

Física 1 – Ciências Moleculares

Caetano R. Miranda **AULA 16 – 08/11/2023**

crmiranda@usp.br



sampa



Sugestão a ser implementada

DATA	aula nº	Segundas (14:00h - 15:45h) - Sala Turma 33	DATA	aula nº	Quartas (14:00h - 15:45h) - Sala Turma 33	DATA	aula nº	Quintas (14:00h - 15:45h) - Sala Turma 33	
21/08	1	Apresentação do Curso	23/08	2	Experimentação 1 - Escalas	24/08	3	Escalas	
28/08	4	Experimentação 2 - Mov. em 1 D	30/08	5	Mov. em 1D	31/08	6	Mov. em 1D	
04/09			06/08			07/09		SEMANA TRABALHO	
11/09	7	Mov. em 1D	13/09	8	Mov. em 1D	14/09	9	Experimentação 3 - VR & Projéteis	ENTREGA 1
18/09	10	Mov. em 2D e 3D	20/09	11	Mov. em 2D e 3D	21/09		Paralisação	
25/09		Paralisação	27/09		Paralisação	28/09		Paralisação	
02/10		Paralisação	04/10		Paralisação	05/10		Paralisação	
09/10		Paralisação	11/10		Paralisação	12/10		FERIADO - N. S. Aparecida	
16/10		Paralisação	18/10		Paralisação	19/10		Paralisação	
23/10	12	Discussao - revisao	25/10	13	Mov. em 2D e 3D	26/10	14	Experimentação 4a - Dinâmica & Principia	
30/10	15	Princípios da Dinâmica - Leis de Newton	01/11	16	Experimentação 5 - Energia e Trabalho	02/11		FERIADO - FINADOS	
06/11	17	PROVA I	08/11	18	Simetria e Conservação	09/11	19	Simetria e Conservação	ENTREGA 2
13/11	20	Experimentação 6 - Física dos Desenhos Animados	15/11		FERIADO - Republica	16/11	21	Experimentação 8 - VR / Sonificação	
20/11		FERIADO - Consciência Negra	22/11	22	Colisões	23/11	23	Experimentação 7 - Colisões	
27/11	24	Forças de Interação - Sala Invertida	29/11	25	Forças de Interação	30/11	26	PROVA II	ENTREGA 3
04/12	27	Experimentação 9 - Aprendizado de Máquina	06/12	28	Experimentação 9 - Aprendizado de Máquina	07/12	29	Física dos Esportes e Parques de Diversão	
11/12	30	Rotação e Momento Angular	13/12	31	Rotação e Momento Angular	14/12	32	Experimentação 10 - Dança e Robótica	
18/12	33	Forças Inerciais	20/12	34	Forças Inerciais	21/12		PROVA - SUB - VISTA	ENTREGA 4

Primeira Lei de Newton - Lei da Inércia:

Lei I. Todo corpo permanece em repouso ou em movimento retilíneo e uniforme, a menos que seja obrigado a modificar seu estado pela ação de forças impressas sobre ele

Segunda Lei de Newton

Princípio Fundamental da Dinâmica:

Lei II. A modificação do movimento é proporcional à força motriz atuante e ocorre na direção retilínea em que a força é impressa.

Terceira Lei de Newton - Princípio da Ação e Reação:

Lei III. As forças sempre ocorrem aos pares. Se o corpo A exerce uma força sobre o corpo B, o corpo B exerce uma força igual e contrária sobre o corpo A.

Corolário I. As forças obedecem à regra do paralelogramo, ou seja, as forças são vetores.

LEIS DE NEWTON

- Discussão da descrição de movimentos
 - sem determinação do tipo de movimento



problema fundamental da dinâmica

- Movimento \Rightarrow afetado pela ação de forças
 - colocar objetos em movimento
 - alterar seu estado de movimento
- Força \Rightarrow produz efeitos diferentes conforme a direção e sentido em que é aplicada \Rightarrow representação vetorial!
- Partícula em repouso em relação a um referencial \Rightarrow equilíbrio nesse referencial



Agitações moleculares

Supondo um corpo em **movimento**:

- O corpo pode variar sua velocidade → **acelerando**.
- Comportamento → **interação** desse corpo com a vizinhança.

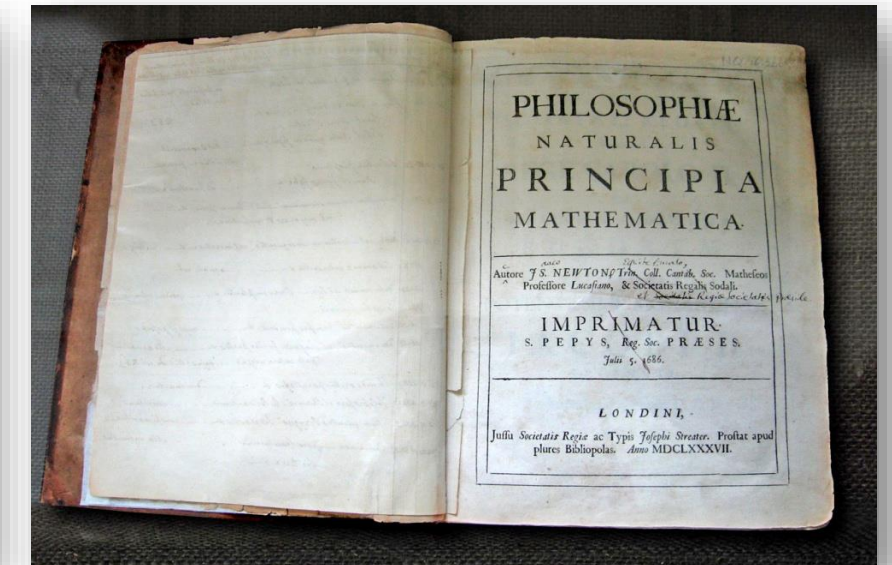
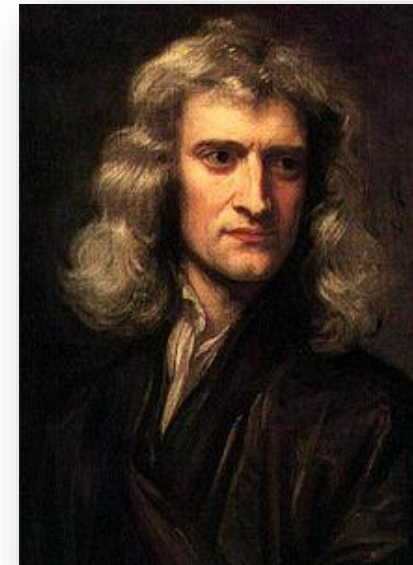


- (1) Conhecemos as **características** desse corpo (massa, volume, carga elétrica);
 - (2) Sabemos a **localização** e as **propriedades** de todos objetos de interesse que estejam nas proximidades (tudo sobre o meio onde o corpo está);
 - (3) Desejamos saber como o corpo vai se **mover**.
-

Isaac Newton

Contribuições:

- Fundamentos da Mecânica;
 - Lei da Gravitação;
 - Cálculo Diferencial;
 - Óptica.
- **1687**: formulou três leis do movimento no tratado **“Os Princípios Matemáticos da Filosofia Natural”**.



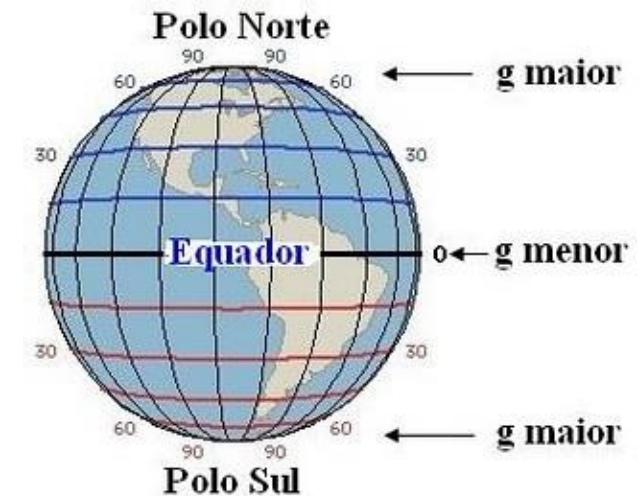
A **mecânica clássica** (newtoniana) não fornece resultados precisos se as velocidades envolvidas forem próximas da velocidade da luz.

Exemplos de Aplicação da 2ª Lei

Força Peso

- Atrai o corpo para o objeto astronômico mais próximo (Terra);
- Força da **aceleração da gravidade**;
- Maior ao nível do mar → diminui com a altitude.

$$\vec{P} = m \vec{g}$$

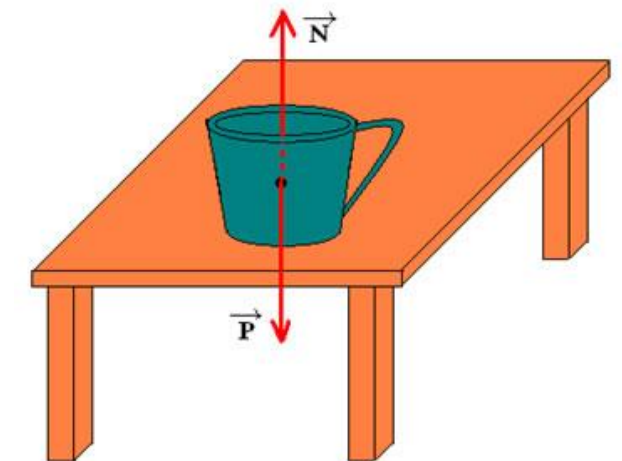


Força Normal

- **C**orpo sobre uma superfície → força **perpendicular** a esta → força normal.

$$\Sigma F_y = N - P = N - mg = ma_y$$

N e P não são forças de ação e reação!!! $a = 0 \quad N = mg$

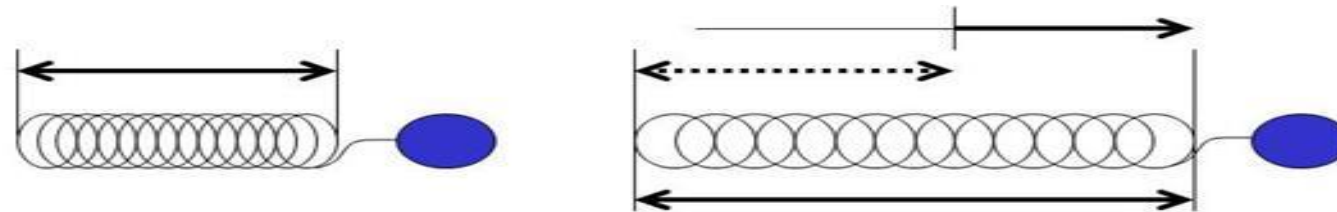


Exemplos de Aplicação da 2ª Lei

Força Elástica

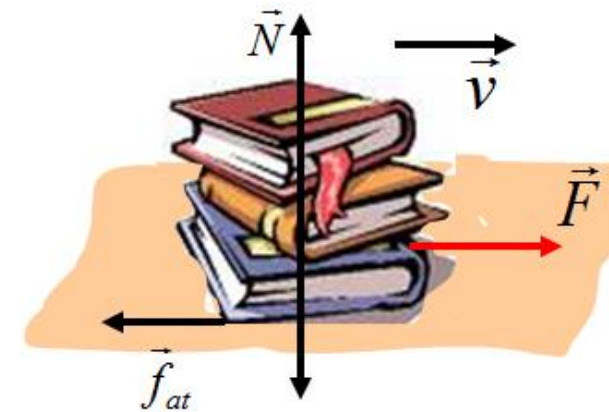
- Força proporcional a deformação

$$F_x = -kx$$



Força de Atrito

- Força que se opõe ao movimento
→ resistência ao movimento.



Exemplos de Aplicação da 2ª Lei

Força Tração

- Corda presa a um corpo e esticada \Rightarrow sob tração (tensão).



Forças fundamentais na natureza

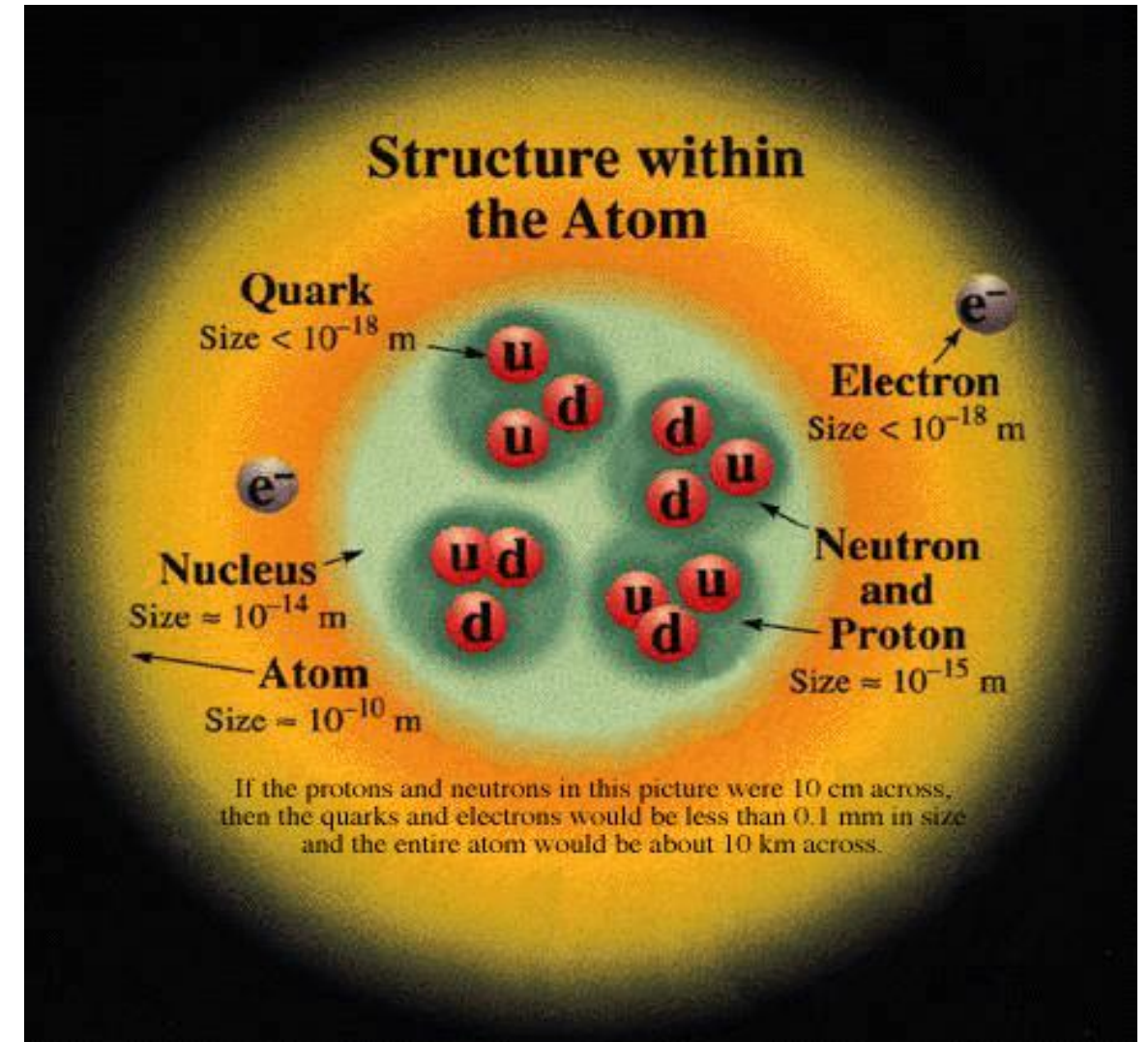
4 Forças distintas em natureza:

Interações

- i) fracas (decaimento radioativo e fissão nuclear)***
- ii) fortes (estabilidade da matéria – quarks)***

Escalas menores que 10^{-5} nm

Atuam entre partículas elementares



Forças fundamentais na natureza

4 Forças distintas em natureza:

Interações iii) eletromagnéticas e iv) gravitacionais:

Atuam em átomos, moléculas e sistemas macroscópicos

Escala subatômica ao infinito

Hydrogen bond
between chains

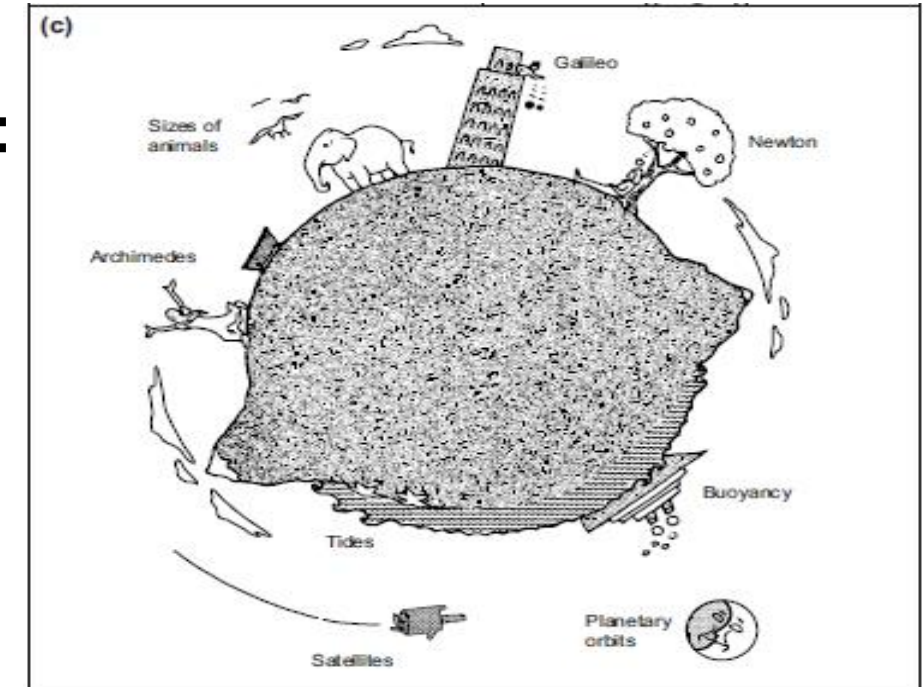
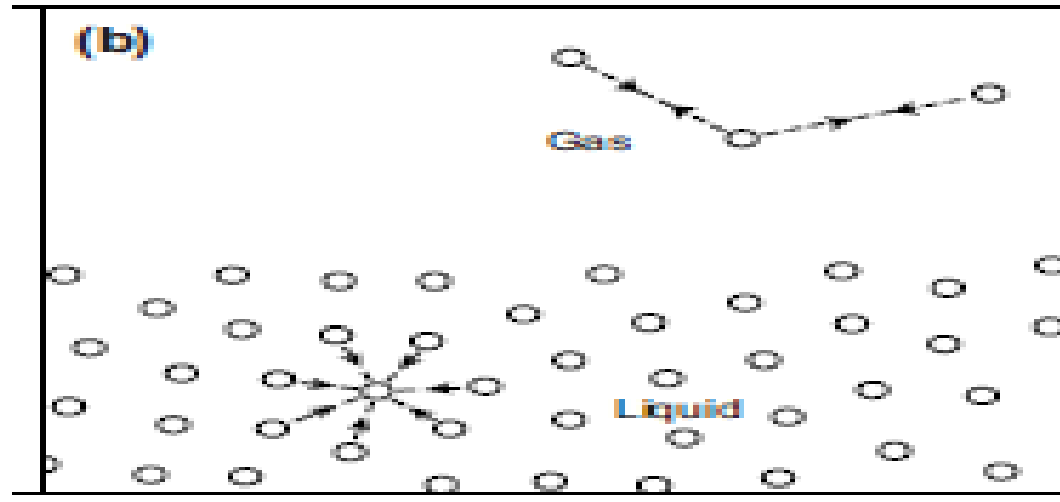
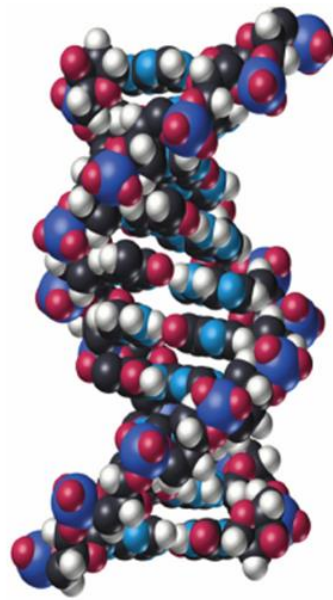
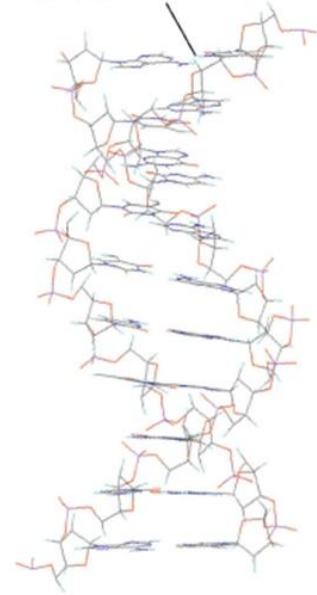


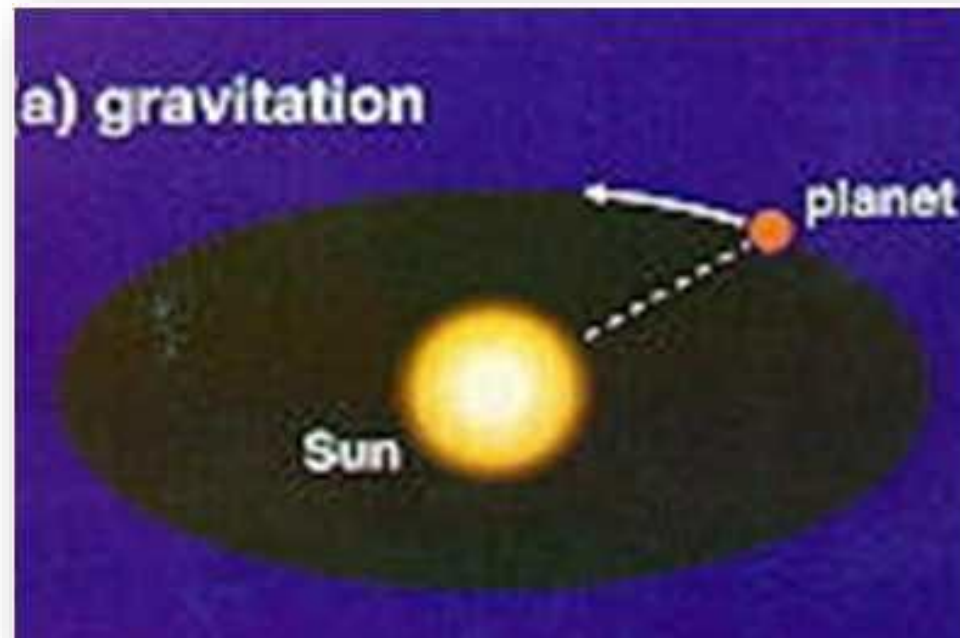
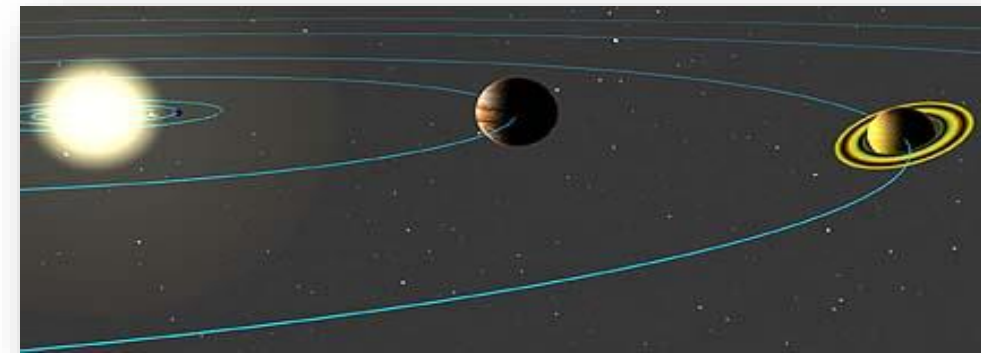
FIG. 1 (color online). Examples of leaf size variability. Typical

Interações Fundamentais da Natureza

☐ Interação Gravitacional – interação de longo alcance entre partículas devido às suas massas

$$\vec{F} = G \frac{mM}{r^2}$$

$$G = 6,67 \times 10^{-11} \frac{N \cdot m^2}{kg^2}$$



A Experiência de Cavendish

☐ Interação Eletromagnética – interação de longo alcance entre partículas eletricamente carregadas

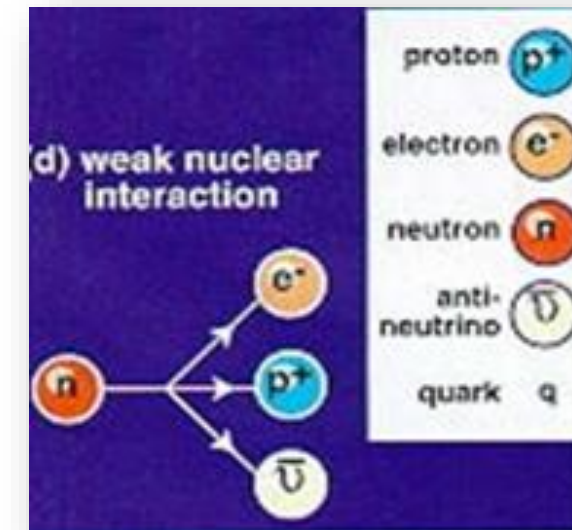
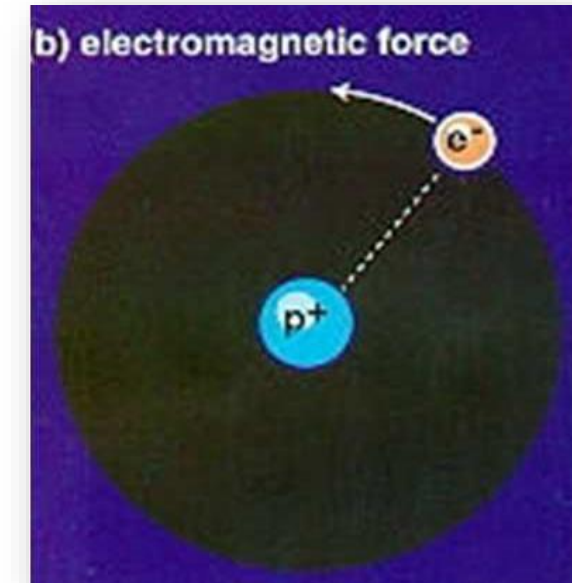
$$\vec{F} = k \frac{qQ}{r^2} \hat{r}$$

$$k = 9 \times 10^9 \frac{N \cdot m^2}{C^2}$$

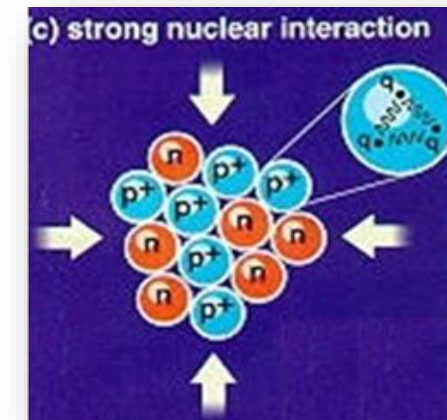
☐ Interação Fraca – interação de curtíssimo alcance entre partículas subnucleares.

☐ Desintegração Beta (radioatividade)

☐ Unificada com a eletromagnética: eletrofraca

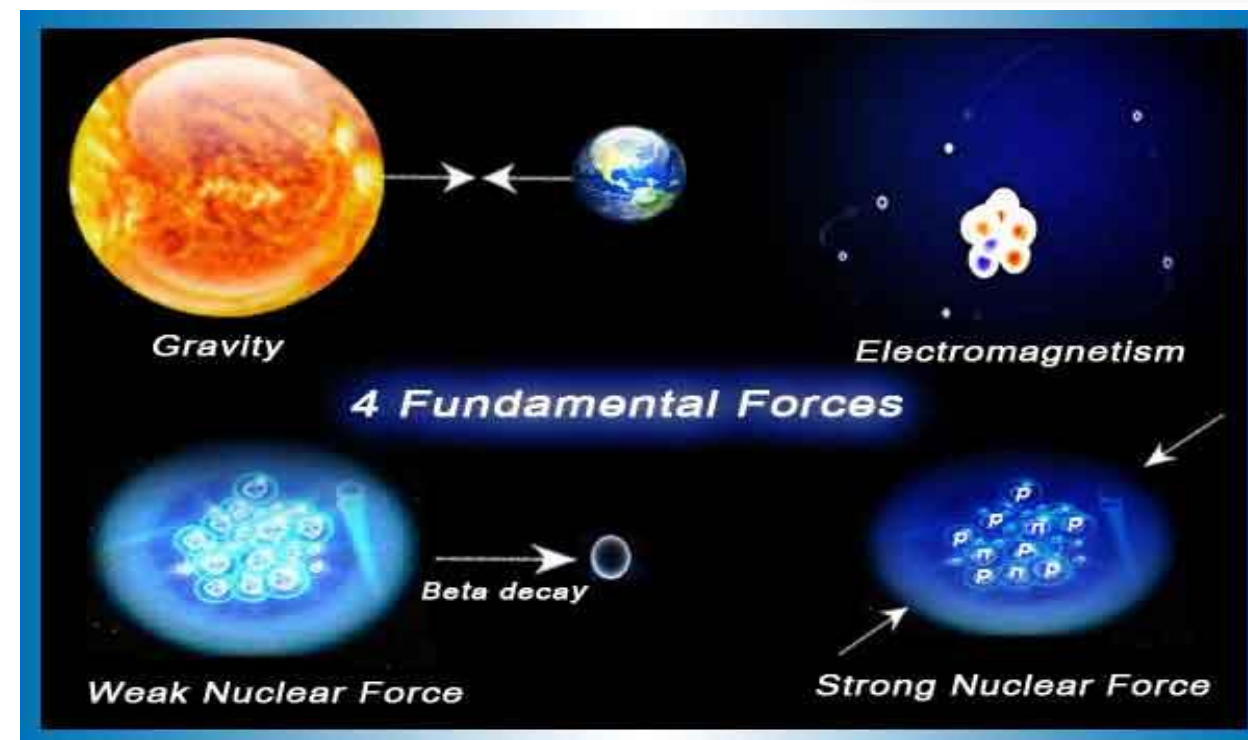


☐ Interação Forte – interação de curto alcance entre hádrons (quarks) que mantém unidos prótons e neutrons formando os núcleos atômicos .



