

Jane Rosa

---

# Transferência de Energia em Meios Modulados e Transporte de Partículas em Catracas

---

Tese apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física  
do Setor de Ciências Exatas da Universidade Federal do  
Paraná, como requisito parcial para a obtenção do grau  
de Doutor em Ciências

Orientador: Prof. Dr. Marcus Werner Beims

Curitiba

2008

# Parecer

*Para minha filha Caroline  
com muito amor.*

# Agradecimentos

Primeiramente eu gostaria de agradecer ao professor Marcus W. Beims pela orientação, paciência e confiança durante esses últimos anos (desde o mestrado, foram seis anos de dedicação!). Muito obrigada professor Marcus!

Meus sinceros agradecimentos aos professores Sérgio R. Lopes, Wilson M. Junior e Marcos G. E. da Luz que participaram da banca de pré-defesa e contribuíram com sugestões que ajudaram a melhorar a redação deste trabalho. Agradeço também aos professores: Amir O. Caldeira, Marcus A. M. de Aguiar, Ricardo L. Viana e José A. O. Freire que participaram da banca de defesa e que também contribuíram com sugestões que tornaram ainda melhor essa versão final da tese.

Meu muito obrigada vai também ao César Manchein pela colaboração no trabalho de pesquisa do qual resultou o quinto capítulo desta tese. Agradeço também a todos os professores, colegas e amigos do curso de pós-graduação com os quais tive o privilégio de conviver durante esses últimos anos e em especial ao pessoal da sala “ $\pi$ -B”: Jiusandro, Camila, Sílvio, Ezequiel, Adriano, César, Denize, Rashid, Paulo, Milton e Alexandre. Agradeço também a Tânia, secretária da pós-graduação, que foi sempre muito prestativa.

Agradeço ainda ao CNPq pelo financiamento da pesquisa, ao departamento de física e a pós-graduação pela estrutura física e computacional, em especial ao professor Carlos Carvalho pela boa administração e zelo com o suporte computacional que é oferecido aos estudantes.

Finalmente ofereço um agradecimento especial à minha filha amada Caroline

(minha linda!), ao meu maravilhoso esposo Jiusandro que esteve sempre ao meu lado (literalmente!), aos meus pais Tarcísio e Iracema que sempre me apoiaram, aos meus irmãos Cleiton e Joice e aos meus demais familiares que sempre me incentivaram.

*“Não sei como pareço aos olhos do mundo, mas eu mesmo vejo-me como um pobre garoto que brincava na praia e se divertia em encontrar uma pedrinha mais lisa uma vez por outra, ou uma concha mais bonita do que de costume, enquanto o grande oceano da verdade se estendia totalmente inexplorado diante de mim.”*

Isaac Newton.

# Resumo

Neste trabalho apresentamos um estudo sobre a dinâmica da transferência de energia em *meios* modulados e o transporte de partículas através dos múltiplos poços de um potencial assimétrico conhecido como *catraca*<sup>1</sup>. O modelo de estudo é caracterizado por um sistema de interesse, representado por uma partícula sujeita a um potencial do tipo *catraca*, interagindo com um número  $N$  finito de osciladores harmônicos que modelam um *meio* discreto, onde o espectro de frequências é bastante estruturado.

A dinâmica da transferência de energia foi estudada em detalhes como função do número  $N$  de osciladores do *meio*. Observamos que para valores baixos de  $N$  o *meio* pode induzir a transferência da partícula de um poço do potencial para outro. Neste regime de  $N$  verificamos que quando os efeitos da dissipação surgem, o sistema apresenta uma dinâmica caótica. Mostramos também que a energia média do sistema decai no tempo obedecendo uma lei de potência. No estudo referente ao transporte de partículas constatamos que a mobilidade máxima ocorre no limite onde os passeios de Lévy, responsáveis pelo comportamento super-difusivo, deixam de existir.

---

<sup>1</sup>Essa é a tradução para a palavra do inglês *ratchet*.

# Abstract

This work presents a study about the energy transfer dynamics in modulated environments, and the transport of particles in multiple asymmetric well potentials, known as ratchets. The model is described by a main system, represented by a particle under the influence of the ratchet potential, interacting with an environment composed of a finite number  $N$  of uncoupled harmonic oscillators where the frequencies spectrum is highly structured.

The energy transfer dynamics between system and environment was studied in details as a function of the number of oscillators  $N$  of the environment. For low values of  $N$ , it is observed that the environment induces a particle transfer between different potential wells. In this  $N$  regime, a chaotic dynamics for the system particle occur when dissipation effects emerge. We also show that the rate of decay of the mean energy from the system obeys a power law. The particles transport along the ratchet potential shows a maximal mobility at the border line when Levy walks, responsible for the superdiffusive behavior, disappear.



# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>1</b>
1.1	Dissipação em Sistemas Interagentes . . . . .	1
1.2	Catracas Brownianas . . . . .	4
1.3	Objetivos e Organização da Tese . . . . .	10
<b>2</b>	<b>Aspectos Teóricos</b>	<b>13</b>
2.1	O Movimento Browniano . . . . .	13
2.1.1	Passeio Aleatório e Vãos de Lévy . . . . .	15
2.2	Descrição Microscópica da Dissipação . . . . .	18
<b>3</b>	<b>O Modelo de Estudo</b>	<b>23</b>
3.1	Motivação Física - “Poucos” Graus de Liberdade . . . . .	23
3.2	Caracterizando o Meio Modulado . . . . .	27
3.2.1	Contínuo . . . . .	28
3.2.2	Discreto . . . . .	30
3.2.3	Meio Utilizado Neste Trabalho . . . . .	33
3.3	Equações de Movimento para as Catracas . . . . .	34
3.4	Tratamento Numérico . . . . .	38
<b>4</b>	<b>Transferência de Energia e Dissipação</b>	<b>40</b>
4.1	Dinâmica da Transferência de Energia . . . . .	40
4.1.1	Redistribuição Interna de Energia . . . . .	41
4.1.2	Transferência da Partícula . . . . .	47

4.2	A Dependência da Taxa de Dissipação com o Meio . . . . .	50
<b>5</b>	<b>Surgimento da Dissipação sob a Ótica de Dinâmica não Linear</b>	<b>53</b>
5.1	Transição: Conservativo - Dissipativo . . . . .	53
5.2	Análise das Séries Temporais . . . . .	56
5.2.1	Expoentes de Lyapunov . . . . .	57
5.2.2	Trajetória Reconstruída e Dimensão de Imersão . . . . .	58
5.2.3	Caso $N = 0$ . . . . .	61
5.2.4	Caso $1 \leq N \leq 12$ . . . . .	61
5.2.5	Caso $13 \leq N \leq 20$ . . . . .	62
5.2.6	Caso $N > 20$ . . . . .	65
<b>6</b>	<b>Transporte de Partículas</b>	<b>69</b>
6.1	O Mecanismo de Transporte . . . . .	69
6.2	Corrente de Partículas . . . . .	71
6.3	Comportamento Difusivo . . . . .	74
6.4	Passeios de Lévy e Mobilidade Máxima . . . . .	79
<b>7</b>	<b>Conclusões</b>	<b>85</b>
<b>A</b>	<b>Derivação Explícita da Equação de Langevin Generalizada</b>	<b>91</b>
<b>B</b>	<b>Valor Médio e Função de Autocorrelação da Força <math>f(t)</math></b>	<b>97</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>101</b>

# 1

## Introdução

### 1.1 Dissipação em Sistemas Interagentes

Quando queremos tratar um sistema físico no qual, por alguma razão, não temos acesso a todas as informações necessárias a respeito dos estados que o caracterizam, temos que recorrer a uma abordagem estatística. Um exemplo é a impossibilidade prática de descrevermos a evolução das equações de movimento microscópicas que regem um sistema macroscópico, isso porque um sistema macroscópico é constituído por muitas partículas e não temos acesso ao estado inicial de cada uma delas. O movimento irregular (Browniano) de uma partícula imersa num líquido é um exemplo de um sistema dessa natureza. Imagine que se queira descrever o movimento da partícula Browniana levando em conta as equações de movimento de cada uma das moléculas que constituem o líquido. Isto seria uma tarefa impossível porque não temos como saber a posição e velocidade inicial de cada uma das partículas envolvidas no processo. Diante dessa falta de conhecimento perante a natureza, o que nos cabe é tratar tais sistemas de forma estatística e admitir a existência de flutuações nos resultados observados.

