

que é igual a $k \cos \omega t$. A força resultante, F , será tal que:

$$F^2 = F_1^2 + F_2^2 = k^2 (\sin^2 \omega t + \cos^2 \omega t) = k^2$$

ou seja $F = k$. O feixe submetido a esta força de valor constante desenha, no alvo do osciloscópio, uma circunferência que aparece deformada em virtude das diferentes sensibilidades dos desvios provocados por cada par de placas. Os valores escolhidos, na experiência, para a resistência e a capacidade utilizadas, são os que permitem uma figura mais próxima da circunferência no modelo *MAE*, com 3 a 4 cm de diâmetro⁽⁵⁾.

6.3. Tensões alternadas, de iguais frequências e amplitudes, desfasadas de 180°.

Para conseguir o desfasamento de 180° bastará ligar os terminais da fonte de tensão alternada às placas *XX*, e os

⁽⁵⁾ Não obtivemos resultados satisfatórios com o modelo *Phywe*.

mesmos terminais, mas invertidos, às placas *YY*, podendo-se dispensar uma das ligações à terra. Convém intercalar uma resistência elevada, por exemplo $1 \text{ M}\Omega$, no troço que se liga à terra. A figura 25 representa um possível esquema de montagem.

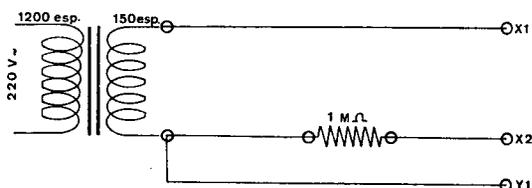


Fig. 25 — Aplicação, às placas do osciloscópio, de duas tensões alternadas sinusoidais, desfasadas de 180° entre si.

O sinal obtido no alvo será, teoricamente, um segmento de recta com a direcção da bissectriz dos quadrantes 2 e 4. Na realidade obtém-se um anel longo e mais ou menos fechado.

Calores molares do alumínio, chumbo e cálcio, calculados a partir de dados de experiências neutrónicas

por JOSÉ F. SALGADO

(Laboratório de Física e Engenharia Nucleares)

1. Contribuição das vibrações térmicas das redes cristalinas para os calores molares dos sólidos

Os átomos constituintes de um cristal executam vibrações térmicas em torno de posições de equilíbrio. Estes movimentos podem ser tratados, em primeira aproximação, como vibratórios harmónicos — admite-se que a força a que fica sujeito um átomo é proporcional ao afas-

tamento em relação à posição de equilíbrio [9] — de modo que, sob o ponto de vista dinâmico, um cristal contendo N átomos⁽¹⁾ pode ser interpretado como um conjunto de $3N$ osciladores harmónicos lineares e independentes [1, 2]. Cada oscilador é caracterizado por um vector de

⁽¹⁾ No que se segue considera-se sempre que nos referimos à molécula-grama, sendo, por isso, N o número de Avogadro.

onda \vec{q} (sendo $|\vec{q}| = 2\pi/\lambda$, onde λ é o comprimento de onda), uma frequência angular $\omega_s(\vec{q})$ e um índice de polarização s . Nas redes de Bravais — um só átomo em cada célula primitiva, por exemplo, chumbo, alumínio, cálcio — $s=1, 2, 3$, isto é, podemos distinguir 3 ramos, dois transversais e um longitudinal. Num cristal mais complexo, com r átomos na célula primitiva (NaCl tem $r=2$), haverá $3r$ ramos: 3 deles correspondem aos ramos das redes de Bravais — são ramos acústicos — e os $3(r-1)$ restantes constituem os ramos ópticos. Os ramos acústicos são os responsáveis pela propagação do som nos cristais e os ópticos pela absorção da luz.

Como N é muito grande, designemos por $g(\omega)d\omega$ o número de vibrações normais (fonões) contidas no intervalo $(\omega, \omega+d\omega)$; $g(\omega)$ é a função de distribuição de fonões ou densidade de estados. O conjunto dos valores das frequências estende-se desde zero até um valor máximo, ω_{\max} , que caracteriza a estrutura considerada. Como o número total de vibrações é $3N$ vem:

$$(1) \quad \int_0^{\omega_{\max}} g(\omega) d\omega = 3N.$$

A cada oscilador de frequência angular ω , corresponde, à temperatura T , uma energia média:

$$\langle E_\omega \rangle_T = \hbar\omega \left[\frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/K_B T) - 1} \right] + E_0,$$

em que \hbar é a constante de Planck, K_B a constante de Boltzmann e E_0 a energia no ponto $T=0$. Em cálculos termodinâmicos, esta constante aditiva tem pouco significado e a energia pode ser medida a partir de E_0 ; por isso, vamos reter, simplesmente:

$$(2) \quad \langle E_\omega \rangle_T = \hbar\omega \left[\frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/K_B T) - 1} \right].$$