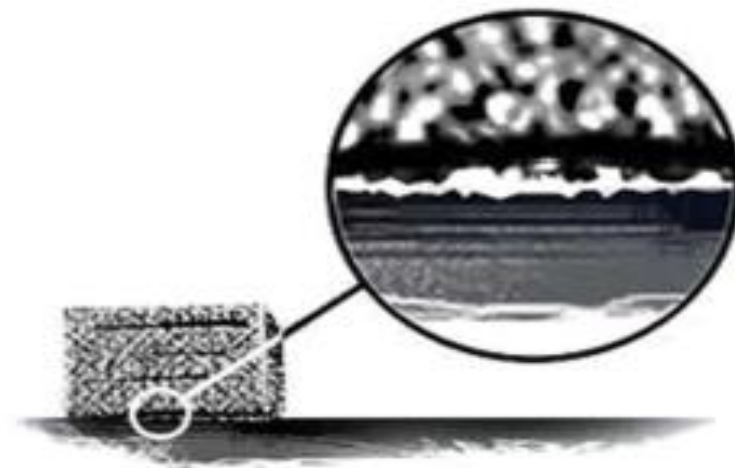
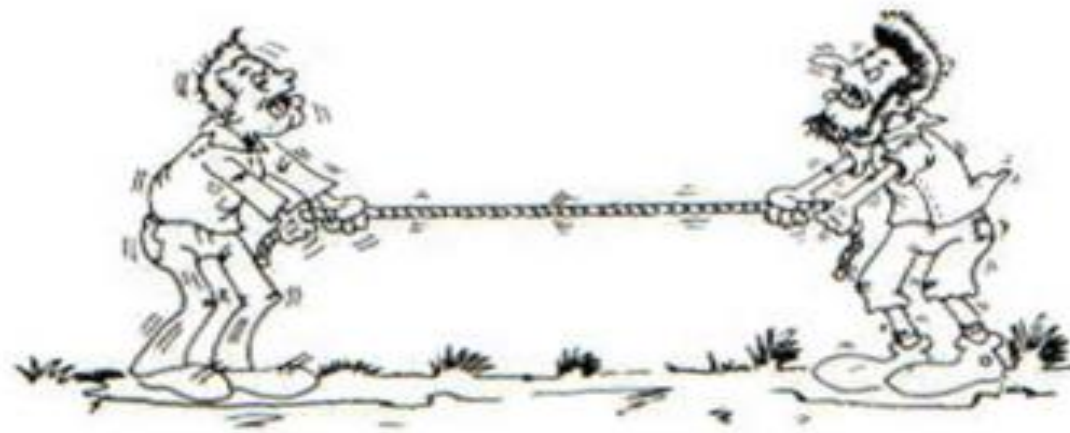
O que estas forças têm em comum?

São forças que atuam à distância!!!



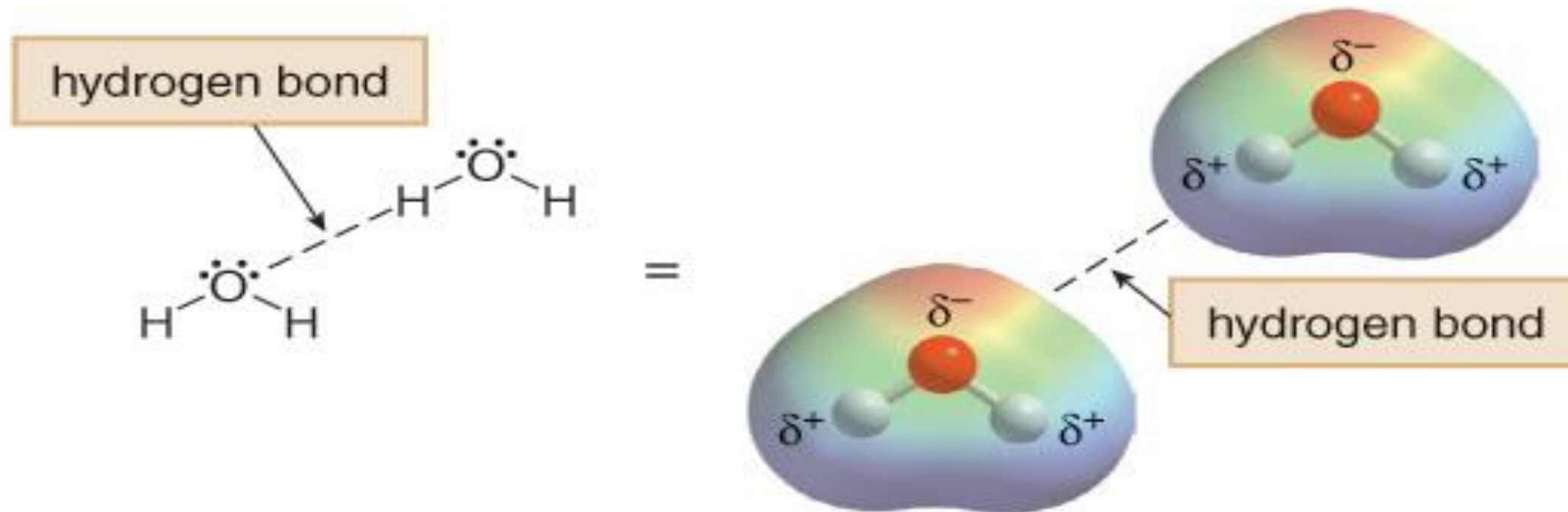
Tipos de Forças

Forças do dia-a-dia: Envolvem interações gravitacionais e eletromagnéticas



Ligação de hidrogênio

- **Ligação de hidrogênio:** ocorre tipicamente quando um átomo de hidrogênio ligado a O, N, ou F, está eletrostaticamente atraída por um par de elétrons em um O, N, ou um átomo de F, em uma outra molécula.

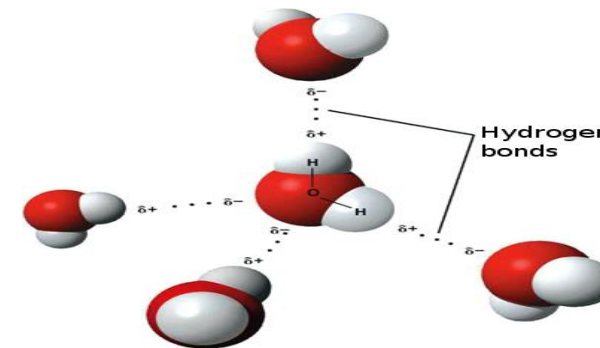


Motivação

Consequences of changes in water's hydrogen bond strength

Water hydrogen bond strength	Main consequence
No Hydrogen-bonding at all	No life
Hydrogen bonds slightly weaker	Life at lower temperatures
No change	Life as we know it
Hydrogen bonds slightly stronger	Life at higher temperatures
Hydrogen bonds very strong	No life

51 KJ mol



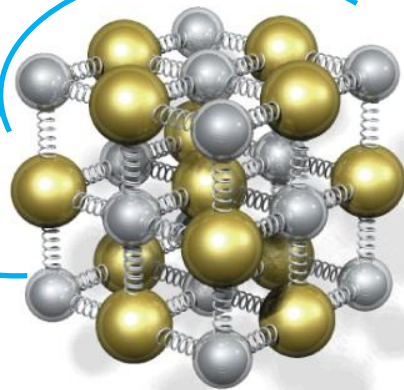
Forças Elásticas: Molas

Quando uma mola é esticada ou comprimida, ela reage com uma força que é proporcional à sua deformação. (Lei de Hooke)

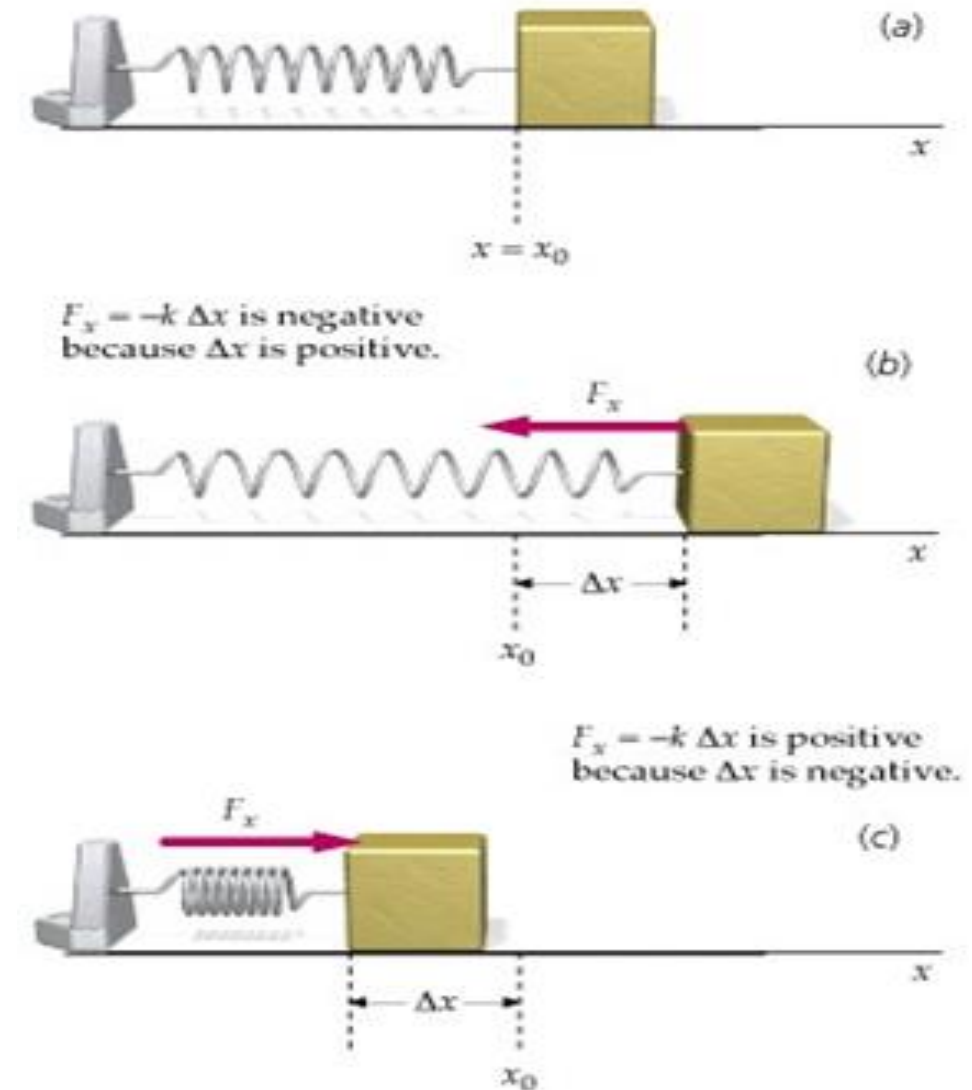
$$F_x = -kx$$

K = constante de proporcionalidade positiva \Rightarrow constante elástica e tem dimensões de:

$$[F] = [M] \frac{[L]}{[T]^2} = [k][L] \Rightarrow [k] = \frac{[M]}{[T]^2}$$



interações moleculares podem ser simuladas por forças elásticas.



Interações interatômicas

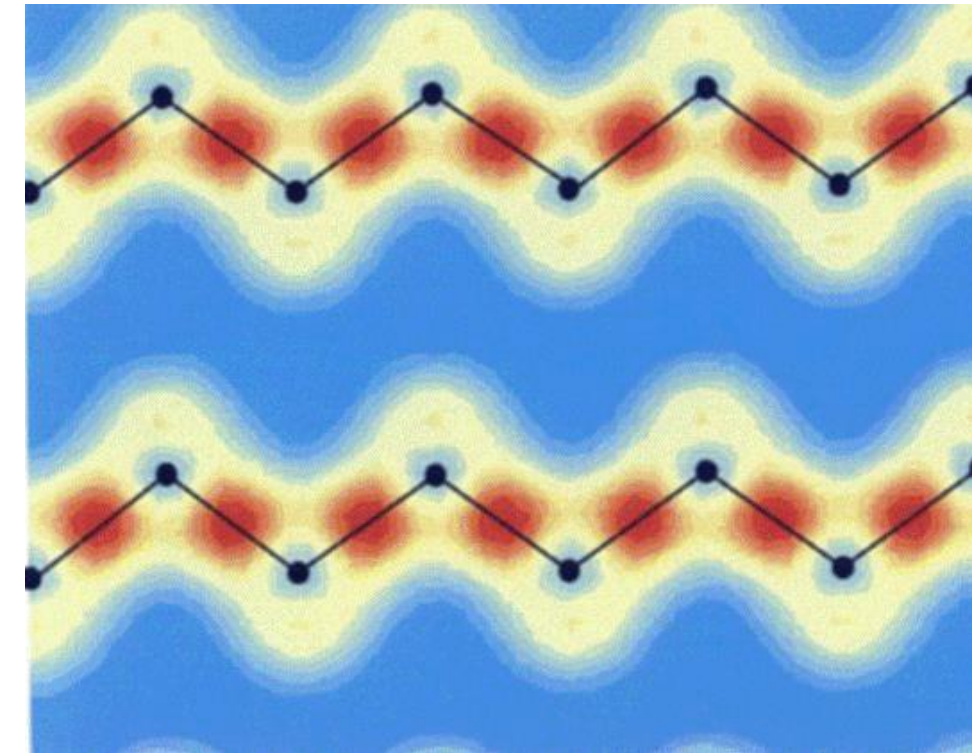
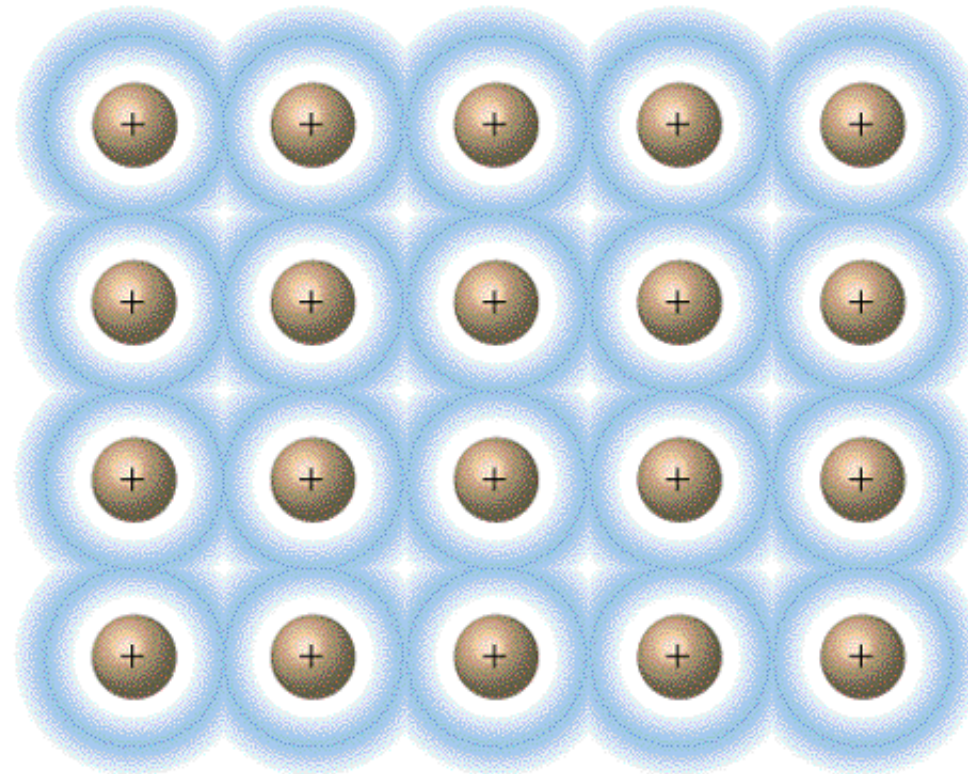
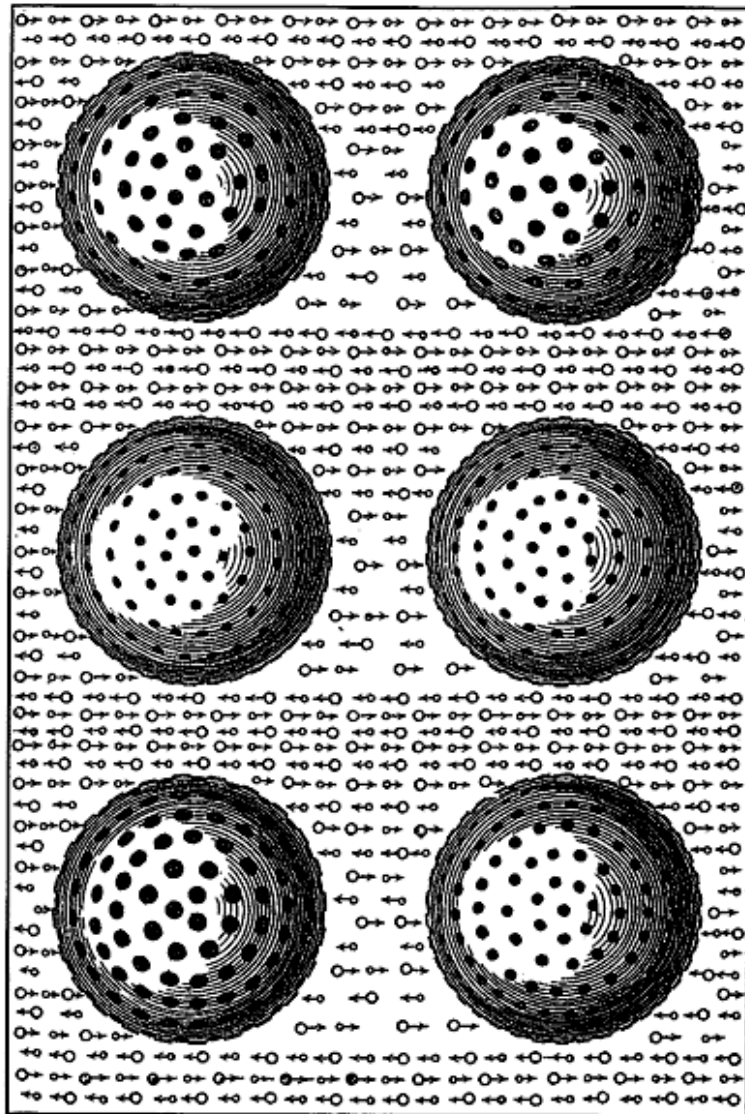


Fig. 2.2 Le Sage's picture of attraction between particles of matter [249].