Podemos aplicar um tratamento estatístico tanto em sistemas que possuem muitos graus de liberdade quanto em sistemas com poucos graus de liberdade, sem-

pre que alguma incerteza está associada as grandezas de interesse. O tratamento estatístico aplicado a poucos graus de liberdade é uma ferramenta bastante útil tendo em vista o crescente interesse científico em tratar sistemas de escalas nanométricas e microscópicas, os quais normalmente são governados pela Mecânica Estatística de não-equilíbrio [1, 2]. Nesse contexto damos ênfase aos processos dissipativos que surgem devido a interação de um sistema com o *meio* em que se encontra. Alguns exemplos de sistemas dessa natureza são: efeitos de dissipação em processos de fotoisomerização [3], processos de descoerência e relaxação de spin [4–6], relaxação e transferência de energia em sistemas moleculares [7–9], processo de tunelamento quântico em sistemas dissipativos [10, 11], e o transporte direcional de partículas envolvendo os *motores moleculares*<sup>1</sup> [12–15].

Apesar do grande esforço da comunidade científica no estudo dos processos que envolvem dissipação, ainda hoje não se tem um entendimento claro de sua origem. Podemos encontrar trabalhos recentes [16, 17] que propõe modelos teóricos para dissipação, sendo portanto um assunto de atual interesse científico. As descrições teóricas para modelar os efeitos da dissipação usualmente consideram um sistema global conservativo, que é representado por um sistema de interesse acoplado com um *meio* (sistema de interesse + *meio*) [11, 16, 18–20]. Embora o sistema global seja conservativo, os efeitos da interação possibilitam trocas de energia entre o sistema de interesse e o *meio*, de modo que o sistema de interesse sozinho pode ser interpretado como um sistema dissipativo.

Neste trabalho objetivamos o estudo da dissipação modelada a partir da descrição de um sistema total conservativo (sistema de interesse + *meio*). Estamos particularmente interessados nas trocas de energias entre as diferentes partes do sistema global quando o sistema de interesse é acoplado com um *meio* representado por um número finito de constituintes, embora não busquemos a verificação de um limite estatístico ou cálculos de grandezas estatísticas do problema.

---

<sup>1</sup>Proteínas celulares capazes de converter energia química em força e movimento mecânico, os quais são responsáveis por exemplo: pelo transporte de íons e prótons em processos intracelulares.

Um trabalho histórico que buscou por respostas sobre questões importantes relacionadas com a Mecânica Estatística irreversível é o trabalho de Fermi-Pasta-Ulam [21], que em 1955 procurou verificar como um sistema de muitos graus de liberdade é conduzido de uma situação inicial de não-equilíbrio, para uma situação de equilíbrio. O modelo de Fermi-Pasta-Ulam é descrito por uma rede unidimensional de  $N - 1$  osciladores não-harmônicos acoplados. O principal objetivo era verificar a equipartição de energia entre os modos de vibração quando o número  $N$  de osciladores fosse relativamente grande. Porém, o que eles observaram foi a recorrência da energia entre os modos de vibração. Esse fato só foi explicado bem mais tarde com a ajuda da teoria do caos que mostrou que a equipartição de energia só é encontrada além de um limite de forte estocasticidade<sup>2</sup> [22].

Na literatura podemos encontrar muitos trabalhos que usam um número finito de constituintes para estudar as transições de uma dinâmica microscópica para um comportamento macroscópico. Entre outros trabalhos podemos citar: os efeitos de descoerência em um sistema de dois níveis acoplado a um banho finito de graus de liberdade [23], cálculo da flutuação de energia de um sistema acoplado com um reservatório térmico finito [24] e a manifestação macroscópica de transição entre regimes dinâmicos numa rede unidimensional do modelo de Fermi-Pasta-Ulam acoplada a uma impureza [25].

O trabalho proposto por esta tese se encaixa no contexto da Mecânica Estatística de não-equilíbrio aplicada a poucos graus de liberdade, ao qual procuramos também dar um enfoque de dinâmica não-linear. Estudamos um sistema de interesse acoplado a um *meio* constituído por “poucos” graus de liberdade, na ordem de dezenas ou centenas. Denominamos “poucos” graus de liberdade do ponto de vista estatístico, mas que na verdade representam muitos graus de liberdade quando analisamos o problema do ponto de vista dinâmico. A descrição do sistema de interesse é motivada pelas chamadas *catracas Brownianas*, as quais iremos discutir na próxima

---

<sup>2</sup>A expressão em inglês é *strong stochasticity threshold* e significa o limite de transição suave, entre um regime de fraco e forte caos, na dinâmica de um sistema.

seção.

## 1.2 Catracas Brownianas

Uma partícula Browniana sujeita a um potencial periódico assimétrico e uma força externa dependente do tempo, com média nula, pode modelar um sistema denominado de *catraca Browniana*. Esses sistemas (em situações reais) podem ser de escalas microscópicas — na ordem de alguns micrômetros — e são capazes de transportar partículas com velocidade macroscópica diferente de zero, embora em média as partículas não sofram a ação de uma força macroscópica direcionada. O interesse nestes sistemas é motivado principalmente por problemas da biofísica molecular, onde mecanismos desse tipo são propostos para explicar os *motores moleculares* [12–15]. Atualmente as *catracas Brownianas* vêm sendo amplamente estudadas não apenas do ponto de vista clássico [26–30] mas também quântico [31–34]. Esses estudos teóricos e experimentais têm apontado para possíveis aplicações desses sistemas em diferentes áreas da ciência [35]. Essas pesquisas indicam a possibilidade de se construir novos dispositivos que podem ser empregados na separação de pequenas partículas [36–39] utilizando as *catracas Brownianas*. Além disso, outras aplicações práticas na área da física da matéria condensada mostram a possibilidade de melhorar o desempenho de dispositivos supercondutores através da redução da densidade de vórtices<sup>3</sup> e também suavizando superfícies no processamento de filmes finos de alta qualidade [40, 41].

O primeiro protótipo, talvez o mais popular, de um dispositivo do tipo *catraca Browniana* foi idealizado por Feynman em seu *Lectures on Physics* [42]. Feynman imaginou um motor capaz de gerar movimento macroscópico a partir de forças de origem puramente microscópicas. Para isso, imaginou um dispositivo constituído por uma catraca conectada a uma hélice por meio de um eixo, ambas separadas

---

<sup>3</sup>Vórtices (ou linhas de fluxo) podem ser induzidas nos materiais supercondutores por pequenos campos magnéticos provocando dissipação de energia e gerando ruído interno, deste modo, limitando o funcionamento dos dispositivos supercondutores.

por duas caixas perfeitamente isoladas contendo gases com a mesma temperatura ( $T_1=T_2$ ), veja a Fig. 1.1. Considerando que o dispositivo é reduzido a escalas microscópicas, os impactos das moléculas do gás sobre a hélice do motor — decorrentes do movimento aleatório das moléculas por causa da agitação térmica — podem fornecer energia para o motor girar livremente.

A idéia é retificar este movimento aleatório com a ajuda de uma lingüeta, fazendo com que a catraca gire mais facilmente em um sentido que no sentido oposto, e com isso, realizando trabalho suficiente para levantar um pequeno objeto que é preso no eixo do motor. Porém, contrariando as expectativas, nenhum movimento preferencialmente direcionado pôde ser observado. No entanto, Feynman mostrou

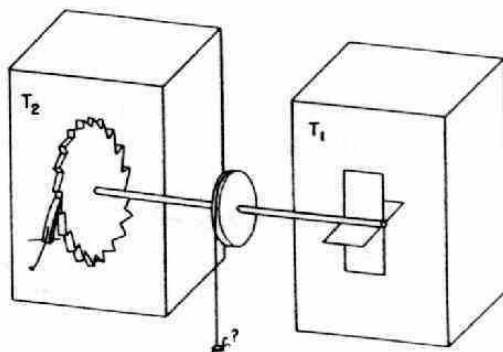


Fig. 1.1: Motor microscópico idealizado por Feynman. Figura extraída da referência [42].

que quando o dispositivo é tratado de forma mais consistente<sup>4</sup>, o movimento direcionado da catraca é obtido apenas quando a temperatura do gás onde encontram-se a catraca e a lingüeta é menor do que a temperatura do gás onde está imerso a hélice, neste caso, supõe-se  $T_1 > T_2$ . E assim, surgiu a concepção de um motor Browniano, fonte que serviu de inspiração nas pesquisa dos *motores moleculares*. Mas, uma importante questão é: como tratar teoricamente esse tipo de sistema?

Os modelos contemporâneos de uma *catraca Browniana* não têm a mesma aparência física do motor de Feynman, considerando que na prática manter gradi-

<sup>4</sup>Maiores detalhes são obtidos na Ref. [42].

entes térmicos em pequenas distâncias é praticamente impossível. Por outro lado, as pesquisas científicas nessa área têm apontado o uso de outras fontes de energia, em vez de gradientes térmicos, para o funcionamento de um motor microscópico. A energia pode ser fornecida por flutuações externas [26, 43], ou por reações químicas fora de equilíbrio [44]. Assim, o movimento Browniano pode ser induzido a fim de se obter transporte direcionado de partículas em sistemas que apresentam quebra de simetria espacial, mesmo que o sistema seja isotérmico.

