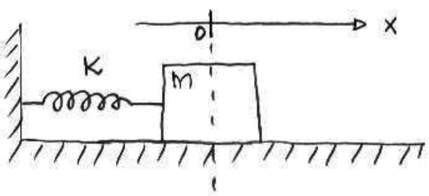
[C] Este método de solução dá, de fato, as equações de movimento do sistema. Se tivermos as condições iniciais, podemos determinar completamente as equações de movimento para qualquer uma das massas.

## 1.1. O sistema massa-mola

[C] Nesta seção, estudaremos a dinâmica (ou seja, as equações de movimento e suas soluções) de um sistema composto de um bloco de massa *m*, que desliza sem atrito sobre uma superfície plana horizontal, presa a uma parede através de uma mola. Esta mola possui suas características físicas determinadas por uma constante *k* de tal modo que a força que atua sobre o bloco, quando este se desloca de algum modo de sua posição de equilíbrio, será:

$$\vec{F} = -k \, . \, \vec{x} \; . \qquad (1)$$

Vemos que a força é contrária ao deslocamento: se este aponta para a direita, a força aponta para a esquerda. Ou seja, a força que a mola exerce sobre o bloco é “restauradora”: tende sempre a restaurar, trazer o bloco de volta para a sua posição de equilíbrio.




A constante *k* pode ser facilmente determinada em laboratório e depende do material do qual é feito a mola e das característica geométricas desta (número de espiras, raio das espiras, Tc...).

Como o movimento se dá numa única direção, podemos abandonar a notação vetorial se convencionarmos que valores positivos de grandezas vetoriais indicam que o vetor aponta para a direção positiva do eixo x (veja a figura acima) e que valores negativos apontam para a esquerda. Assim, podemos escrever:

$$F = -k.x \; . \qquad (2)$$

Se na figura acima o bloco se encontra em repouso, vemos que colocamos o centro de massa deste na origem do eixo x. Isto define a posição de equilíbrio do bloco em $x=0$ e é coerente com a equação acima. Caso a posição de equilíbrio fosse diferente de $x=0$, digamos, $x=x_0$ , a equação acima ficaria $F=-k(x-x_0)$.

Vemos então que para $x=+d$, que é um deslocamento para a direita, teremos uma força $F=-kd$ , que é uma força que aponta para a esquerda. E vice-versa.

A equação acima descreve a situação física. A questão agora é saber calcular a posição do bloco em função do tempo. Por exemplo: se puxarmos o bloco de tal modo que a sua posição seja $x=x_0$ em $t=0$ e o largamos, como poderemos predizer a sua posição em função do tempo?

Comecemos pela equação fundamental:

$$F = m.a = m\frac{d^2x}{dt^2} \ . \qquad (3)$$

Juntando (2) e (3), teremos:

$$m.\frac{d^2x}{dt^2} = -k.x$$

ou

$$\frac{d^2x}{dt^2} = -\frac{k}{m}.x \ . \qquad (4)$$

Esta é uma equação diferencial, para a qual procuramos uma solução. Vemos que temos na equação: $x$ como a variável dependente, $t$ a variável independente e $k$ e $m$ são constantes. Equações diferenciais não possuem um método único de solução; na realidade, a solução de equações diferenciais complexas é quase uma arte. Esta, no entanto, é uma das mais simples, e a solução mais geral é dada por:

$$x(t) = A\cos(\omega t - \phi) \ . \qquad (5)$$

sendo que A (a amplitude das oscilações) e $\phi$ (o ângulo de fase) dependem das condições iniciais e $\omega$ (a freqüência angular) depende das características do sistema, como veremos abaixo.

A solução matemática do problema deve corresponder à situação física. E o que espera-se é que, de algum modo, a solução $x(t)$ seja oscilatória. Ou seja, periodicamente o bloco volta a ocupar uma mesma posição sobre o eixo x. E a função coseno realmente reflete isto, pois varia entre um máximo e um mínimo, sempre passando pelo valor zero (que corresponderia à posição de equilíbrio) e sempre descrevendo o mesmo ciclo de valores.

A amplitude $A$ é o máximo deslocamento que o bloco pode ter. Pois a função coseno vale no máximo +1 e no mínimo -1. Assim as posições extremas que o bloco pode ocupar são $-A$ e $+A$.

A freqüência angular $\omega$ indica o quão rápido ou lento será o movimento. O valor de $\omega$ determina o tempo necessário para a função coseno cumprir um ciclo completo (um "período"): maior $\omega$, menor o período; menor $\omega$, maior o período.

O ângulo de fase $\phi$ serve para ajustar a posição inicial. Por exemplo, se para $t=0$, $x(t=0)=+(A/2)$, temos que $\phi$ deve valer 60 graus, pois:

$$x(0) = +A/2 = A\cos(\omega 0-\phi) = A\cos(-\phi) = A\cos(\phi) \ , \{\text{pois } \cos(-\phi)=\cos(\phi)\},$$

$$\phi = \arccos(1/2),$$

$$\phi = 60^o \ .$$

Nos voltamos agora para a questão de examinar a validade da solução. Isto será feito por substituição direta. Ou seja, calcularemos a segunda derivada em relação ao tempo, substituiremos esta em (4) e observaremos se a igualdade se mantém. Assim:

$$\frac{dx}{dt} = v(t) = -A\omega \operatorname{sen}(\omega t - \phi)\,, \tag{6}$$

$$\frac{d^2x}{dt^2} = a(t) = -A\omega^2 \cos(\omega t - \phi) = -\omega^2 x(t)\,. \tag{7}$$

Substituindo (5) e (7) em (4), teremos:

$$-A\omega^2 \cos(\omega t - \phi) = -\left(\frac{k}{m}\right) A\cos(\omega t - \phi)\,,$$

ou

$$\omega^2 = \left(\frac{k}{m}\right). \tag{8}$$

Ou seja, desde que $\omega^2$ seja dado por *k/m*, a solução (5) é válida. Por definição, a freqüência angular é uma grandeza positiva. Então somente a solução positiva de (8) nos interessa.