Corpuscules ultramondains

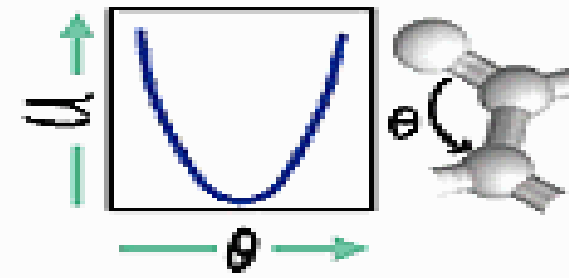
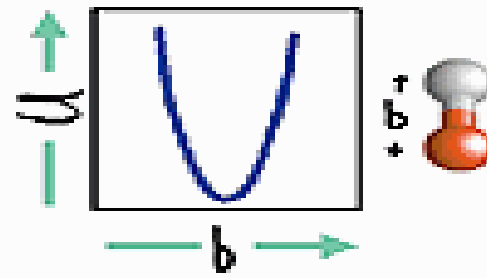
Discussão dos modelos empíricos de energia

- Potenciais de pares: formas e limitações físicas
- Classificação dos modelos empíricos
- Potenciais de muito-corpos
- Funcionais de pares
- Potenciais dependente do ambiente (química)

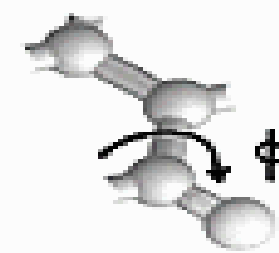
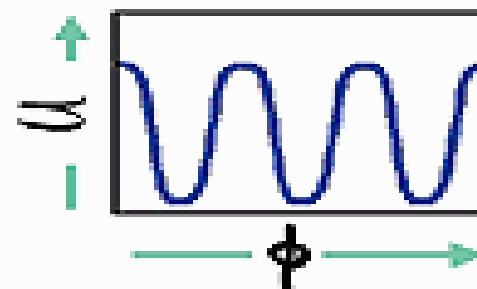
Objetivo: Noções das formas típicas dos potenciais e entender as limitações das várias escolhas. Foco na forma, não nos parâmetros.

Potenciais para moléculas complexas

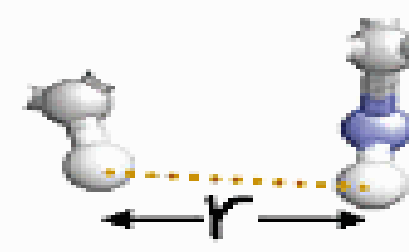
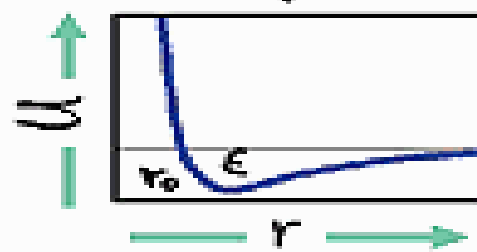
$$U = \sum_{\text{All Bonds}} \frac{1}{2} K_b (b - b_0)^2 + \sum_{\text{All Angles}} \frac{1}{2} K_\theta (\theta - \theta_0)^2$$



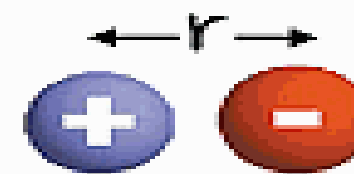
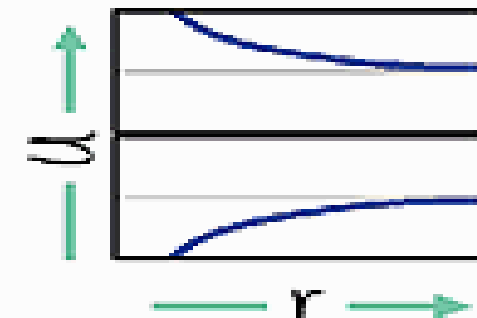
$$+ \sum_{\text{All Torsion Angles}} K_\phi [1 - \cos(n\phi + \delta)]$$



$$+ \sum_{\text{All nonbonded pairs}} \epsilon \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right]$$



$$+ \sum_{\text{All partial charges}} \frac{332 q_i q_j}{r}$$



Somatório das energias de pares: Potenciais de pares

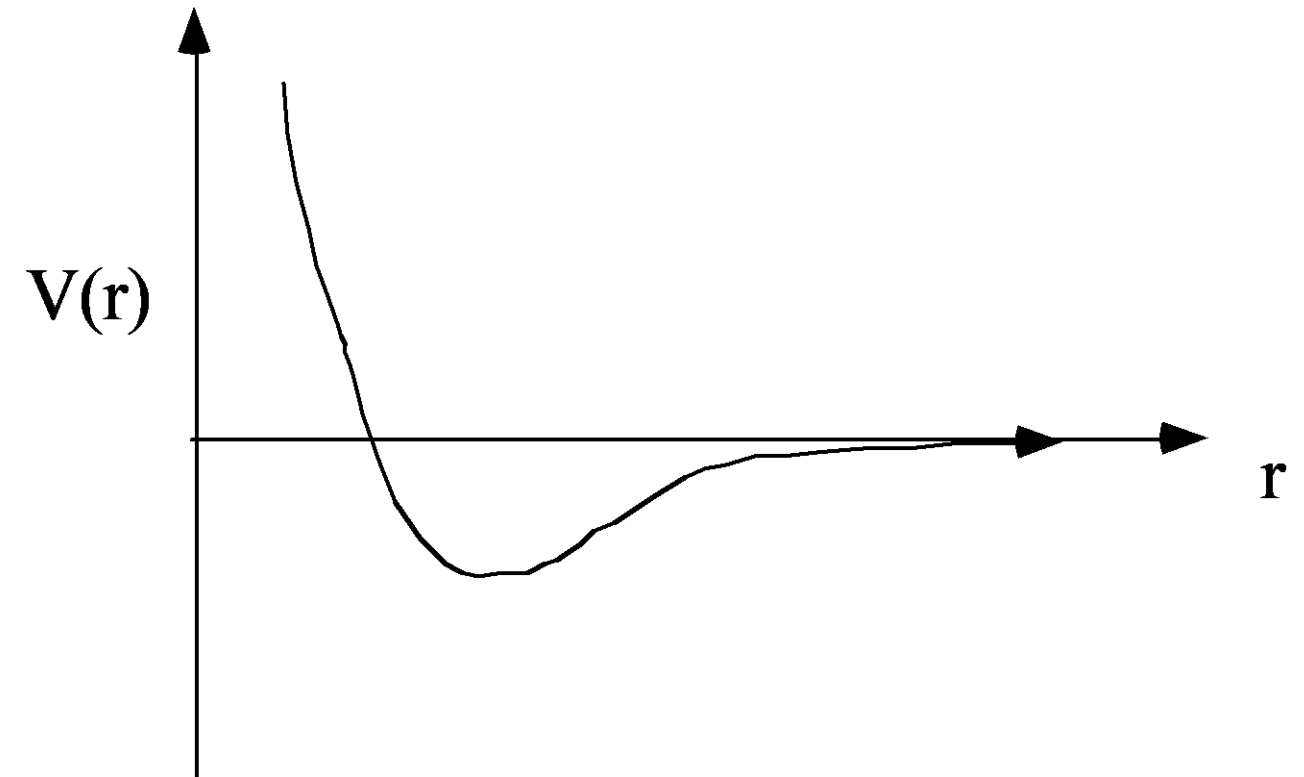
$$E = (E_0) + \frac{1}{2} \sum_{i,j \neq i}^N V(\vec{R}_i - \vec{R}_j)$$

Características comuns:

Repulsivo em distâncias curtas

Atrativo em distâncias intermediárias e longas

Normalmente aplicamos um raio de corte !



Formas analíticas dos potenciais são baseadas em fundamentos físicos

Relevância física tende a desaparecer qdo as constantes do potencial são ajustadas

Mínimo conjunto de parâmetros: escalas de energia e comprimento

Lennard-Jones: modelo simples com 2 parâmetros

$$V(r) = \frac{A}{r^{12}} - \frac{B}{r^6}$$

$$\frac{V(r)}{\varepsilon} = \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

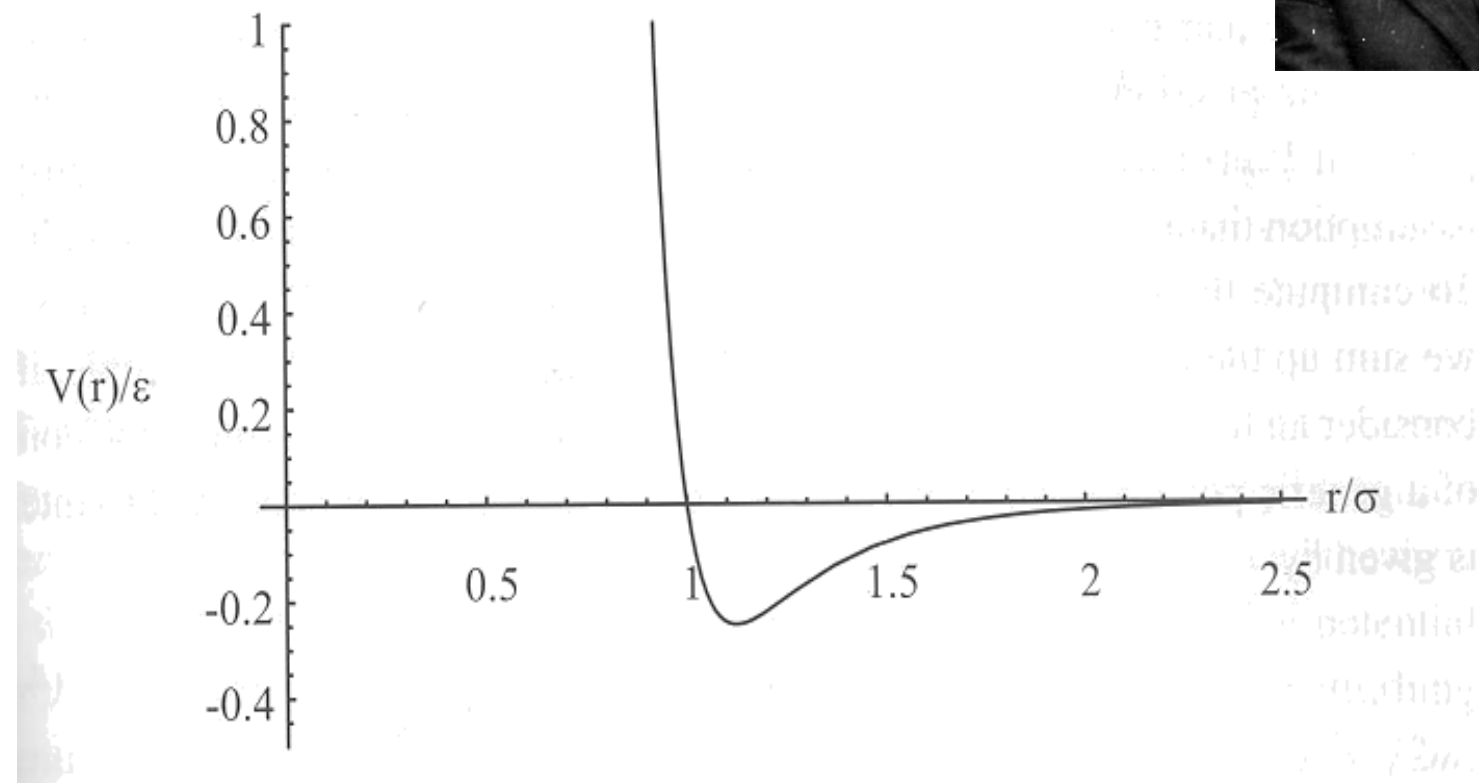
Todos os sistemas LJ são idênticos quando escrevemos a temperatura, pressão e densidade em unidades renormalizadas.