Neste contexto, Marcelo O. Magnasco [26] propôs um modelo teórico para uma *catraca Browniana*. Ele representou a *catraca* por meio de um potencial periódico  $V(x)$  que apresenta quebra de simetria espacial, como ilustrado na Fig. 1.2. Considerou

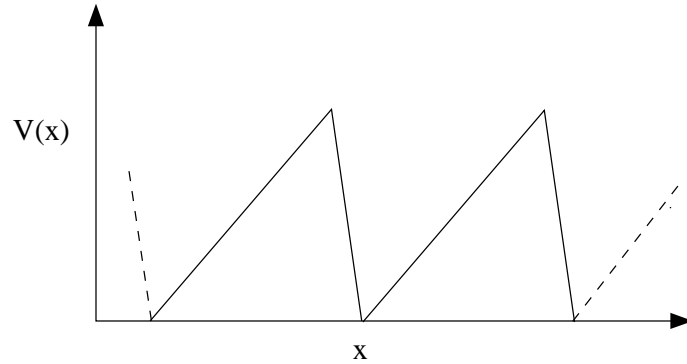


Fig. 1.2: Potencial periódico assimétrico.

então, que uma partícula é submetida a esse potencial e a forças de origem determinísticas e estocásticas. O modelamento desse sistema, incluindo todas as forças que atuam sobre a partícula, foi feito através da conhecida equação de Langevin<sup>5</sup> [1, 45], expressa na forma

$$\alpha \dot{x} = f(x) + \zeta(t) + F(t), \quad (1.1)$$

onde  $\alpha$  é uma constante de amortecimento (com unidades de massa/tempo),  $x$  é a variável representando a posição da partícula, e portanto,  $\alpha \dot{x}$  é uma força de amortecimento. Os termos do lado direito são: o campo de força devido o potencial

---

<sup>5</sup>Leva esse nome devido as contribuições de Langevin em 1908. Neste caso específico, a equação é de primeira ordem, pois o termo de inércia  $m\ddot{x}$  foi desprezado.



$V(x)$  que é dado pela equação  $f(x) \equiv -\partial V(x)/\partial x$ , o ruído térmico Gaussiano  $\zeta(t)$  que obedece a propriedade  $\langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle = 2\alpha k_B T \delta(t-t')$ , e finalmente a força externa dependente do tempo  $F(t)$ , que pode ser de origem determinística ou estocástica, com média temporal zero, e que é responsável pelo movimento direcionado da partícula.

No seu trabalho Magnasco mostrou que o transporte direcionado no domínio Browniano é obtido sob duas condições: com a quebra da simetria espacial e com a quebra do equilíbrio térmico. No modelo proposto, veja a Eq. (1.1), a assimetria espacial é dada pelo potencial  $V(x)$  e a força  $F(t)$  é responsável pelas flutuações fora do equilíbrio.

Teoricamente as *catracas Brownianas* são descritas por um sistema de interesse acoplado a um banho térmico ou *meio*, e possivelmente sob a ação de uma ou mais forças externas. Um banho térmico (de um ponto de vista microscópico) é representado por um número elevado de graus de liberdade que são modelados normalmente por osciladores harmônicos. A forma usual de tratar este problema consiste em integrar separadamente as equações de movimento dos osciladores harmônicos [18, 19]. Deste modo, a dinâmica do sistema pode ser determinada através da solução de uma única equação, ou seja, da equação de Langevin. Nessa abordagem, a influência do banho térmico — o qual é constituído por um número infinito de osciladores harmônicos — sobre a dinâmica do sistema é feita via duas forças: uma força estocástica e uma força de amortecimento. No caso da *catraca Browniana* descrita pela Eq. (1.1), o sistema é representado pela partícula mais o potencial  $V(x)$ , enquanto as forças  $\alpha \dot{x}$  e  $\zeta(t)$  descrevem a ação do *meio* (que neste caso representa um banho térmico) sobre o sistema, e ainda temos  $F(t)$  representando a força externa que atua sobre a partícula.

O progresso nas pesquisas em relação as *catracas Brownianas* conta com contribuições teóricas [27, 28, 46–48] e experimentais [49, 50], que embora usem os mesmos princípios básicos, podem apresentar variações nos seus modelos. Entre esses, podemos citar como exemplo um modelo bastante popular na literatura que é

caracterizado por um potencial assimétrico do tipo *catraca liga-desliga*<sup>6</sup> [49–51], diferindo da Eq. (1.1) nos seguintes aspectos: a amplitude do potencial  $V(x)$  é variável no tempo, e a força externa  $F(t)$  não é considerada. Um outro modelo que emprega basicamente o mesmo mecanismo de operação de uma *catraca liga-desliga*, é descrito por um potencial periódico assimétrico fixo no tempo, mas neste caso as partículas experimentam modulações temporais periódicas da temperatura [47]. Essencialmente, em ambos os casos o ruído térmico é indispensável para obter uma corrente de partículas diferente de zero. Na literatura encontramos também um modelo em que o ruído térmico ( $\zeta(t)$  na Eq. (1.1)) é excluído e, diferentemente da equação proposta por Magnasco, o termo de inércia ( $m\ddot{x}$ ) é inserido na Eq. (1.1) [28]. Esse modelo é conhecido na literatura como *catraca determinística*, e sua dinâmica pode ser bastante complexa.

Trabalhos experimentais sobre o efeito *catraca* mostraram-se bastante promissores mediante a possibilidade de construção de novos dispositivos capazes de separar partículas com diferentes tamanhos, cujas as dimensões são da ordem de micrômetros. A Fig. 1.3 mostra um protótipo de um dispositivo [38] dessa natureza. Na Fig. 1.3 (a) podemos ver a imagem de um pedaço de silício constituído por um grande número de poros dispostos paralelamente que são praticamente idênticos, com diâmetro de  $\sim 1 \mu m$ . Ao longo do eixo de cada poro o diâmetro apresenta uma variação periódica e assimétrica, lembrando a forma da *catraca*, veja a imagem na Fig. 1.3 (b). Uma ilustração do dispositivo completo é mostrada na Fig. 1.3 (c). A extensão dos poros de silício, cuja as formas lembram *catracas*, vai de  $-z_P$  até  $z_P$  e são ilustrados na cor cinza escuro. Os poros estão completamente preenchidos com líquido contendo duas espécies diferentes de partículas. O líquido é bombeado periodicamente para frente e para trás através dos poros — o bombeamento é indicado pelo pistão do lado esquerdo da Fig. 1.3 (c) — e a direção da corrente de partículas depende sensivelmente do tamanho das partículas envolvidas, o que possibilita a separação das partículas de tamanhos diferentes em cada lado da base do dispositivo.

---

<sup>6</sup>No inglês usa-se o termo *on-off ratchet*.

No aparato real o comprimento de  $2z_P$  é da ordem de  $100 - 200 \mu m$ , e o comprimento  $z_B - z_P$  de cada base é de  $20 - 200 \mu m$ . As outras extensões do dispositivo são da ordem de  $1 - 2 cm$ .

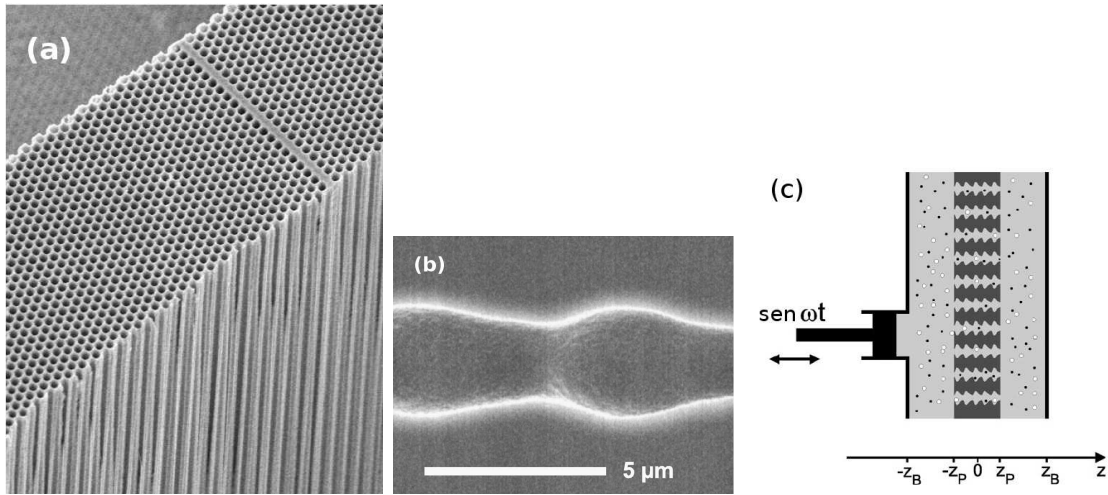


Fig. 1.3: Protótipo de um dispositivo capaz de separar pequenas partículas. Figura adaptada da Ref. [38].