Teremos, então, para a energia total do sistema:

$$(3) \quad E = \int_0^{\omega_{\max}} d\omega g(\omega) \langle E_\omega \rangle_T = \int_0^{\omega_{\max}} d\omega \frac{\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega/K_B T) - 1} g(\omega).$$

O calor molar a volume constante define-se como a derivada parcial de E em ordem a T . Por isso:

$$(4) \quad C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_V = \int_0^{\omega_{\max}} d\omega \left(\frac{\hbar\omega}{K_B T} \right)^2 \cdot K_B \frac{\exp(\hbar\omega/K_B T)}{[\exp(\hbar\omega/K_B T) - 1]^2} g(\omega).$$

O cálculo de C_V fica, assim, dependente do conhecimento da função de distribuição de fonões. Vários modelos têm sido propostos que se aproximam mais ou menos da realidade. No modelo de Einstein [9] admite-se que todos os átomos vibram independentemente uns dos outros e com a mesma frequência angular ω_E . Nestas condições, $g_E(\omega) = 3N\delta(\omega - \omega_E)$, em que δ é a função de Dirac.

Na aproximação de Debye, aplicável a sólidos monoatômicos, pressupõe-se que a estrutura cristalina pode ser tratada como um meio elástico, isotrópico e contínuo, tendo $3N$ graus de liberdade; o espectro de frequência estende-se desde zero até um valor limite, ω_D , característico da substância, dependente da velocidade de propagação do som no meio e

determinado de modo a satisfazer (1). Segundo este modelo:

$$g_D(\omega) = \begin{cases} \frac{9N}{\omega_D^3} \omega^2, & \omega \leq \omega_D \\ 0, & \omega > \omega_D. \end{cases}$$

É possível mostrar que o modelo de Debye constitui uma aproximação do comportamento dos ramos acústicos, enquanto que o modelo de Einstein pode representar os ramos ópticos.

A função de distribuição de fonões pode ainda ser calculada a partir das constantes elásticas dos cristais, utilizando modelos teóricos para as forças de interacção entre os átomos.

de interacção dos neutrões de baixa energia cinética (da ordem do meV) com os sólidos.

Consideremos um feixe monoenergético de neutrões incidindo sobre a amostra cristalina. Os neutrões [3], na interacção com os núcleos atómicos, «sentem» o seu estado vibratório, havendo trocas de energia e de momento linear com os fonões. Nestas condições, o espectro disperso inelástico de neutrões reflecte as propriedades dinâmicas da estrutura cristalina, permitindo determinar $g(\omega)$.

A figura 1 representa um espectro disperso de neutrões que incidiram numa amostra policristalina de chumbo, obtido no Centro Nuclear de Karlsruhe [4], uti-

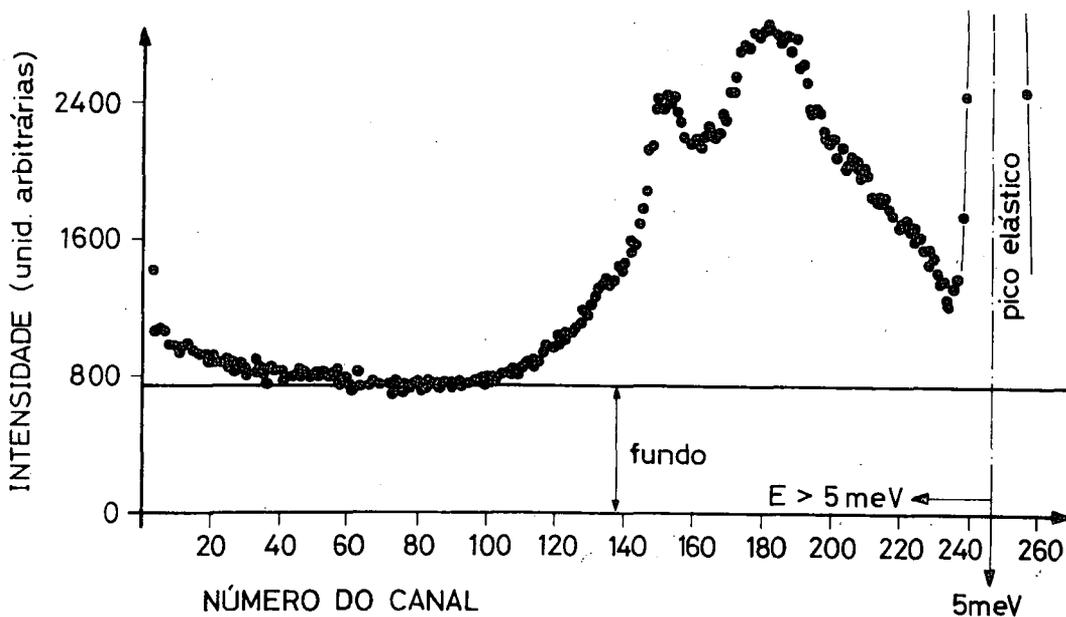


Fig. 1 — Espectro de tempo-de-voo de neutrões monoenergéticos dispersos inelásticamente numa amostra policristalina de chumbo.