Para determinar completamente a solução *x(t)*, falta-nos ainda relacionar as constantes *A* e $\phi$ com as condições iniciais $x_0$ e $v_0$. Ou seja, a posição e a velocidade inicial do bloco para o início do movimento (*t=0*).

$$x_0 = A\cos(\omega.0 - \phi) = A\cos(-\phi) = A\cos(\phi)\,. \tag{9}$$

A partir da eq. (6) sabemos que:

$$v_0 = - A\omega \operatorname{sen}(\omega.0 - \phi) = - A\ \omega \operatorname{sen}(-\phi) = A\ \omega \operatorname{sen}(\phi)\,,$$

pois sen($-\phi$)=-sen($\phi$). Ou:

$$\frac{v_0}{\omega} = A \operatorname{sen}(\phi)\,. \tag{10}$$

Dividindo (10) por (9), teremos:

$$\operatorname{tg}(\phi) = (v_0/(\omega x_0))$$

ou

$$\phi = \operatorname{arctg}(v_0/(\omega x_0))\,. \tag{11}$$

Para determinar *A*, elevamos (9) e (10) ao quadrado e depois somamos as duas equações:

$$x_0^2 + (v_0/\omega)^2 = A^2 \cos^2(\phi) + A^2 \operatorname{sen}^2(\phi).$$

Como $(\cos^2(\phi) + \operatorname{sen}^2(\phi)) = 1$, temos que:

$$A = (x_0^2 + (v_0/\omega)^2)^{1/2}. \qquad (12)$$

Vemos então que a solução $x(t)$ que procurávamos pode ser escrita como:

$$x(t) = (x_0^2 + (v_0/\omega)^2)^{1/2} \cos((k/m)^{1/2}.t - \mathrm{arctg}(v_0/(\omega x_0))). \qquad (13)$$

[C] Usando-se de relações trigonométricas para o coseno da soma de dois ângulos, a solução geral do problema massa-mola pode ser rescrita de outra forma:

$$x(t) = A\cos(\omega t - \phi) = A\,\{\cos(\omega t)\cos(\phi) + \mathrm{sen}(\omega t)\mathrm{sen}(\phi)\},$$

$$x(t) = B\cos(\omega t) + C\,\mathrm{sen}(\omega t), \qquad (14)$$

sendo que

$$B = A\cos(\phi) \quad e \quad C = A\,\mathrm{sen}(\phi).$$

[C] Dadas as equações (5), (6) e (7), observe os seguintes fatos:

1. Quando o bloco encontra-se exatamente sobre a posição de equilíbrio, temos, portanto deslocamento nulo, velocidade máxima e aceleração nula.
2. Quando o bloco se encontra em uma das extremidades de sua oscilação, temos deslocamento máximo (positivo ou negativo), velocidade nula e aceleração máxima.

[D] O período ($\tau$) é definido como o tempo necessário para que o movimento complete um ciclo completo. Logo, para a mesma posição $x_{fixo}$ dois ciclos diferentes, temos que o argumento da função coseno deve diferir de $2\pi$:

$$\omega.(t+\tau)+\phi = \omega t+\phi+2\pi$$

$$\omega\tau = 2\pi$$

$$\tau = \frac{2\pi}{\omega} = \frac{2\pi}{\sqrt{\frac{k}{m}}} = 2\pi\sqrt{\frac{m}{k}}\,. \qquad (15)$$

[C] A freqüência ($f$) de um movimento oscilatório é definido como o número de oscilações completas realizadas em 1 segundo. Logo:

| | | | |
|---|---|---|---|
| | $\tau$ | está para | 1 oscilação |
| como | 1s | está para | $f$. |

Assim:

$$f = 1/\tau\,. \qquad (16)$$

[C] O movimento do bloco no sistema massa-mola sem atrito é conhecido normalmente como “Movimento Harmônico Simples” (MHS). O MHS é um tipo peculiar de movimento, sendo que o objeto em questão oscila ao redor de um ponto de equilíbrio. O movimento é descrito de uma forma elegante, sendo que a posição em função do tempo é descrito por uma simples função trigonométrica. A razão para isto é que a força que atua sobre o objeto é também descrita de uma forma simples ($-k.x$). A solução $x(t)$ se tornaria bem mais complexa se a força não tivesse essa descrição matemática tão simples.

Na natureza, e em particular nos átomos que constituem os materiais, observam-se muitos movimentos oscilatórios. O que acontece, porém, é que quase sempre, a força que atua entre os corpos não possui uma forma muito simples. Poderia, por exemplo, ter a forma $-k.x+(k/100).x^2$. Apesar do termo em $x^2$ ter um peso 100 vezes menor que o termo linear em $x$, a solução formal do problema é bem diferente. Então, quando percebe-se que não se incorrerá em erro grave, costuma-se adotar uma solução aproximada para a situação, desprezando-se todos os outros termos que não aquele linear em $x$. A esta aproximação dá-se o nome de “aproximação harmônica”.