Recentemente outro trabalho experimental [52] mostrou que superfícies com forma de *catraca* apresentam alta eficiência no transporte direcionado de gotas de líquidos na presença de gradientes de temperatura. Observe a sequência de imagens na Fig. 1.4 mostrando o movimento de uma gota através da superfície tipo *catraca*.

Esse resultado abriu a possibilidade de aplicações tecnológicas, como por exemplo, no resfriamento de microprocessadores de alto desempenho.

Os diversos estudos teóricos que encontramos na literatura sobre as *catracas Brownianas*, ou simplesmente sobre o *efeito catraca*, examinam em detalhes esses sistemas sob diferentes aspectos, por exemplo: a dependência da corrente, ou seja, do fluxo de partículas, como função da forma do potencial assimétrico e da forma do espectro de potências do ruído térmico. Foi demonstrado que o surgimento de correntes reversas está relacionado com a característica do espectro de frequências [53]. O estudo de correntes reversas também é explorado nas *catracas determinísticas* em regimes de transporte caóticos e periódicos [29, 54, 55]. Também encontramos trabalhos recentes sobre sincronização em *catracas determinísticas* acopladas [30, 56,

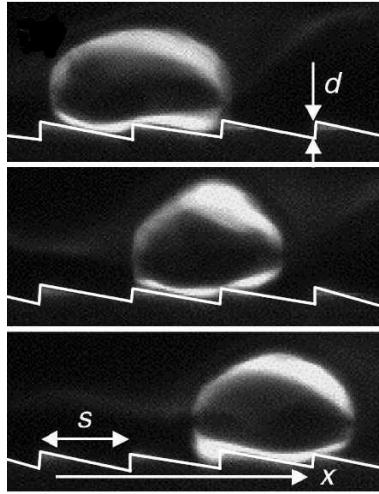


Fig. 1.4: Seqüência de imagens que mostram o movimento da gota através da superfície assimétrica ( $d=0,3$  mm e  $s=1,5$  mm). Essa figura foi adapta da Ref. [52].

57]. Pesquisas sobre a eficiência dos *motores Brownianos* também foram verificados em função da temperatura, massa, amplitude do coeficiente de amortecimento e da força externa [58]; alguns trabalhos também propõe novas definições para o cálculo da eficiência nessas máquinas microscópicas [59, 60]. As *catracas* quânticas também têm sido analisadas, como exemplo: o estudo do efeito de campos de lasers sobre o transporte de elétrons através de fios moleculares, onde é observado o surgimento de correntes reversas com uma dependência não linear em relação a amplitude e a frequência do campo de laser [33]. Outro exemplo é o estudo de uma *catraca* quântica cujo análogo clássico é caótico, onde o modelo proposto para o estudo do transporte permite fazer a correspondência para o limite clássico [34].

### 1.3 Objetivos e Organização da Tese

A presente tese está inserida no contexto da Mecânica Estatística de não-equilíbrio, envolvendo os processos de dissipação e transporte em sistemas que são acoplados com um *meio* finito. Motivada também pelo assunto que envolve as *catracas Brownianas*.

O objetivo geral dessa tese é realizar um estudo da dinâmica de transferência

de energia, dissipação e transporte de partículas em potenciais assimétricos, empregando a descrição de um *meio* modulado. Para isso, tomamos como ponto de partida a formulação clássica do modelo de Caldeira e Leggett [10, 11], que descreve um sistema de interesse acoplado linearmente com um reservatório constituído por  $N$  osciladores harmônicos. A partir da integração numérica das  $2N + 2$  equações de movimento do sistema global, realizamos o estudo dos tópicos mencionados acima.

Diferente do conceito usual de reservatório térmico, representado por infinitos osciladores, propomos aqui a descrição de um *meio* finito, ou seja, um *meio* representado por um número  $N$  finito de osciladores harmônicos. Neste *meio* finito, que chamamos de *meio* modulado, o espectro de frequências é bastante estruturado devido a ausência de muitas frequências dentro do intervalo de interesse.

O sistema de interesse é representado por uma partícula sujeita a um potencial periódico e assimétrico, ou seja, um potencial *catraca*. Essa escolha do potencial foi feita inspirada nas *catracas Brownianas*, visando o estudo do transporte direcionado de partículas através dos múltiplos poços do potencial.

Os objetivos mais específicos contemplam um estudo detalhado da dinâmica de transferência de energia entre sistema e *meio* [61], a caracterização do processo dinâmico da partícula na transição de um sistema conservativo para dissipativo, contando com o auxílio de algumas ferramentas da dinâmica não linear [62]. Toda essa análise é realizada quando o número  $N$  de osciladores, que constituem o *meio*, cresce. O estudo do transporte direcionado de partículas tem como meta caracterizar o processo difusivo envolvido e verificar sob quais condições, e de que maneira, é possível obter uma máxima corrente [63]. Os trabalhos mencionados neste parágrafo [61–63] referem-se aos resultados que foram obtidos com este trabalho.

A tese está dividida em sete capítulos. A introdução no primeiro capítulo, aqui apresentado, teve como objetivo contextualizar o tema de estudo proposto por este trabalho. No segundo capítulo são apresentados alguns aspectos teóricos que julgamos relevantes para o entendimento da tese. O modelo de estudo é caracterizado no terceiro capítulo, onde comentamos sobre a motivação física e apresentamos

as equações de movimento. O quarto capítulo apresenta os resultados referentes a dinâmica de transferência de energia e do processo de dissipação de energia. No quinto capítulo são apresentados os resultados da análise não linear das séries temporais do sistema de interesse. Os resultados sobre o transporte e corrente de partículas são discutidos no sexto capítulo. E finalmente no sétimo e último capítulo, são apresentadas as conclusões.

## 2

# Aspectos Teóricos

## 2.1 O Movimento Browniano

O interesse em estudar sistemas que exibem movimento aleatório tem sido tema de pesquisa por décadas; desde 1905 quando Einstein explicou a origem do movimento Browniano [64]. Em seu trabalho, Einstein mostrou que a difusão de pequenas partículas suspensas num líquido ocorre devido ao movimento Browniano. A partícula Browniana sofre constantes colisões com as moléculas do fluido, essas colisões são resultantes do movimento térmico aleatório das moléculas do fluido. A Fig. 2.1 mostra um exemplo de uma trajetória de uma partícula Browniana. Independentemente de Einstein, Langevin propôs que a força sobre a partícula devido às moléculas do fluido possui duas componentes [45,65]: (i) uma força flutuante que muda de direção e amplitude freqüentemente (quando comparada com qualquer outra escala de tempo do sistema) e cuja média temporal é nula; (ii) uma força dissipativa de amortecimento, que diminui o movimento induzido pela força flutuante e que depende da velocidade da partícula.

Considerando o caso unidimensional, a equação de Langevin para o movimento Browniano é expressa por [1]

$$m\ddot{x} = -\alpha\dot{x} + f(t) , \tag{2.1}$$

onde  $x$  e  $v = \dot{x}$  são, respectivamente, a posição e a velocidade da partícula Browniana

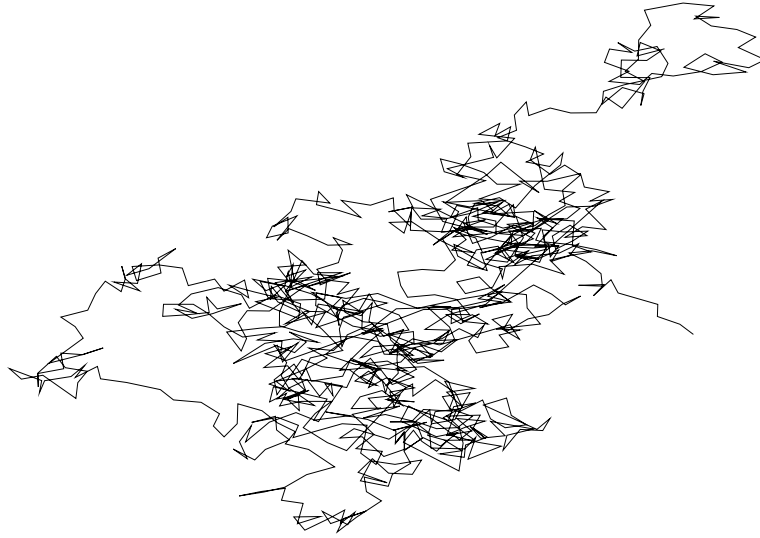


Fig. 2.1: Caminho irregular descrito por uma partícula Browniana.

de massa  $m$ . O termo  $\alpha\dot{x}$  representa a força dissipativa e  $f(t)$  é a força flutuante. A constante  $\alpha$  e a força  $f(t)$  são grandezas associadas ao fluido. Ambas as forças, modelam e descrevem o efeito que o fluido exerce sobre a dinâmica da partícula. Em geral, a força  $f(t)$  é descrita por um processo estocástico Gaussiano [66,67], que possui as seguintes propriedades:

$$\langle f(t) \rangle = 0, \quad (2.2)$$

$$\langle f(t)f(t') \rangle = 2\alpha k_B T \delta(t - t'). \quad (2.3)$$

A primeira relação, Eq. (2.2), significa que a força média devido às moléculas do fluido é nula, em média, enquanto a função correlação, Eq. (2.3), nos diz que os consecutivos impactos da partícula Browniana com as moléculas do fluido são independentes. A constante  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$  a temperatura.