2. Calores específicos do alumínio, chumbo e cálcio, calculados a partir de dados de experiências neutrónicas

Um método eficaz para determinar experimentalmente as funções de distribuição de fonões fundamenta-se nos dados

lizando um feixe pulsado de neutrões ($E_0 \sim 5 meV$) e a técnica de tempo de voo. À esquerda do pico elástico, nota-se o espectro inelástico. Neste caso, os neutrões ganharam energia na interacção, correspondendo à aniquilação de fonões.

A partir das curvas de distribuição

de fonões determinadas para o *Al*, *Pb* e *Ca* [4], calculou-se através de (4) os calores molares destes elementos a diferentes temperaturas. As curvas das figuras 2, 3 e 4 representam os resultados obtidos.

Com elas compararam-se os valores experimentais obtidos por medições calorimétricas. Convém frizar que a grandeza experimentalmente medida é o calor molar a pressão constante, C_p , tendo sido

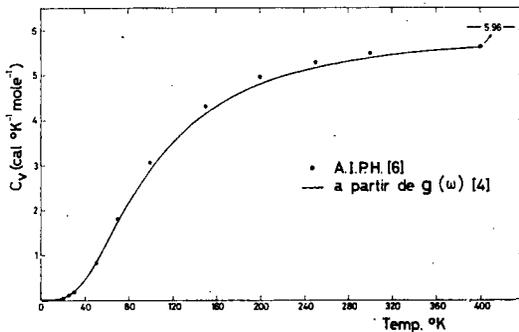


Fig. 2 — Calor molar do alumínio em função da temperatura.

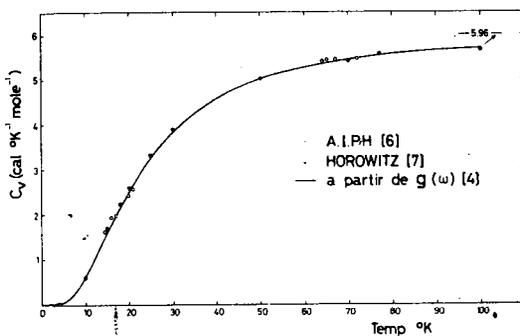


Fig. 3 — Calor molar do chumbo em função da temperatura.

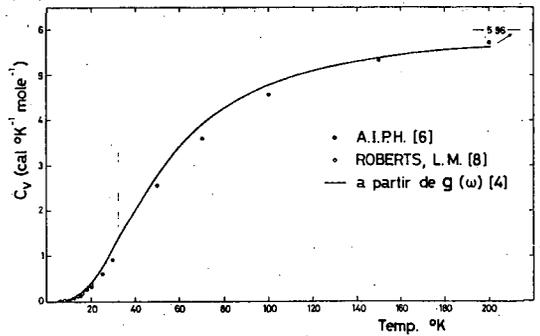


Fig. 4 — Calor molar do cálcio em função da temperatura.

estes valores convertidos para C_v e corrigidos da contribuição electrónica [5].

O acordo entre os valores experimentais e calculados é bastante satisfatório.

BIBLIOGRAFIA

- [1] I. I. GUREVICH, L. V. TARASOV, *Low-energy Neutron Physics*, North-Holland Publishing Co., Amsterdam (1968).
- [2] C. KITTEL, *Introduction to Solid State Physics*, John Wiley & Sons, (4.^a ed.) (1971).
- [3] F. CARVALHO, *Gazeta de Fisica*, V, 1, 20 (1970); *Gazeta de Fisica*, V, 3, 82 (1971).
- [4] F. GOMPF, H. LAU, W. REICHARDT, J. SALGADO, *Studies on the Determination of the Phonon Density of States*, trabalho apresentado no V Simpósio da AIEA sobre «Dispersão inelástica de neutrões», Grenoble (1972).
- [5] K. A. GSCHNEIDER, JR., *Solid State Phys.*, **16**, 275 (1964).
- [6] *American Institut of Physics Handbook*, McGraw-Hill Book Company (2.^a ed.) (1963).
- [7] M. HOROWITZ, A. A. SILVIDI, S. F. MALAKER, J. G. DAUNT, *Phys. Rev.* **88**, 5, 1182 (1952).
- [8] L. M. ROBERTS, *Proc. Phys. Soc.* **70B**, 738 (1957).
- [9] J. A. BESSA M. SOUSA, *Gazeta de Fisica*, V, 5, 158 (1972).