$$\text{Temperature} \quad \frac{\varepsilon}{k_B}$$

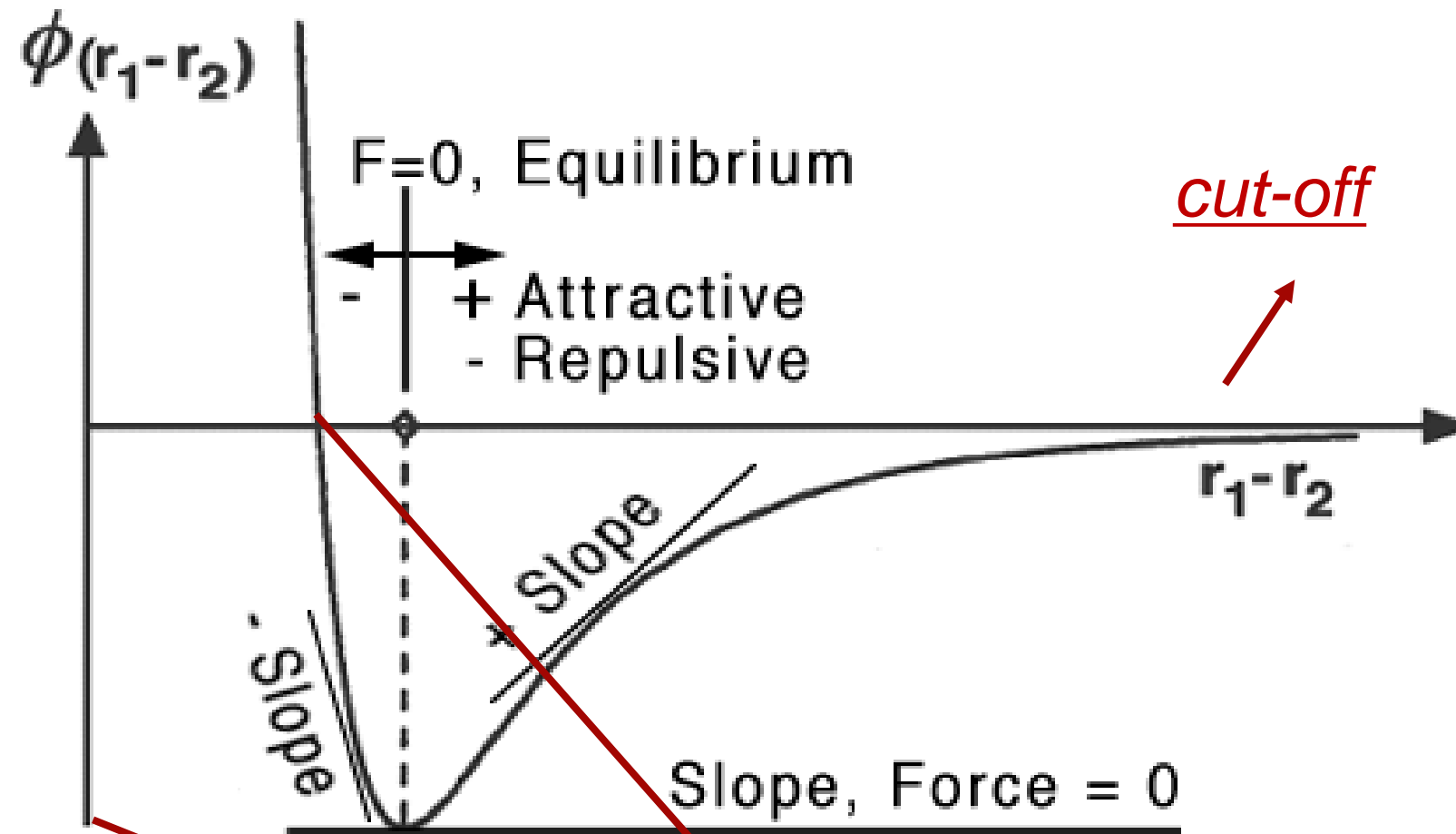
$$\text{Pressure} \quad \frac{\varepsilon}{\sigma^3}$$

$$\text{Density} \quad \frac{1}{\sigma^3}$$

ε define a escala de energia
 σ define a escala de comprimento



Potencial Lennard-Jones



$$u(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

Potencial Lennard-Jones

O Potencial LJ é uma aproximação. A forma do termo de repulsão não tem justificativa teórica.

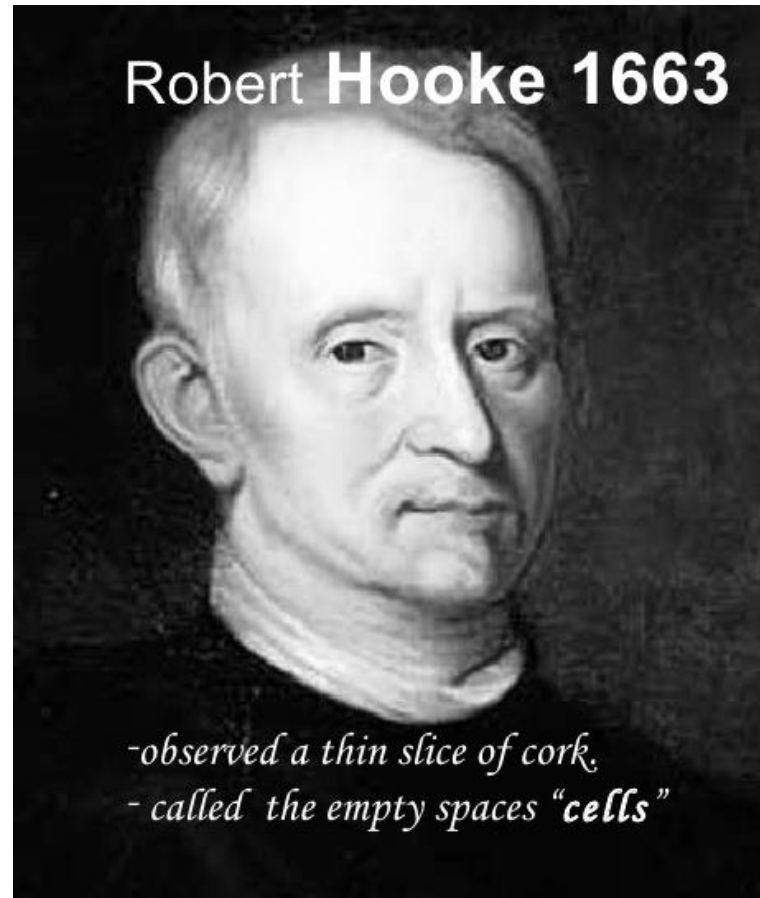
A força de repulsão deve depender **EXPONENCIALMENTE** com a distância,

Mas o termo de repulsão da fórmula de LJ é mais conveniente pela facilidade e eficiência no cálculo do termo

r^{12} sendo o quadrado de r^6 .

O Potencial atrativo de longo alcance, contudo, é derivado das interações de **DISPERSÃO** (London).

Forças restauradoras



"Se eu vi mais longe, foi por estar **de pé sob ombros de gigantes**"
(Isaac Newton).

Forças de Contato: Sólidos

Se uma superfície é empurrada, ela empurra de volta.

Região de contato: a roda empurra o solo

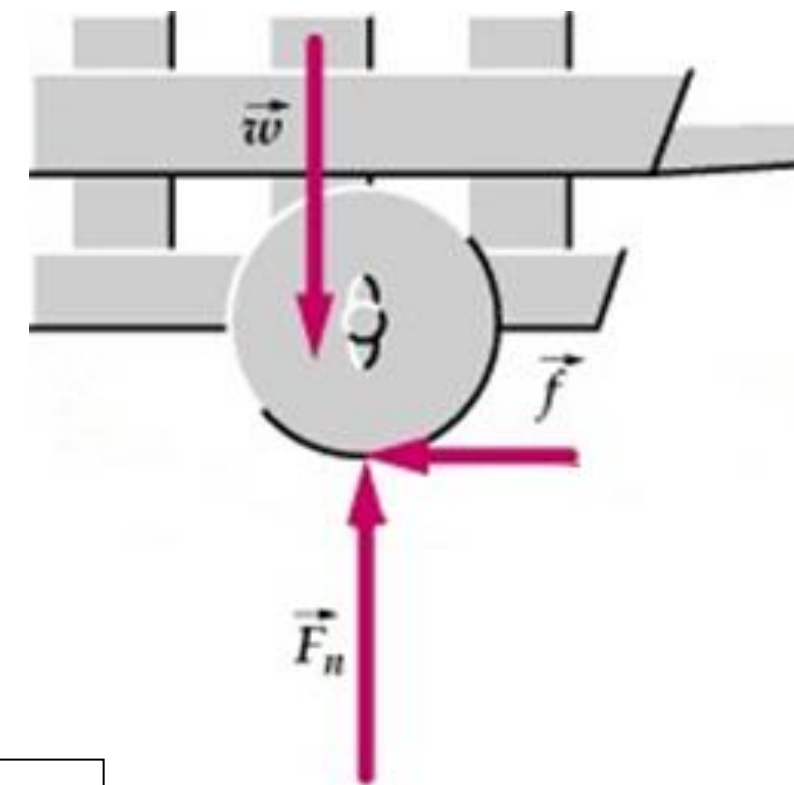
- força vertical
- comprimindo a distância entre as moléculas na superfície do solo.

As moléculas comprimidas empurram de volta a roda.

Força perpendicular às superfícies de contato = **Força Normal**.

Força de Atrito: outra força de contato, paralela à superfície que impede o deslizamento relativo entre as superfícies.

origem eletromagnética



Forças de Contato: Fios

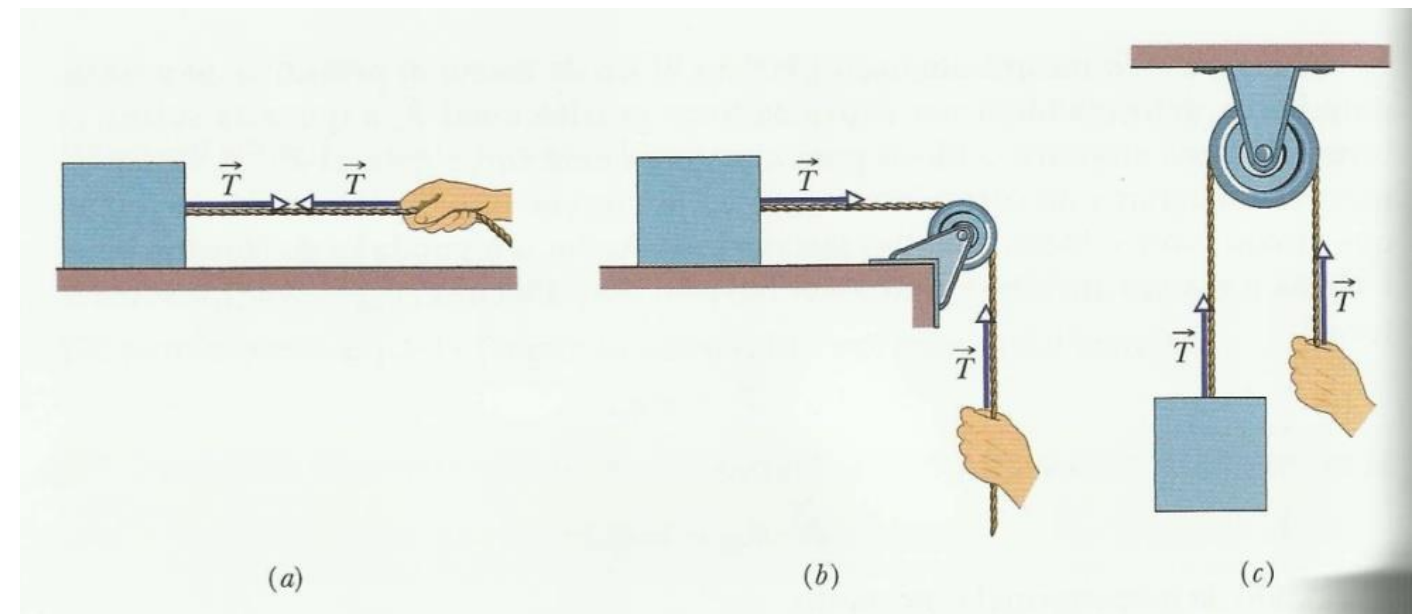
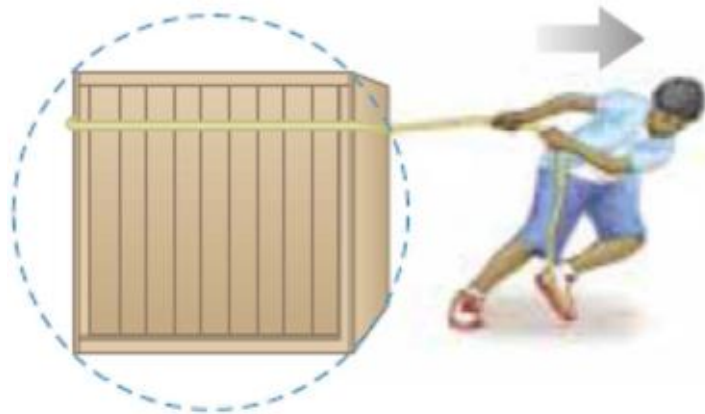
Usados para puxar coisas

- Fio = mola de constante elástica muito alta (elongação desprezível).

Flexíveis = não servem para empurrar; permitem a alteração da direção de aplicação de forças = POLIAS

Tensão (T): magnitude da força que um segmento do fio exerce sobre outro

Massa do fio e seu atrito: desprezíveis



O Espetacular Homem-Aranha™ 2 (2014)

Contém – Spoiler !!!



Qual a causa da morte de Gwen Stacy?

- 1) Foi o ataque do Duende Verde que a jogou ?
- 2) Teria sido o medo durante a queda?
- 3) Ou foi a parada brusca causada pela ação do Homem-Aranha?



Qual a força atuando sobre a Gwen ?

Premissas:

$$h = 100 \text{ m}$$

$$g = 10 \text{ m/s}^2$$

$$\text{Massa} = 50 \text{ kg}$$

- Velocidade terminal

$$v^2 = 2 \cdot g \cdot h$$

$$= 2 \cdot 10 \cdot 100$$

$$v \sim 45 \text{ m/s}$$

- Força

$$F = m \cdot dv/dt$$

$$F \cdot dt = m \cdot dv$$

- Premissas 2:

$$dv = 45 - 0 = 45 \text{ m/s}$$

$$dt = 0,5\text{s}$$

Mudança brusca de
velocidade

- Força

$$F \cdot dt = m \cdot dv$$

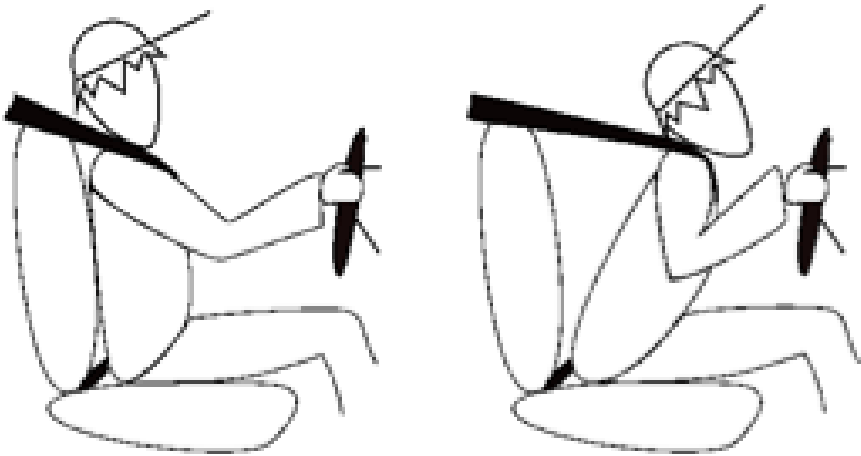
$$F = 50 \cdot 45 / 0.5$$

$$F = 4500 \text{ kg} \cdot \text{m/s}^2$$

- Força

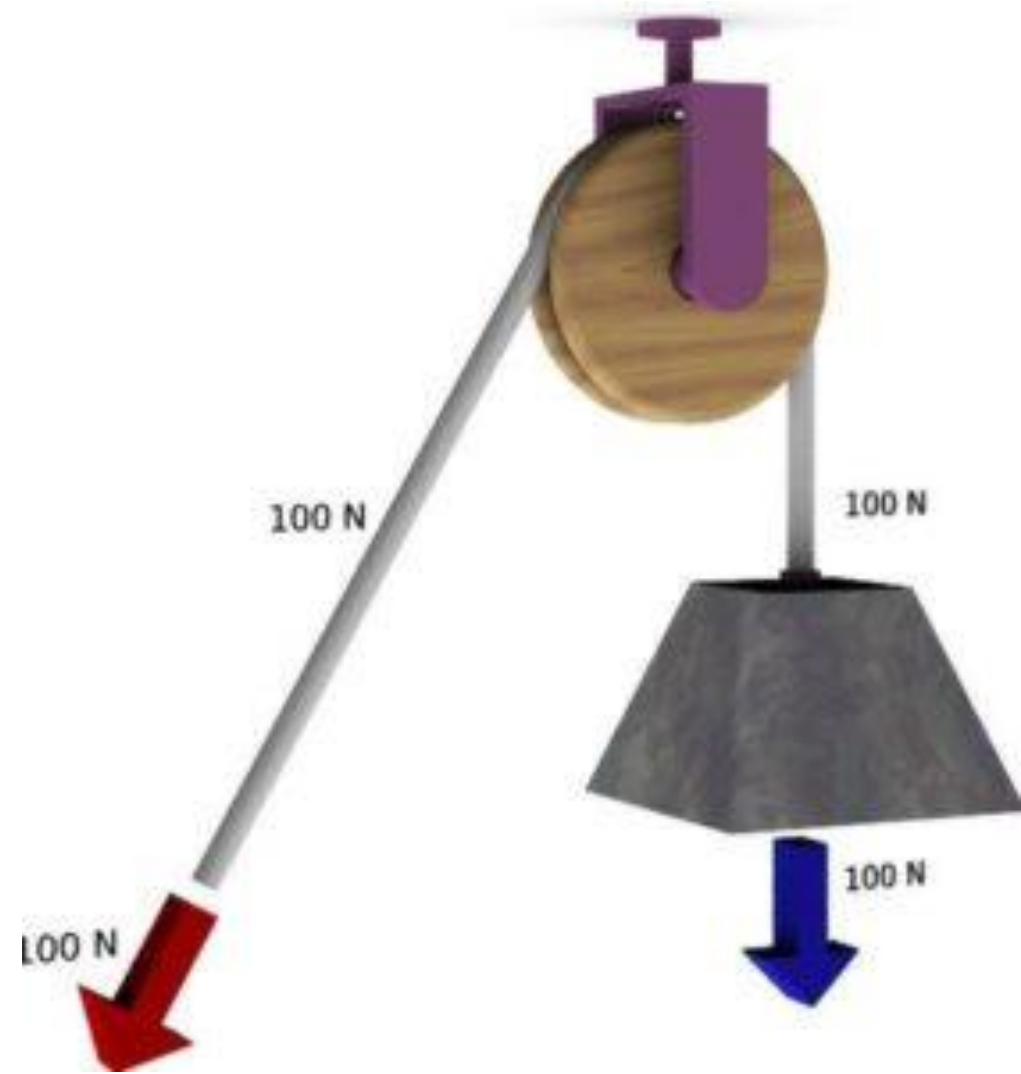
$$F \sim 9 F_g !!!$$

A Física dos super heróis



Demonstração 4 - Polias

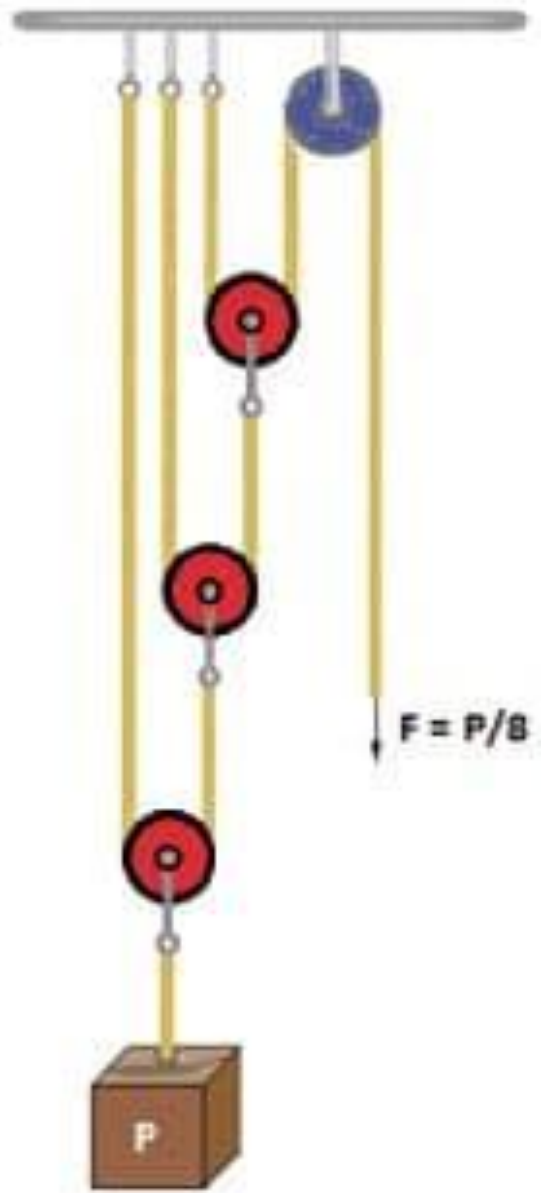
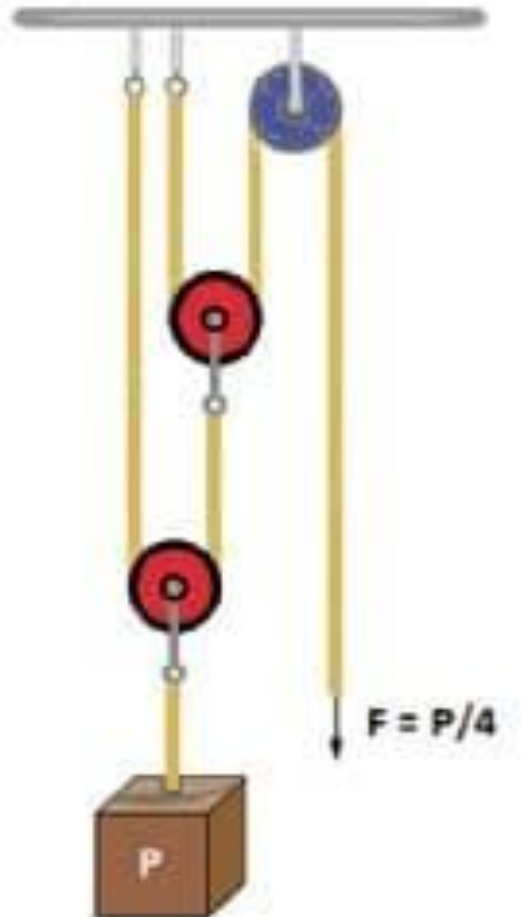
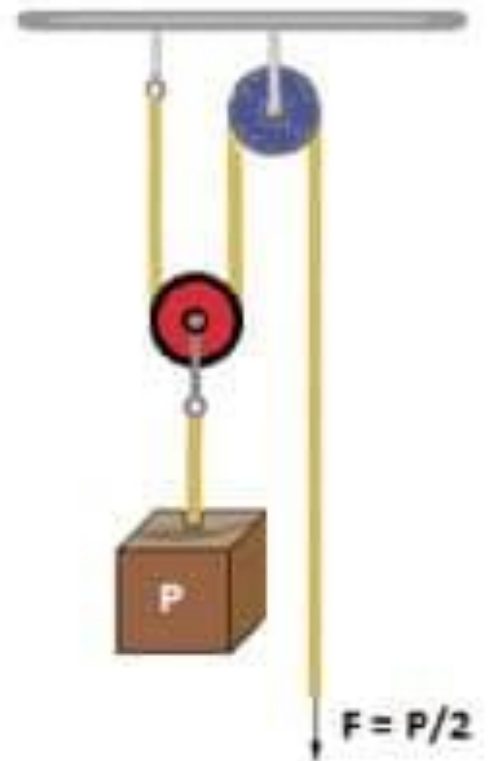


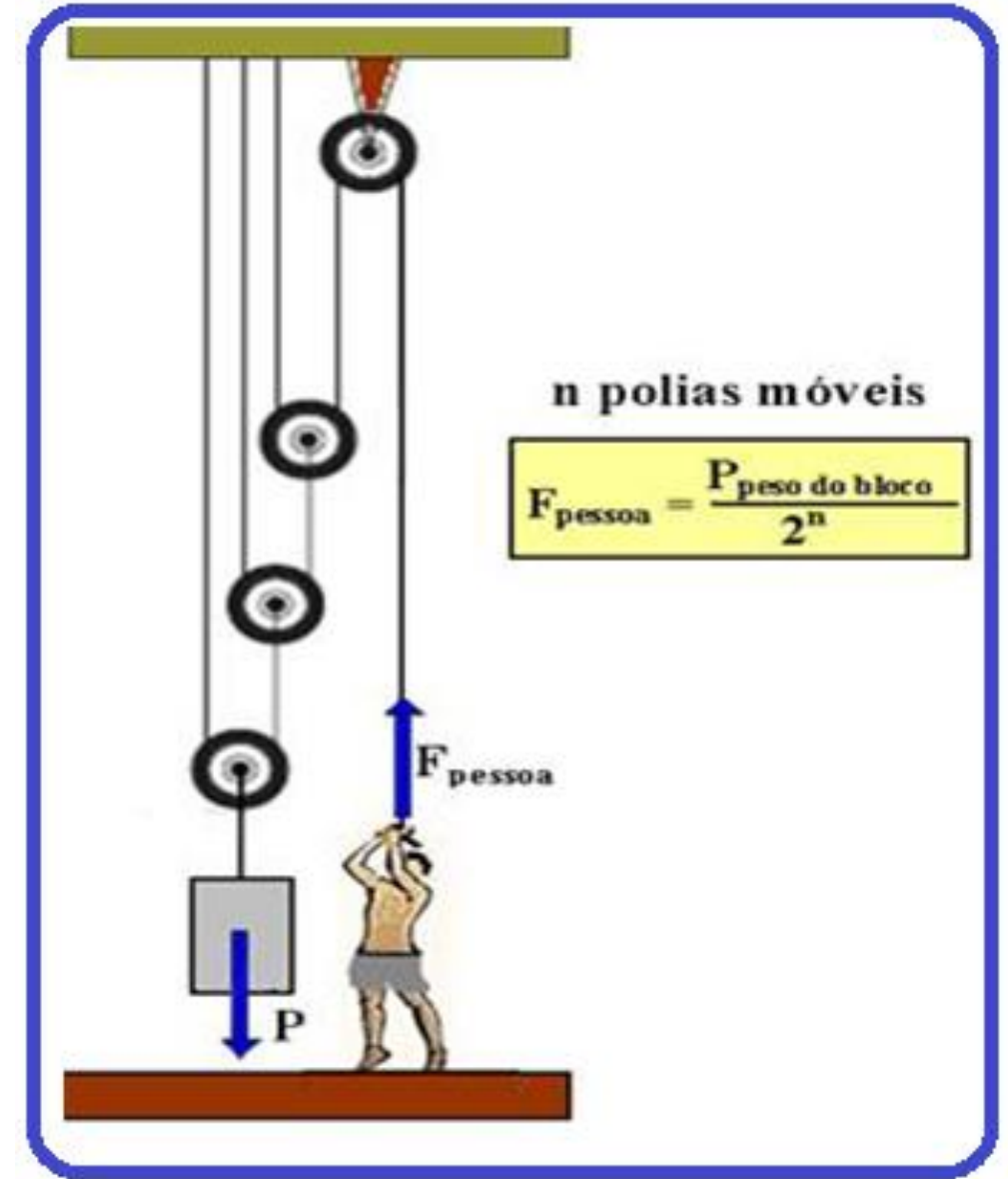


polia fixa permite que você **altere a direção da força** necessária.



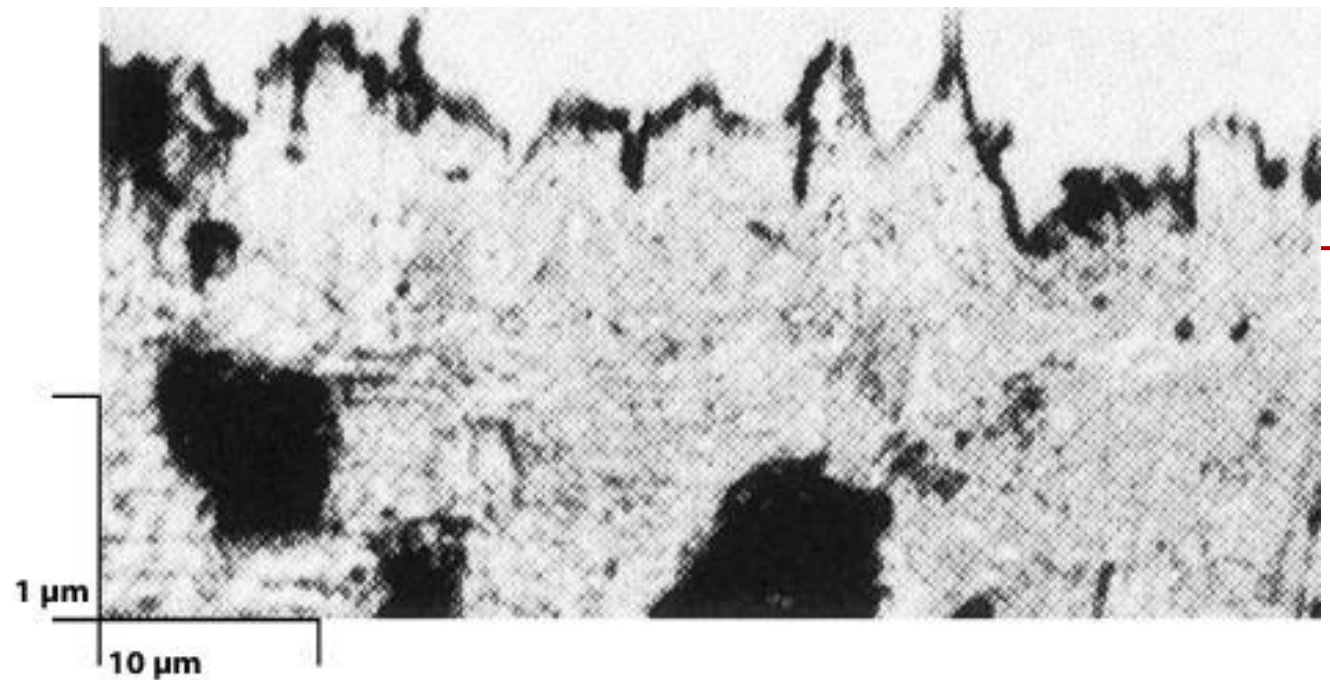
polia se move enquanto você **movimenta a carga**



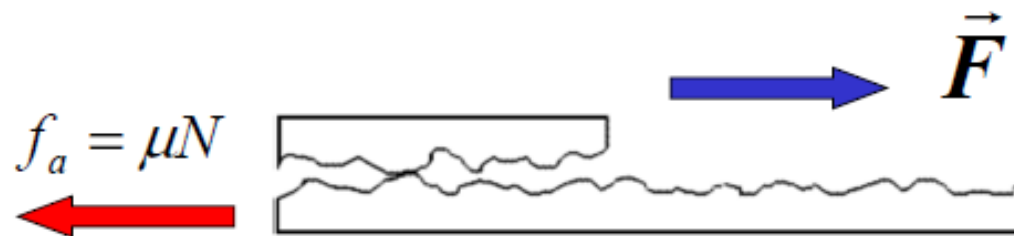


Atrito

- Objetos comuns que parecem lisos, são ásperos e enrugados em escala atômica.



- Superfícies em contato: se tocam apenas nas saliências (asperezas).