A solução da Eq. (2.1) é dada por [1,45]

$$x = x_0 + \frac{v_0}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{1}{m\gamma} \int_0^t dt'' f(t'') (1 - e^{\gamma(t''-t)}), \quad (2.4)$$

onde  $\gamma = \alpha/m$ ,  $x_0$  e  $v_0$  são, respectivamente, posição e velocidade da partícula em  $t = 0$ . Tomando a média e usando a propriedade Eq. (2.2), o deslocamento médio



da partícula é

$$\langle x \rangle = x_0 + \frac{v_0}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}). \quad (2.5)$$

A variância  $\sigma^2$  (desvio quadrático médio) é obtida usando as equações (2.4) e (2.5), e expressa na forma

$$\sigma^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{2k_B T}{m\gamma} \left[ t - \frac{2}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{1}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}) \right]. \quad (2.6)$$

Para tempos longos  $t \rightarrow \infty$ , o termo dominante é proporcional a  $t$ , logo

$$\sigma^2 = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{2k_B T}{m\gamma} t = 2Dt, \quad (2.7)$$

onde  $D = k_B T / \alpha$  é o coeficiente de difusão. A função distribuição de probabilidades das posições, considerando  $x_0 = 0$  e  $v_0 = 0$ , para tempos longos é dada por

$$P(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi Dt}} \exp\left\{-\frac{x^2}{2Dt}\right\}. \quad (2.8)$$

Portanto, se imaginarmos um conjunto de partículas Brownianas inicialmente localizadas em  $x_0 = 0$ , com o passar do tempo essas partículas difundem-se devido as colisões com as moléculas do fluido, e depois de algum tempo, essas partículas encontram-se distribuídas em torno de  $x_0 = 0$ , obedecendo a distribuição Gaussiana de acordo com a Eq. (2.8). Esse resultado é equivalente ao resultado para o passeio aleatório [1, 65]. No entanto, nem todo passeio aleatório apresenta exatamente o mesmo comportamento, como veremos na sequência, o passeio aleatório é classificado de acordo com o comportamento difusivo.

### 2.1.1 Passeio Aleatório e Vãos de Lévy

De acordo com o que foi apresentado anteriormente, o caminho irregular que a partícula Browniana descreve pode ser modelado por um passeio aleatório [65], pois a cada colisão a partícula move-se para uma nova direção. No entanto, esse movimento que ocorre em proporções microscópicas, com o passar do tempo, resulta num espalhamento difusivo da partícula, ou seja, um resultado macroscópico.

A conexão entre os conceitos físicos da difusão e os resultados matemáticos do passeio aleatório é feita através do Teorema do Limite Central [1, 45, 65]. Esse

teorema diz que a soma de muitas variáveis aleatórias independentes e com mesma distribuição de probabilidade tende a distribuição Gaussiana.

Os efeitos da difusão são medidos pelo aumento temporal da variância  $\sigma^2$  de um conjunto de partículas que se movimentam aleatoriamente,

$$\sigma^2(t) = \langle x^2(t) \rangle - \langle x(t) \rangle^2 = 2Dt, \quad (2.9)$$

onde  $D$  é a constante de difusão. A raiz quadrada da variância,  $\sigma$ , é uma medida do tamanho característico do conjunto de partículas aleatórias, e a constante  $D$  determina a razão de crescimento desse tamanho característico. Por exemplo, se colocarmos uma gota de corante num copo de água, essa vai espalhar-se mais rapidamente (constante de difusão grande) do que se colocássemos num copo com xarope (constante de difusão pequena).

Consideramos os passos individuais de um caminhante aleatório, com comprimentos aleatórios  $l$ , que obedecem uma função distribuição de probabilidade  $P(l)$ . Logo, a probabilidade de um passo com comprimento  $l + dl$  é dada por  $P(l)dl$ . O Teorema do Limite Central mostra que a constante de difusão é escrita como

$$D = \frac{\langle l^2 \rangle - \langle l \rangle^2}{2T}, \quad (2.10)$$

onde  $T$  é o tempo característico entre cada passo, e os momentos  $\langle l \rangle$  e  $\langle l^2 \rangle$ , são calculados da distribuição  $P(l)$ :

$$\langle l^n \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dl l^n P(l). \quad (2.11)$$

Observe que a conexão da função distribuição de probabilidade com a constante de difusão é feita através dos momentos  $\langle l \rangle$  e  $\langle l^2 \rangle$ . No caso do movimento Browniano, essa função distribuição de probabilidade é uma Gaussiana, logo, todos os momentos são bem definidos. No entanto, caminhantes aleatórios cuja função distribuição de probabilidade apresenta um segundo momento infinito, ou seja,  $\langle l^2 \rangle = \infty$ , tem atraído a atenção dos físicos nas últimas três décadas [68–72]. Neste caso, o Teorema do Limite Central não é aplicado, e a constante de difusão  $D$  não é definida.

Os matemáticos foram os primeiros a estudar o passeio aleatório com segundo momento infinito, em particular Paul Lévy [69, 70]. Por esse motivo, essa classe especial de passeio aleatório é denominada de passeios de Lévy ou vôos de Lévy [69].

Fisicamente o que significa um segundo momento infinito,  $\langle l^2 \rangle = \infty$ ? A primeira vista pode parecer paradoxal um caminhante aleatório apresentar uma média infinita para o comprimento quadrado do passo, afinal de contas, cada passo deve ter um comprimento finito. Porém, uma média infinita do comprimento quadrado do passo significa apenas que, apesar dos longos passos serem raros, eles não são tão raros tal que o termo médio  $\langle l^2 \rangle$  seja finito. Por exemplo, considere o caso onde o comprimento de cada passo possa assumir os valores discretos  $m$  variando de 1 até infinito, com uma probabilidade  $P(m) \propto 1/m^3$ . A probabilidade de ocorrer qualquer dado passo pode ser calculada, e a soma:  $\sum_{m=1}^{\infty} 1/m^3$  é finita, essa é uma escolha razoável para uma maneira de tomar passos de comprimentos aleatórios. No entanto, considerando a média do comprimento quadrado do passo:  $\langle m^2 \rangle = \sum_{m=1}^{\infty} (1/m^3) \times (m^2)$ , essa é infinita.

Lévy mostrou [69] que se a função distribuição de probabilidade  $P(l)$  decai como uma lei de potência,

$$P(l) \sim l^{-\mu} , \quad (2.12)$$

logo,  $\langle l^2 \rangle = \infty$  para  $\mu < 3$ , e a integral na Eq. (2.11) (com  $n = 2$ ) diverge. Neste caso, a variância aumenta temporalmente mais rápida do que o caso linear da Eq. (2.9). Dizemos então que a difusão é anômala e escrevemos:

$$\sigma^2(t) \sim t^\nu , \quad (2.13)$$

com  $1 < \nu < 2$ , o que caracteriza um movimento super-difusivo, justamente o caso dos vôos de Lévy. No entanto, para difusão normal devemos ter  $\nu = 1$  e  $\mu > 3$ .

A Fig. 2.2 (a) mostra um exemplo de passeio aleatório com difusão normal, e a Fig. 2.2 (b) mostra uma trajetória típica de passeio aleatório com vôos de Lévy. Em ambos os casos temos  $P(l) \sim l^{-\mu}$ , onde  $\mu = 3,8 > 3$  para o passeio aleatório

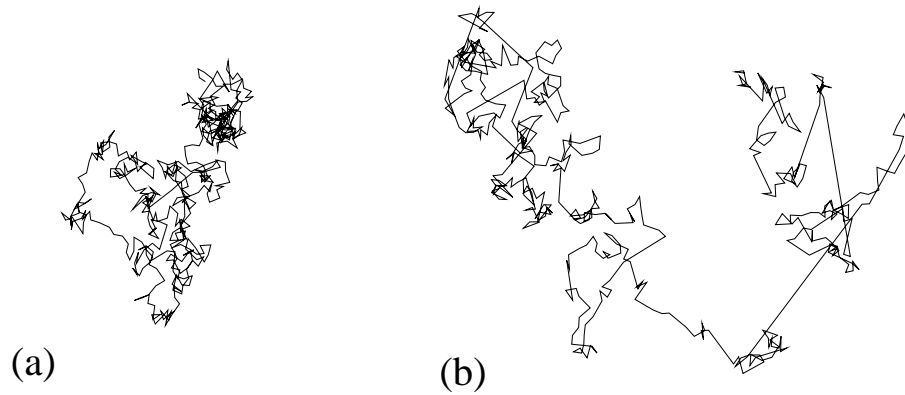


Fig. 2.2: Passeios aleatórios, após 500 passos, gerados artificialmente com a distribuição de probabilidade  $P(l) \sim l^{-\mu}$ , onde a direção de cada passo foi escolhida aleatoriamente [73]. O valor do expoente  $\mu$  foi escolhido apropriadamente: (a)  $\mu = 3,8$  para difusão normal e (b)  $\mu = 2,2$  para o caso super-difusivo (vôos de Lévy).

com difusão normal, e  $\mu = 2,2 < 3$  para o passeio aleatório super-difusivo (vôos de Lévy).

O movimento global de um passeio aleatório que apresenta difusão normal, após muitos passos, é dado pelo comportamento médio sobre todos os passos. Por outro lado, para o caso anômalo, ou seja, quando existem vôos de Lévy, o movimento global é dominado por poucos e raros passos.

## 2.2 Descrição Microscópica da Dissipação

Em muitos sistemas de interesse a origem dos efeitos dissipativos pode não ser muito clara. Esses sistemas normalmente interagem com vários graus de liberdades do *meio* em que se encontram. Portanto, o desenvolvimento de modelos capazes de relacionar os vários graus de liberdade do *meio* com o sistema de interesse podem ser bastante úteis do ponto de vista prático. Isso porque, em muitos casos é possível ter acesso aos valores das grandezas físicas que caracterizam esse *meio*. Logo, um modelo que seja capaz de descrever efeitos de dissipação e que leve em conta o sistema de interesse juntamente com as características do *meio* (ou reservatório térmico), pode ser bastante interessante.

Uma aproximação para descrever efeitos de dissipação consiste em considerar o sistema de interesse e o *meio* como sendo constituintes de um sistema global. Quando olhamos apenas para dinâmica do sistema de interesse podemos observar dissipação, embora o sistema como um todo seja conservativo. Esse tipo de modelo normalmente considera um sistema de poucos graus de liberdade acoplado com um grande número de osciladores harmônicos, que representam o *meio*, ou reservatório térmico. Esse modelo foi introduzido e discutido numa série de quatro artigos por Ullersma [20], mostrando que num limite apropriado é possível verificar que o sistema de interesse comporta-se como uma partícula Browniana e a dinâmica é governada por uma equação de Langevin. Nessa descrição, a dissipação ocorre devido a transferência de energia do sistema de interesse para o *meio*. A energia, uma vez transferida, é distribuída entre os graus de liberdade do reservatório térmico e não retorna mais para o sistema dentro de qualquer período de tempo que seja fisicamente relevante. Para um *meio* constituído por muitos graus de liberdade o tempo de recorrência de Poincaré é muito grande e não pode ser observado dentro de um intervalo de tempo aceitável [18].

O modelo do sistema mais o reservatório, constituído por  $N$  osciladores harmônicos, foi introduzido por Caldeira e Leggett [10,11] no estudo do tunelamento quântico em sistemas dissipativos. Desde então, esse modelo tem sido amplamente usado para tratar dissipação em sistemas quânticos [18, 74]. Na sequência, apresentamos a aplicação desse modelo na derivação da equação de Langevin para o movimento Browniano clássico, dada pela Eq. (2.1).

A Hamiltoniana total que descreve um sistema interagente com um *meio* composto por  $N$  osciladores harmônicos independentes, sendo suposto um regime de fraco acoplamento com cada modo de vibração, é dada por [11, 18]

$$H = \frac{P^2}{2M} + V(X) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \left[ \frac{p_j^2}{m_j} + m_j \omega_j^2 \left( x_j - \frac{\Gamma_j}{m_j \omega_j^2} X \right)^2 \right], \quad (2.14)$$

e  $X$ ,  $P$ ,  $M$  são, respectivamente, a coordenada, o momento linear e a massa da partícula de interesse.  $V(X)$  é o potencial ao qual a partícula está sujeita. As variáveis  $x_j$  e  $p_j$  representam a coordenada e o momento linear do  $j$ -ésimo oscilador

de frequência  $\omega_j$  e massa  $m_j$ . O acoplamento entre sistema e *meio* é considerado bilinear (linear em ambas coordenadas  $X$  e  $x_j$ ). A intensidade do acoplamento é dada pela constante  $\Gamma_j$ .

As equações de movimento para o sistema total são:

$$M\ddot{X} = -V'(X) + \sum_{j=1}^N \left( \Gamma_j x_j - \frac{\Gamma_j^2}{m_j \omega_j^2} X \right), \quad (2.15)$$

que representa a equação da partícula de interesse, e

$$m_j \ddot{x}_j = -m_j \omega_j^2 x_j + X \Gamma_j, \quad (2.16)$$

que representa a equação do  $j$ -ésimo oscilador do reservatório. A Eq. (2.16) pode ser facilmente resolvida [75] e a solução  $x_j(t)$  pode ser substituída na Eq. (2.15), a fim de eliminar os graus de liberdades dos osciladores. Obtemos então, uma única equação para  $X(t)$ , que é expressa na forma

$$M\ddot{X}(t) + V'(X) = - \int_0^t dt' \gamma(t-t') \dot{X}(t') + f(t), \quad (2.17)$$

onde o termo  $\gamma(t-t')$  representa a memória dissipativa, e é dado por

$$\gamma(t-t') = \sum_{j=1}^N \frac{\Gamma_j^2}{m_j \omega_j^2} \cos[\omega_j(t-t')], \quad (2.18)$$

sendo a força flutuante escrita como

$$f(t) = \sum_{j=1}^N \left\{ \left[ \Gamma_j x_j(0) - \frac{\Gamma_j^2}{m_j \omega_j^2} X(0) \right] \cos(\omega_j t) + \Gamma_j \frac{p_j(0)}{m_j \omega_j} \sin(\omega_j t) \right\}. \quad (2.19)$$

A Eq. (2.17) é chamada de equação de Langevin generalizada [19], uma completa derivação dessa equação é mostrada no apêndice A. O lado direito da Eq. (2.17) mostra a força líquida exercida sobre a partícula devido a interação com os osciladores do reservatório térmico. O primeiro termo representa a força dissipativa, que é dependente do tempo, ou seja, existe dependência entre as sucessivas colisões da partícula com os osciladores do *meio*. O segundo termo representa a força flutuante, dependente do estado inicial dos osciladores ( $x_j(0)$ ,  $p_j(0)$ ) do *meio* e da coordenada inicial do sistema  $X(0)$ .

Para obter uma interpretação estocástica da força flutuante  $f(t)$ , consideramos que em  $t = 0$  o reservatório está em equilíbrio na presença do sistema [76], e assumimos que  $p_j(0)$  e  $x_j(0)$  são distribuídos de acordo com a distribuição canônica

$$\rho = Z^{-1} \exp \left\{ -\beta \sum_{j=1}^N \left[ \frac{p_j^2(0)}{2m_j} + \frac{m_j \omega_j^2}{2} \left( x_j(0) - \frac{\Gamma_j}{m_j \omega_j^2} X(0) \right)^2 \right] \right\}, \quad (2.20)$$

sendo  $\beta = 1/k_B T$  e  $Z$  é a função de partição canônica [77]. Tomando a média sobre os valores iniciais  $p_j(0)$  e  $x_j(0)$ , em relação a distribuição canônica (Eq. (2.20)), a força flutuante  $f(t)$  apresenta as seguintes propriedades estatísticas:

$$\langle f(t) \rangle = 0, \quad (2.21)$$

$$\langle f(t) f(t') \rangle = k_B T \gamma(t - t'). \quad (2.22)$$

Os detalhes dos cálculos para a obtenção da Eq.(2.21) e Eq.(2.22) são mostrados no apêndice B. Portanto, a natureza estocástica da força  $f(t)$  fica caracterizada em termos da média, Eq. (2.21), e da função de autocorrelação, Eq. (2.22), que está conectada com o coeficiente de dissipação  $\gamma(t)$ .

A dependência temporal do coeficiente de dissipação,  $\gamma(t)$ , nos diz que o efeito do reservatório térmico sobre a dinâmica da partícula produz um ruído colorido, ou seja, o espectro não é constante para todas as frequências dos osciladores do reservatório. Neste caso, o coeficiente de dissipação  $\gamma$  é dependente do espectro de frequência expresso por [18]

$$\gamma(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \gamma(t), \quad (2.23)$$

sendo conectado com a função de autocorrelação via o Teorema Flutuação-Dissipação, apresentado por Kubo [78] na forma

$$\gamma(\omega) = \frac{1}{k_B T} \int_0^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle f(0) f(t) \rangle. \quad (2.24)$$

No entanto, para tratar um sistema físico do ponto de vista prático, é preciso estabelecer uma relação entre o coeficiente  $\gamma(\omega)$ , definido pela Eq. (2.23), com os

parâmetros do reservatório térmico associados com a Eq. (2.18). Com esse propósito, é definido a densidade espectral do acoplamento com o reservatório térmico [11, 18]

$$J(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_j \frac{\Gamma_j^2}{m_j \omega_j} \delta(\omega - \omega_j) . \quad (2.25)$$

Supondo a existência de um contínuo de osciladores ( $N \rightarrow \infty$ ) compondo o reservatório térmico, o coeficiente de dissipação  $\gamma(t)$ , Eq. (2.18), pode ser escrito em termos da densidade espectral  $J(\omega)$  na forma

$$\gamma(t - t') = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega} \cos[\omega(t - t')] . \quad (2.26)$$

Desse modo a dinâmica da partícula de interesse é totalmente determinada pela massa  $M$ , o potencial  $V(X)$ , e a densidade espectral  $J(\omega)$ .