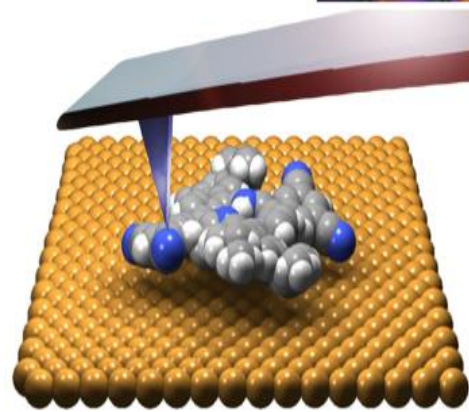
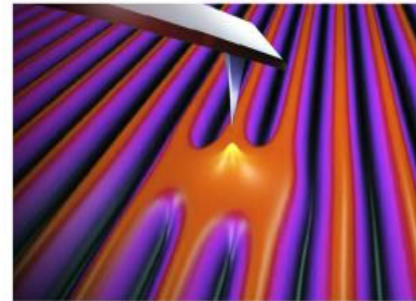


- Apenas algumas moléculas da superfície interagem quimicamente (atração eletromagnética) com as moléculas do corpo vizinho.
 - Essas interações são responsáveis pelas **forças de atrito**.
-

Força de atrito – escalas

Single-asperity atomic friction

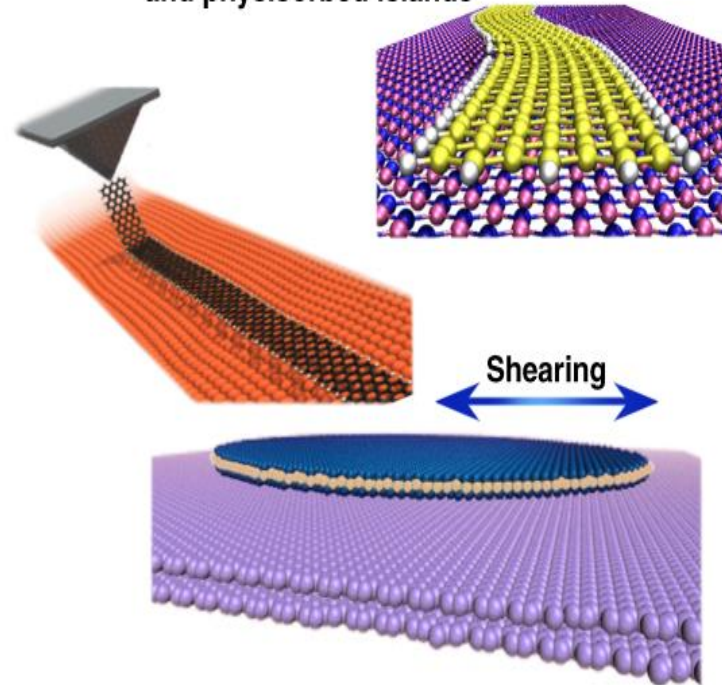
e.g., AFM probing and manipulation



~nm

Nano-scale friction

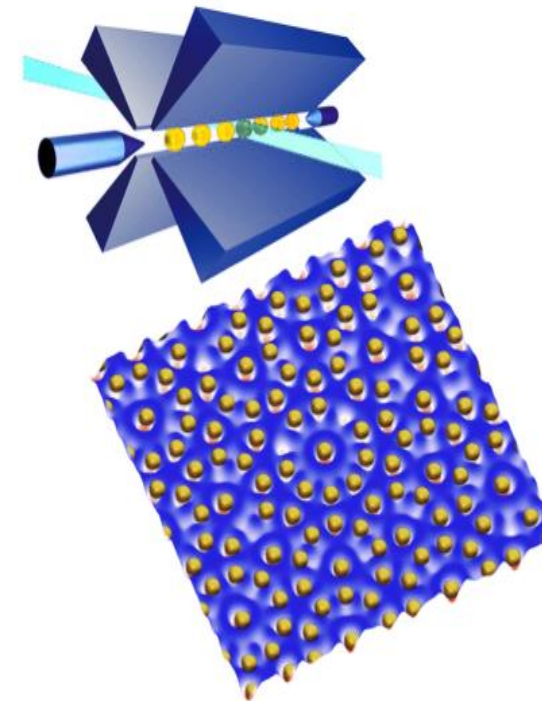
e.g., physisorbed graphitic-like nano-objects and physisorbed islands



10 – 100 nm

Meso-scale friction

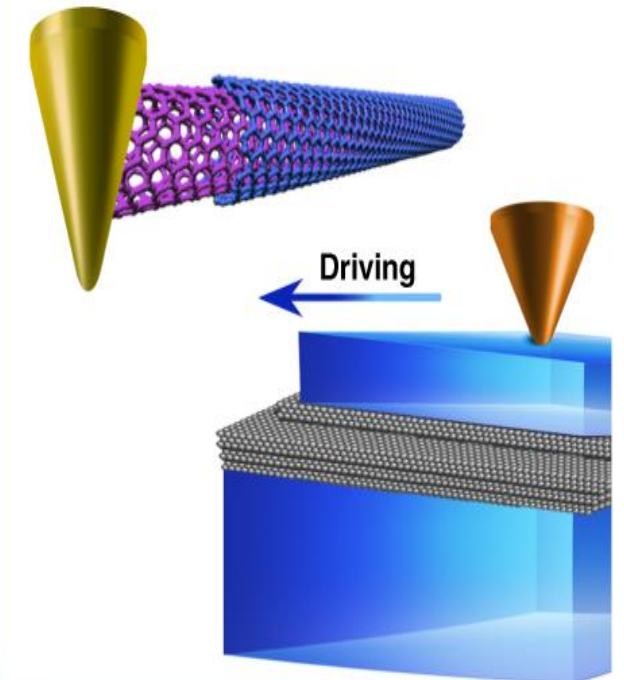
e.g., ion traps and colloidal suspensions



10 – 100 μm

Microscopic friction

e.g., long carbon nanotubes and 2D layered extended mesas

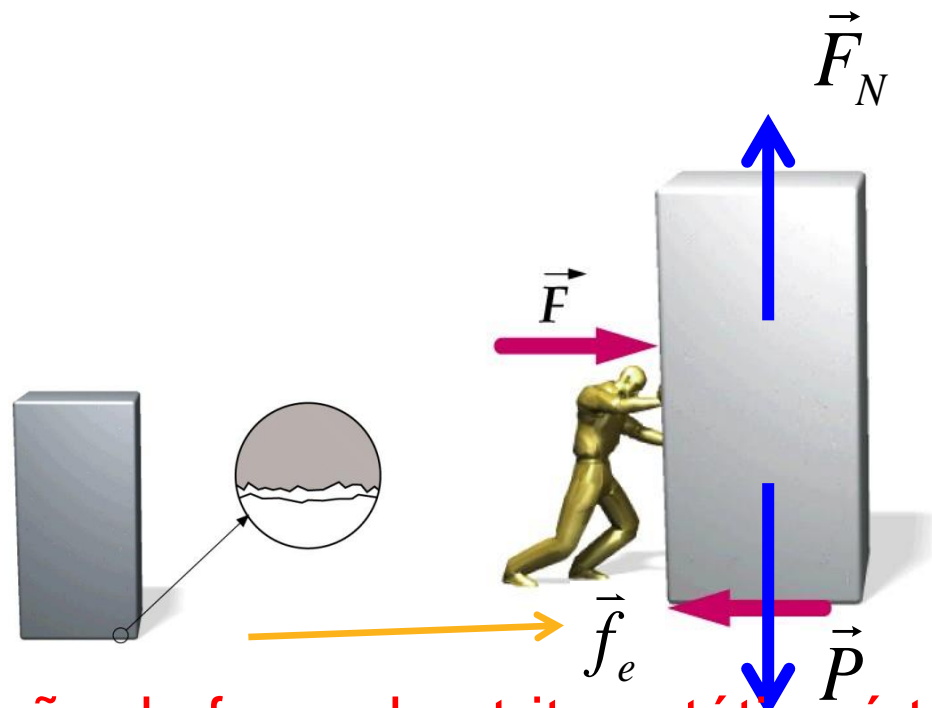


~mm

System characteristic length scales in nano/microtribology

Atrito Estático

- Força de atrito que atua quando não existe deslizamento entre duas superfícies em contato.
- Se opõe ao movimento relativo entre as superfícies.
- É proporcional às forças que pressionam as duas superfícies entre si.



$$f_{e_{\max}} = \mu_e F_n$$

μ_e é o coeficiente de atrito estático

limite superior para a força de atrito estático = além deste limite as interações químicas se rompem, permitindo o movimento relativo entre as superfícies!

A orientação da força de atrito estático é tal que se opõe à tendência dos deslizamentos.

Força: independente da área de contato!

Atrito Cinético

Se o esforço entre as superfícies for alto, pode haver movimento relativo.

⇒ Haverá "atrito cinético" entre as superfícies (de deslizamento)

- se opõe ao movimento.

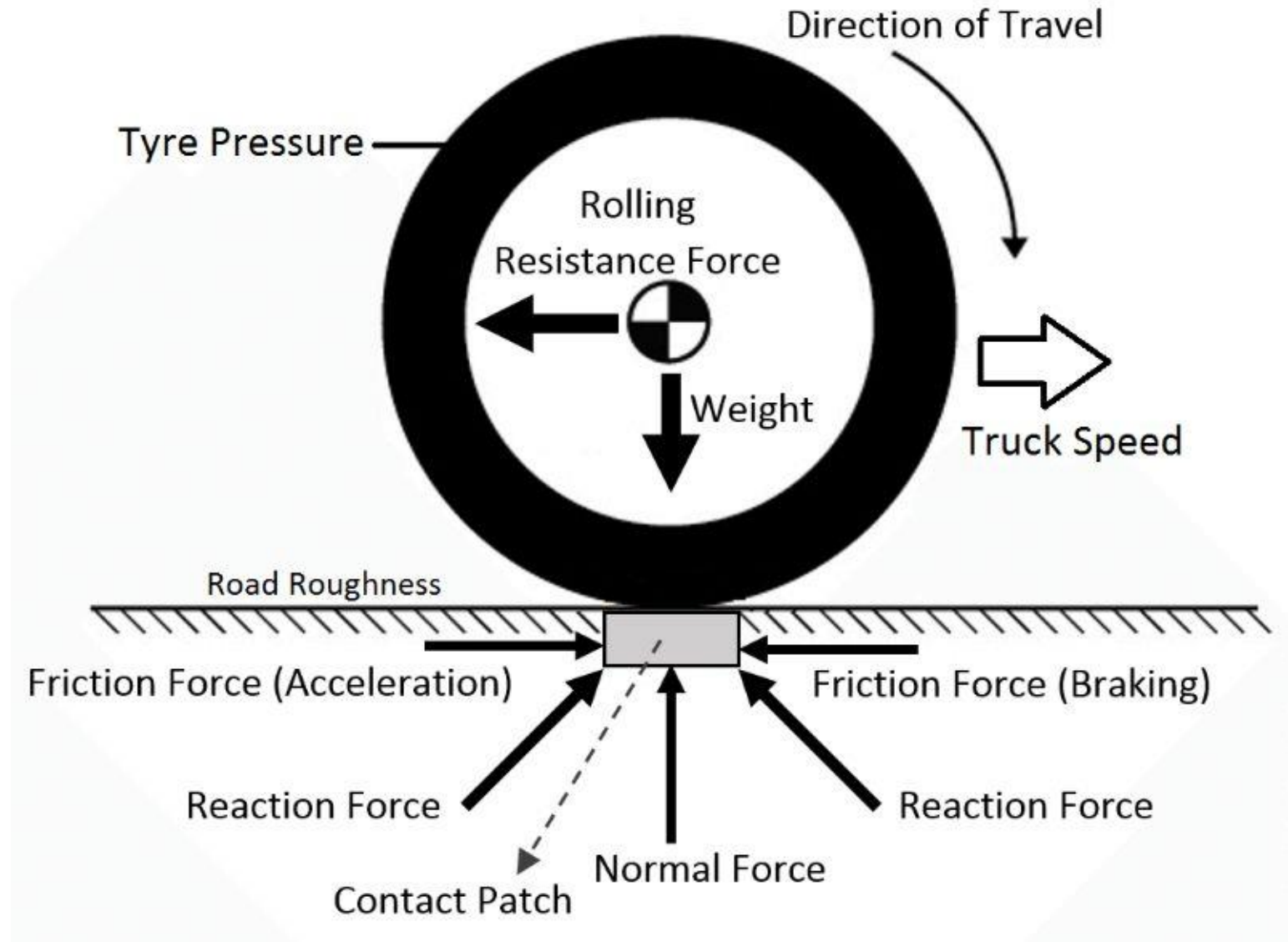
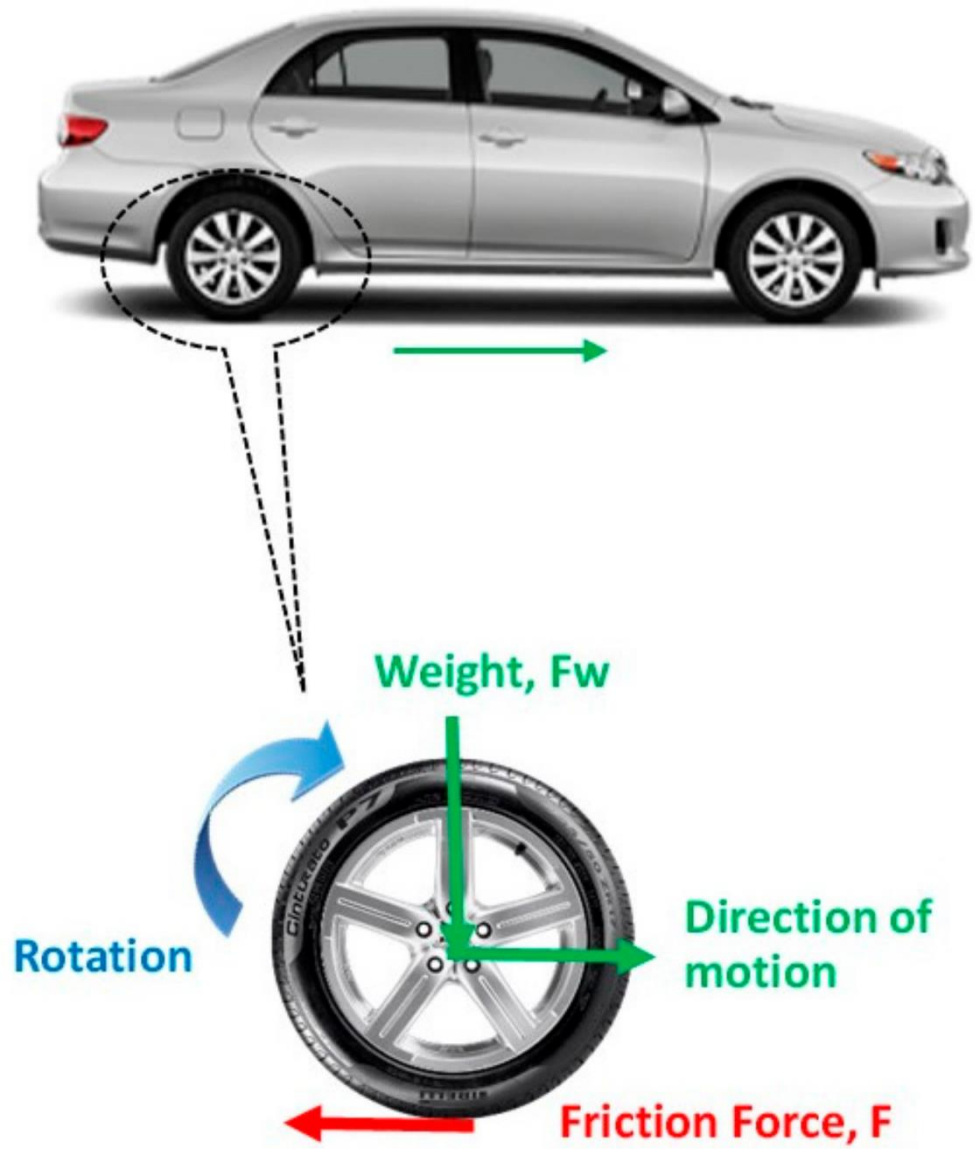
Proporcional às forças de interação entre as superfícies.