Para obter a Eq. (2.1), assumimos uma forma contínua para a densidade espectral  $J(\omega)$ , como sendo

$$J(\omega) = \alpha \omega , \quad (2.27)$$

para todas as frequências  $\omega$  do espectro, onde  $\alpha$  é o coeficiente de dissipação que, neste caso, é independente da frequência. Para essa situação particular, estruturas mais detalhadas do espectro são desprezadas, ou seja, qualquer frequência do espectro contribui com peso igual. Essa aproximação só é válida quando assumimos que a escala de tempo de interesse seja  $t \gg \omega_c^{-1}$ , onde  $\omega_c$  é a frequência de corte dos modos vibracionais do reservatório. Em outras palavras  $\omega_c$  é aproximadamente igual ao comprimento da região do espectro, onde  $J(\omega)/\omega$  pode ser considerado constante [20]. Essa frequência de corte  $\omega_c$  também é necessária para evitar divergências, porque na prática quando tomamos o limite  $\omega \rightarrow \infty$  a densidade espectral  $J(\omega)$  deve ir a zero [18]. Então, substituindo a Eq. (2.27) em (2.26), obtemos

$$\gamma(t - t') = \frac{2\alpha}{\pi} \int_0^{\omega_c} d\omega \cos[\omega(t - t')] \approx 2\alpha \delta(t - t') . \quad (2.28)$$

Logo, a Eq. (2.17) fica sendo

$$M\ddot{X} = -\alpha\dot{X} + f(t), \quad (2.29)$$

que é idêntica a Eq. (2.1) para o movimento Browniano, quando consideramos a partícula livre  $V(X) = 0$ .



## 3

# O Modelo de Estudo

### 3.1 Motivação Física - “Poucos” Graus de Liberdade

O estudo de sistemas interagentes envolvendo poucos graus de liberdade são de interesse atual e envolvem questões que ainda não estão bem resolvidas como irreversibilidade, equipartição de energia e descoerência quântica [79, 80]. Muitos sistemas físicos de meso e nanoescalas apresentam essas características, como por exemplo a descoerência e relaxação de spin [4, 6] e relaxação vibracional em moléculas poliatômicas [81].

Na natureza muitos processos dinâmicos, presentes em sistemas moleculares complicados, normalmente são descritos por um “caroço reativo” (sistema principal) [7], constituído por relativamente poucos graus de liberdade, o qual é responsável pela parte dominante do processo. Esse sistema, por sua vez, está acoplado a muitos outros graus de liberdade que funcionam efetivamente como um banho térmico e induzem efeitos dissipativos. Tal descrição se aplica a dinâmicas intramoleculares, como também em processos que acontecem em banhos térmicos como os líquidos. Sendo assim, o modelamento dinâmico destes processos necessita levar em conta o *meio*, ou pelo menos uma parte explícita desse *meio*.

Estruturas moleculares complexas, que são responsáveis pela absorção de luz

no processo de fotossíntese, representam um exemplo desse tipo de sistema que acabamos de mencionar acima. Em particular, vamos nos referir aos chamados *complexos de antenas coletoras de luz*<sup>1</sup>, presentes num tipo de bactéria [82]. Esses coletores de luz possuem forma de anel e são formados por um aglomerado de proteínas.

A Fig. 3.1 mostra a estrutura de uma unidade celular que compõe o sistema coletor de luz de uma bactéria. Os pigmentos responsáveis pela absorção de luz são mostrados nas cores verde e amarelo. A ilustração que está na base da Fig. 3.1 mostra uma vista lateral desse complexo, sendo possível reconhecer dois aglomerados de moléculas, que têm forma de anel, e são representados na cor verde. Uma melhor visualização desses aglomerados é mostrada na Fig. 3.2. O anel superior possui um arranjo com 8 unidades (quadrados verdes) de B800 BChls — (*bacteriochlorophylls*) — que absorvem em 800 nm, enquanto o anel inferior possui um arranjo com 16 unidades de B850 BChls que absorvem em 850 nm, e também é mostrado 8 carotenóides, na cor amarelo, que absorvem em 500 nm. Apesar da grande complexidade dessa unidade celular coletora de luz, Fig. 3.1, nesse momento nos interessa apenas chamar atenção para a Fig. 3.2, mais especificamente, para o anel molecular que é constituído por 16 unidades moleculares de B850 BChls. Esse anel molecular é o que de fato está representando o sistema principal. Enquanto, todo o restante do sistema, ou seja, o anel B800 BChls, os carotenóides, o material protéico e as moléculas de água, estão representando o banho térmico propriamente dito.

Partindo de uma descrição teórica<sup>2</sup> — que modela uma interação linear do sistema principal com os fônons de energia  $\hbar\omega$  do reservatório (admitindo  $\hbar = 1$ ) e cujo objetivo é descrever a influência das flutuações térmicas sobre a dinâmica do sistema principal representado pelo anel molecular com 16 unidades moleculares de B850 BChls — é possível obter a função densidade espectral  $J(\omega)$  dos fônons que representam o *meio* ou banho térmico. A Fig. 3.3 mostra a forma bastante

---

<sup>1</sup>Essa é a expressão em português que usamos para traduzir a seguinte expressão do inglês: *light-harvesting antennae complexes*.

<sup>2</sup>Maiores detalhes sobre a descrição teórica, bem como sobre as simulações numéricas, são obtidos na Ref. [82].

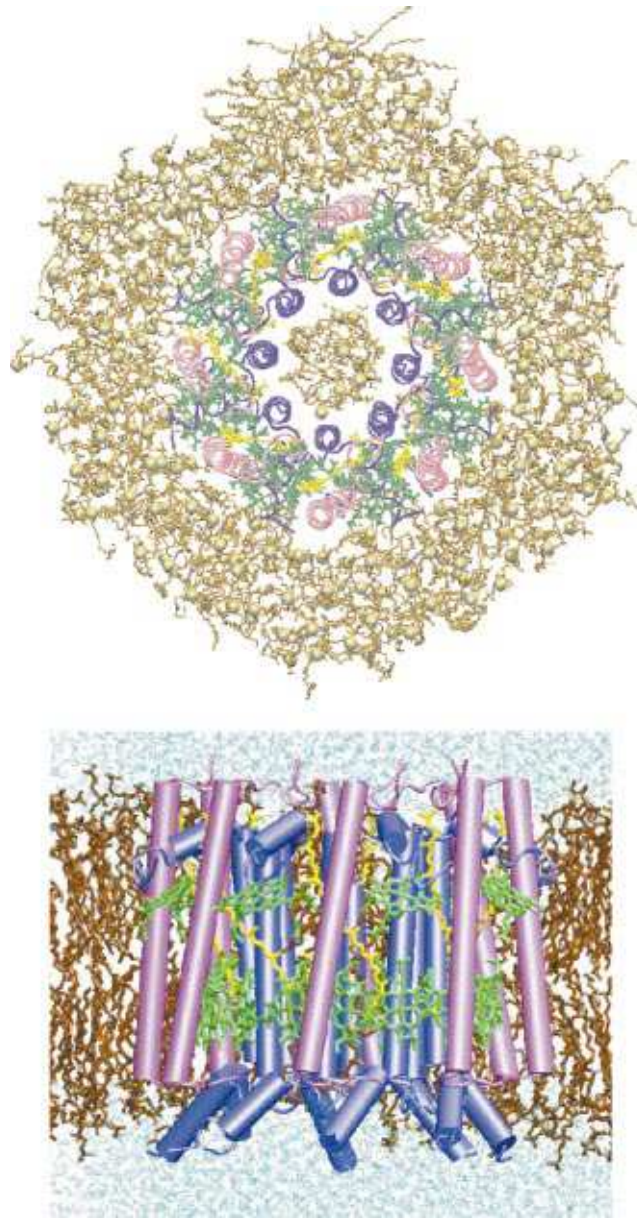


Fig. 3.1: Topo: Vista superior de uma unidade celular que compõe o complexo de coletores de luz de uma bactéria [82]. As principais unidades protéicas são ilustradas nas cores azul e magenta. Os pigmentos responsáveis pela absorção de luz são mostrados nas cores verde e amarelo. Base: Vista lateral do complexo de coletores de luz envolvido num meio aquoso. As moléculas de água são mostradas na cor azul claro. É possível reconhecer dois aglomerados de moléculas, em forma de anel, representados na cor verde. Essa figura foi gerada numericamente, e retirada da Ref. [82].