$$f_c = \mu_c F_n \quad \mu_c \leq \mu_e$$

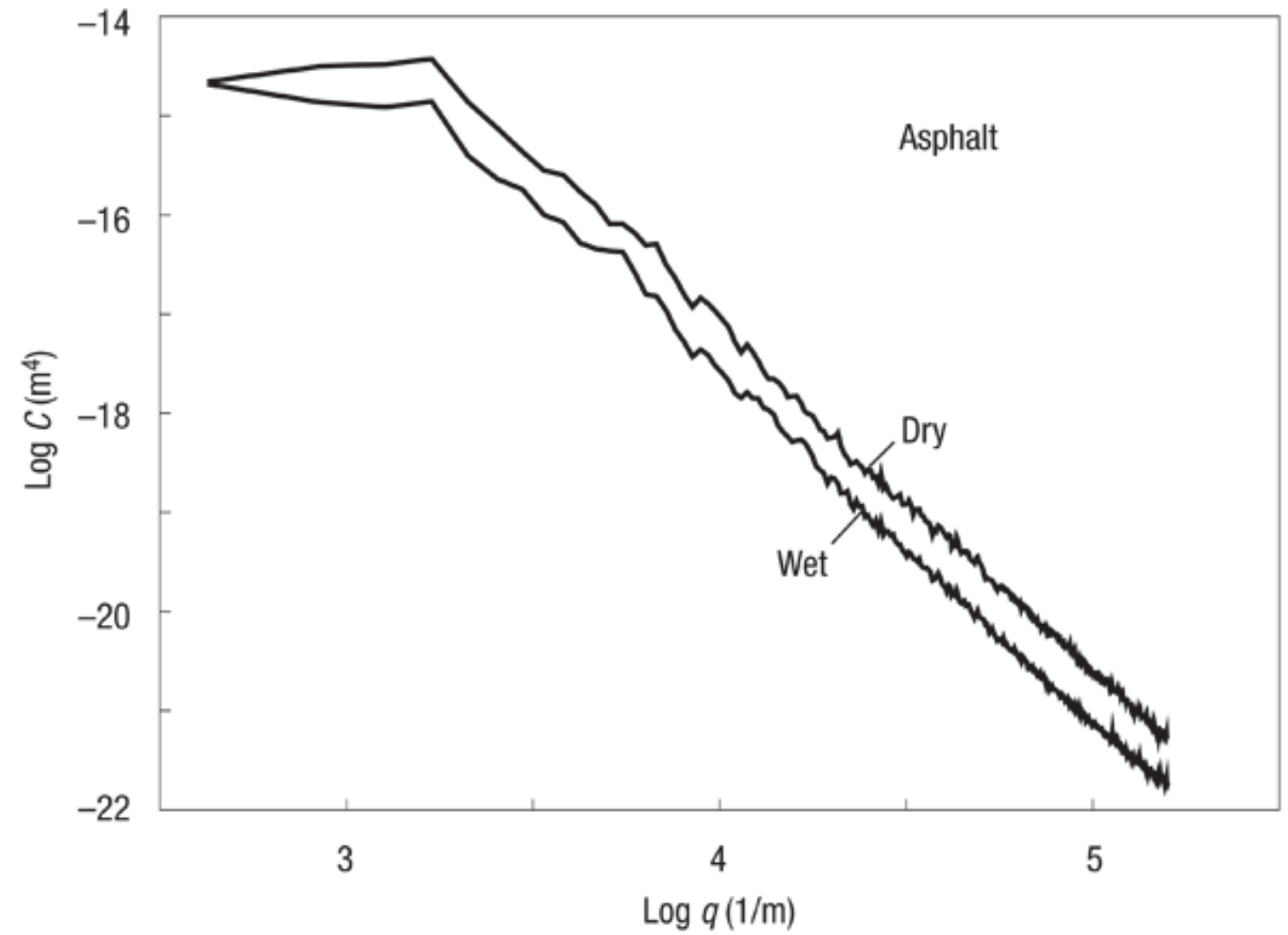
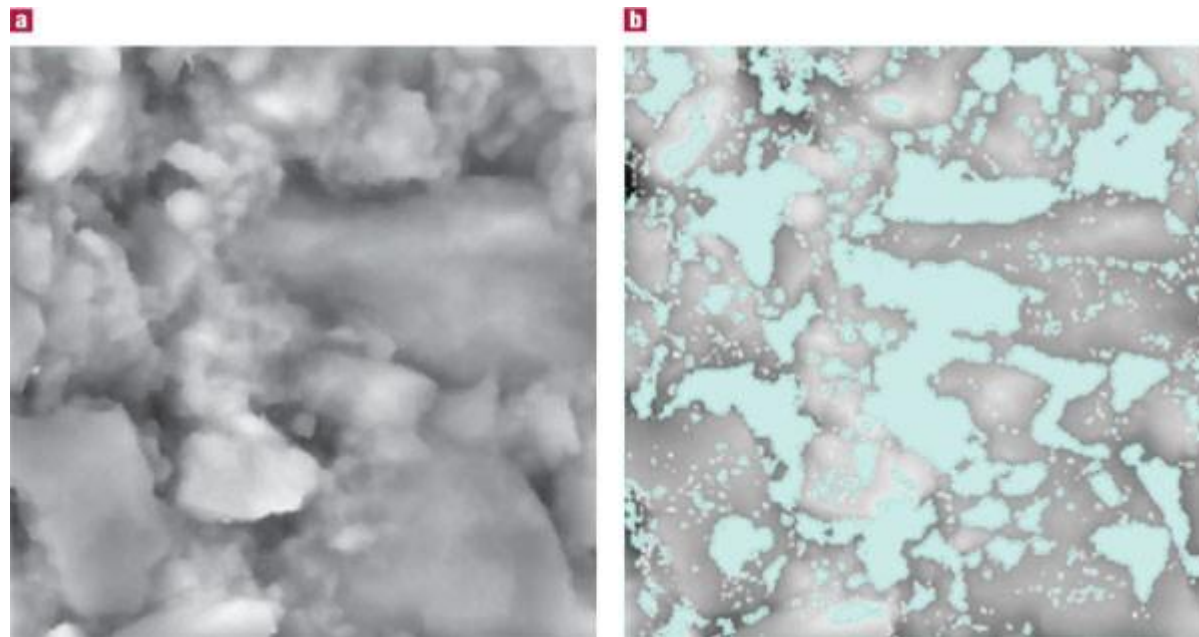
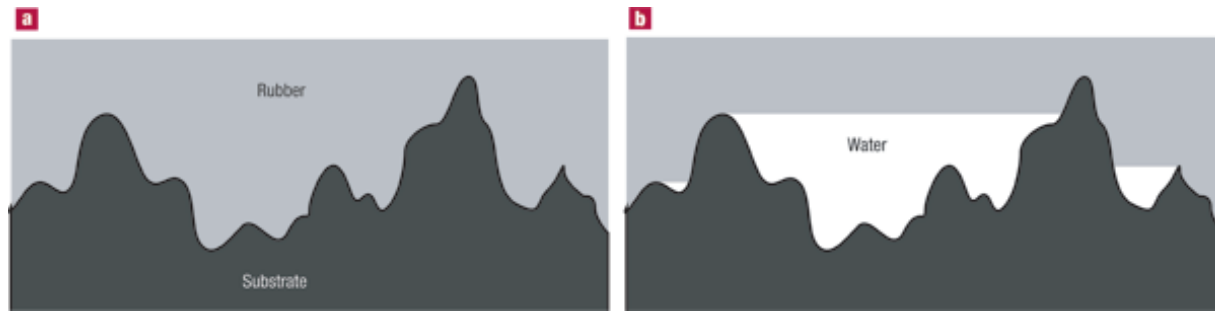
μ_c é o coeficiente de atrito cinético



A orientação da força de atrito é tal que se opõe à tendência dos deslizamentos.

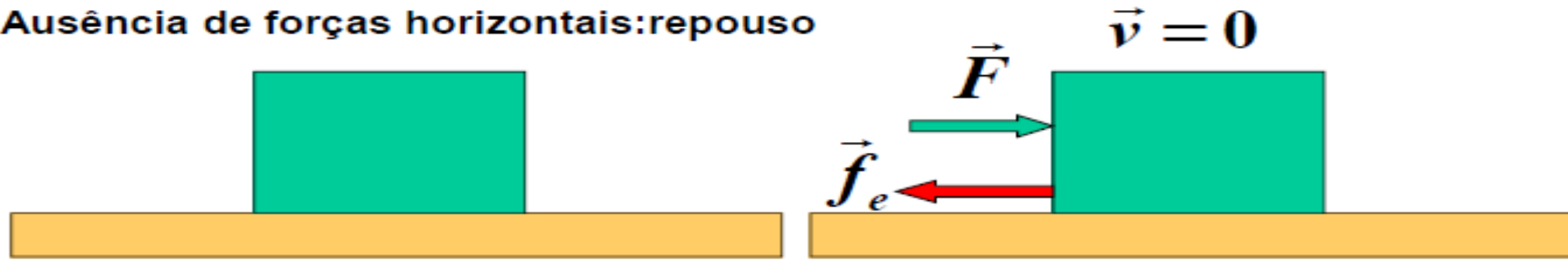


Por que derrapamos em uma estrada molhada ?

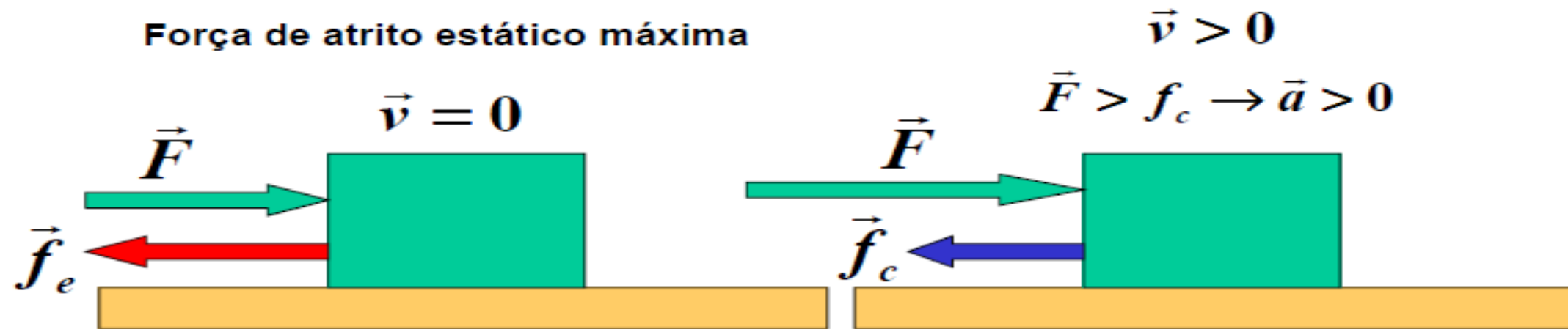


Atritos estático e cinético

Ausência de forças horizontais: repouso



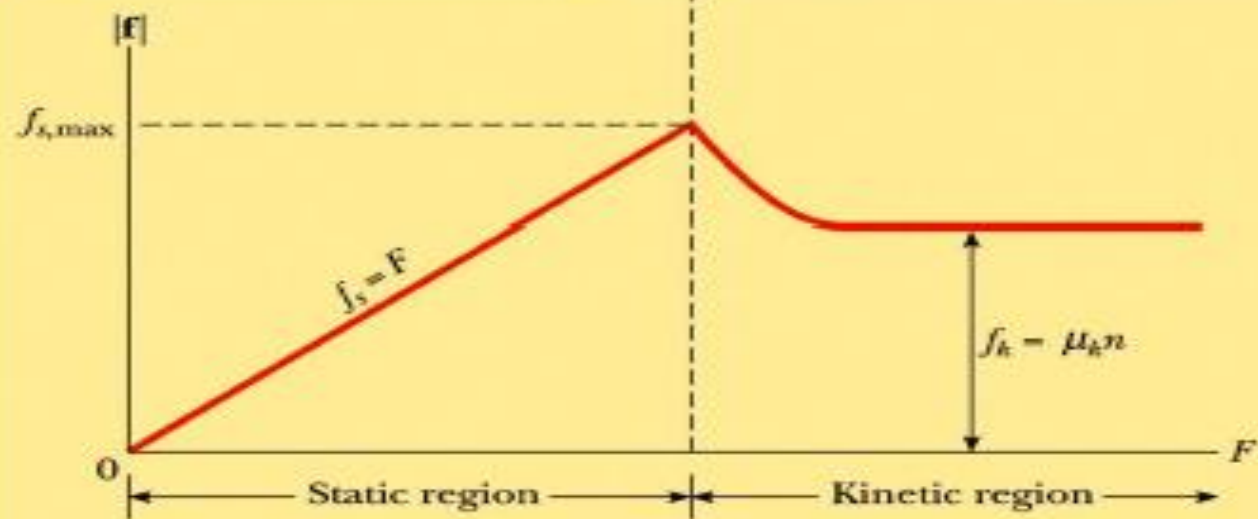
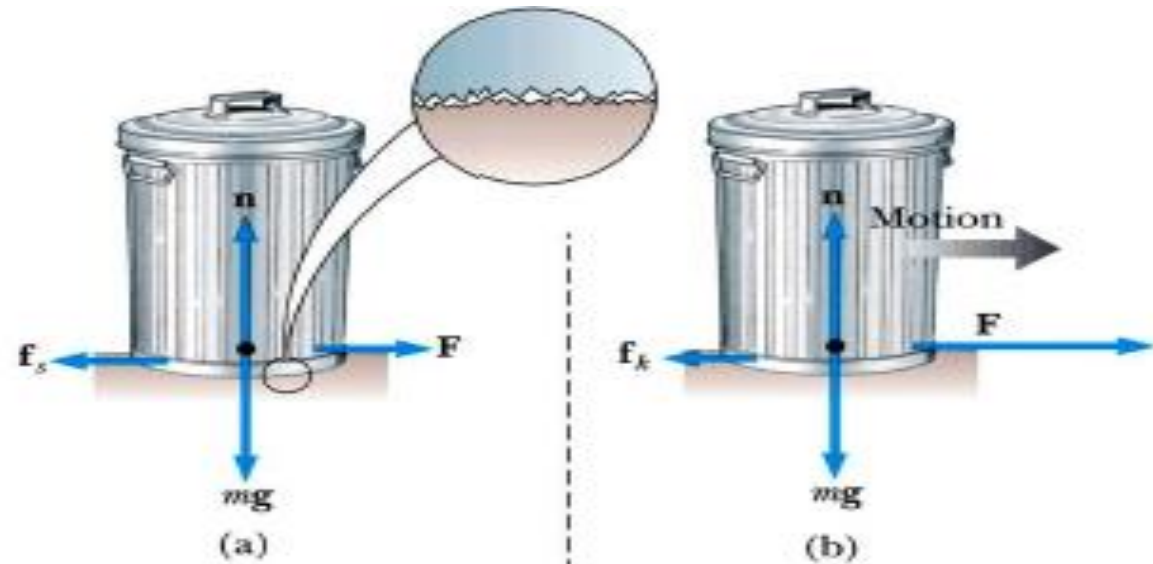
Força de atrito estático máxima



$$0 \leq f_e \leq \mu_e N$$

$$f_c = \mu_c N$$

Atrito Estático e Cinético



(c)

Materiais	μ_e	μ_c
Aço/aço	0.74	0.57
Alumínio/aço	0.61	0.47
Cobre/aço	0.53	0.36
Madeira/madeira	0.25-0.50	0.20
Vidro/vidro	0.94	0.40
Metal/metal(lubrificado)	0.15	0.06
Gelo/gelo	0.10	0.03