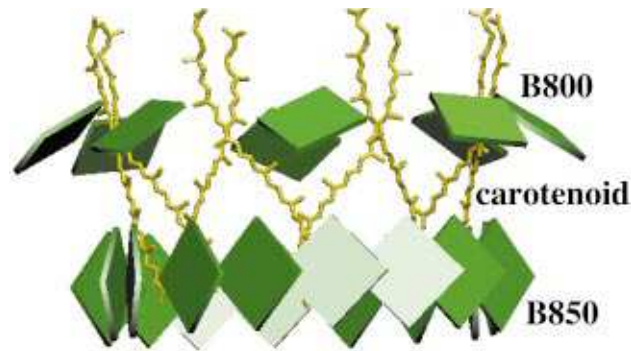


Fig. 3.2: Vista lateral dos pigmentos responsáveis pela absorção de luz, ilustrados nas cores verde e amarelo. O aglomerado de moléculas superior é arranjado num anel com 8 unidades (quadrados verdes) de B800 BChls que absorvem em 800 nm, e um anel inferior com 16 unidades de B850 BChls que absorvem em 850 nm, e ainda, 8 carotenóides são ilustrados em amarelo e absorvem em 500 nm. Essa figura foi gerada numericamente, e retirada da Ref. [82].

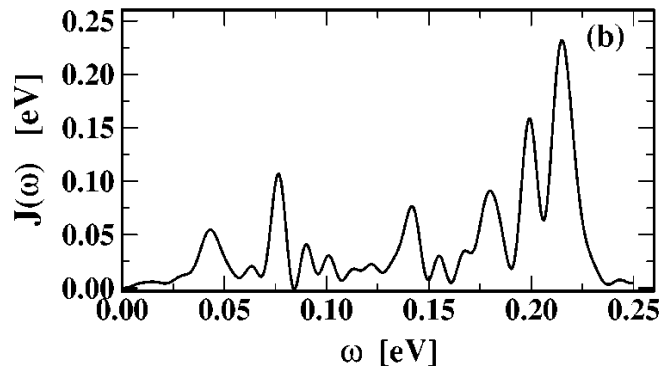


Fig. 3.3: Densidade espectral dos fônons que representam o banho térmico que interage com o sistema principal (que é constituído por 16 unidades moleculares de B850 BChls). Figura retirada da Ref. [82].

complicada do espectro de frequências obtidos. Porém, é possível identificar um pico proeminente em torno de  $\omega \sim 0.2$  eV, indicando um forte acoplamento do sistema com o modo vibracional intramolecular C=O. No entanto, podemos perceber que  $J(\omega)$  possui também significantes contribuições sobre todo o intervalo  $0 < \omega \lesssim 0.22$  eV. Desse modo, é esperado que todo esse contínuo de frequências contribua com o alargamento do espectro de absorção do sistema principal.

Nosso objetivo acerca de toda essa discussão, sobre o sistema coletor de luz

presente num tipo de bactéria [82], é chamar atenção para a forma da densidade espectral dos fônons (Fig. 3.3). Apesar de existir um contínuo de frequências, note que o espectro é modulado por algumas frequências mais importantes no processo de absorção, vistas como os picos na Fig. 3.3. Podemos dizer então que este tipo de sistema é um exemplo de *meio* modulado, e que o espectro poderia ser representado, ainda que de forma aproximada, por um número finito de frequências.

Outros exemplos que também representariam um *meio* modulado são: relaxação de spin e fraca antilocalização em pontos quânticos [5], para o qual o número de graus de liberdade do *meio* é baixo; cavidades quânticas com um número finito de modos de frequências [83,84], e ainda, outros sistemas moleculares complexos [7–9], em que os graus de liberdade de interesse são acoplados com um reservatório representado por finitos graus de liberdade.

## 3.2 Caracterizando o Meio Modulado

No capítulo anterior mostramos que a partir da Hamiltoniana Eq. (2.14) — que representa um sistema de interesse acoplado linearmente a um *meio* que é descrito por  $N$  osciladores harmônicos independentes — pode-se obter uma única equação de movimento em termos da variável  $X(t)$  do sistema de interesse. Essa equação é conhecida como equação de Langevin generalizada [19] e expressa na forma

$$M\ddot{X}(t) + V'(X) = - \int_0^t dt' \gamma(t-t') \dot{X}(t') + f(t), \quad (3.1)$$

sendo  $\gamma(t-t')$  o coeficiente de dissipação que é dado em termos dos parâmetros dos osciladores do *meio*,

$$\gamma(t-t') = \sum_{j=1}^N \frac{\Gamma_j^2}{m_j \omega_j^2} \cos[\omega_j(t-t')] , \quad (3.2)$$

e  $f(t)$  é a força devido as consecutivas colisões da partícula do sistema com os osciladores e depende do estado inicial dos osciladores na forma

$$f(t) = \sum_{j=1}^N \Gamma_j \left\{ \left[ x_j(0) - \frac{\Gamma_j}{m_j \omega_j^2} X(0) \right] \cos(\omega_j t) + \frac{x_j(0)}{m_j \omega_j} \sin(\omega_j t) \right\}. \quad (3.3)$$

Lembramos que  $V'(X)$  na Eq. (3.1) representa o potencial ao qual a partícula de massa  $M$  é submetida. As grandezas  $\omega_j$ ,  $m_j$  e  $x_j$  representam, respectivamente, a frequência, massa e coordenada do  $j$ -ésimo oscilador do *meio*. A intensidade do acoplamento entre sistema e osciladores é dada por  $\Gamma_j$ .

O coeficiente de dissipação  $\gamma(t - t')$  está relacionado com a força  $f(t)$  pela função de autocorrelação,

$$\langle f(t)f(t') \rangle = k_B T \gamma(t - t') = k_B T \sum_{j=1}^N \frac{\Gamma_j^2}{m_j \omega_j^2} \cos[\omega_j(t - t')] . \quad (3.4)$$

O movimento Browniano descrito pela solução da Eq. (2.1) existe apenas no caso limite: quando  $\gamma(t - t')$  é proporcional a  $\delta(t - t')$ , ou seja, o coeficiente de dissipação não apresenta efeitos de memória e é representado por uma constante. Essa aproximação só é possível quando se tem um contínuo de osciladores  $N \rightarrow \infty$ . Conseqüentemente a força  $f(t)$  não apresenta correlação temporal e isso significa que as sucessivas colisões da partícula com os osciladores do *meio* são independentes. No entanto, essa é uma situação idealizada porque na natureza sempre existe um tempo de memória microscópica que é associada aos efeitos de inércia do *meio* [18].

De um ponto de vista diferente da descrição aproximada que resultou na equação de Langevin para o movimento Browniano, nosso propósito neste trabalho é modelar um sistema acoplado com um *meio* finito. Para melhor entender as implicações de um *meio* discreto (finito) em relação a um *meio* contínuo, vamos apresentar na seqüência alguns exemplos aplicados a função de autocorrelação de  $f(t)$  (Eq. (3.4)) que buscam ilustrar esses dois regimes.

### 3.2.1 Contínuo

Vamos usar um exemplo físico de um elétron sujeito a um potencial harmônico e interagindo com um campo eletromagnético. Esse problema é tratado de um ponto de vista clássico e foi apresentado em um dos artigos do Ullersma [20].

A dinâmica do elétron é modelada pela equação de Langevin generalizada Eq. (3.1), onde  $V(X)$  é potencial do oscilador harmônico. A coordenada  $X(t)$  re-

presenta a posição do elétron. As grandezas  $\omega_j$ ,  $m_j$  e  $x_j$  são, respectivamente, a frequência, massa e coordenada do  $j$ -ésimo oscilador que representa um dos termos da expansão do campo eletromagnético<sup>3</sup>.

A função de autocorrelação da força  $f(t)$ , quando é considerado um espectro contínuo, é expressa por [20]

$$\langle f(t)f(t') \rangle = k_B T \frac{\omega_c^2 \omega_0^2}{\kappa_0(\omega_c - \alpha)} \exp\{-(\omega_c - \alpha)|t - t'|\} , \quad t \gg \omega_c^{-1} , \quad (3.5)$$

sendo  $\omega_c$  a frequência de corte que, aproximadamente, fornece o comprimento da região do espectro. Essa frequência estabelece a escala de tempo transiente  $\tau_t = \omega_c^{-1}$  do problema. A frequência  $\omega_0$  é a frequência de oscilação do elétron no potencial harmônico. A constante  $\kappa_0$  depende da carga e da massa do elétron. Finalmente, a constante de amortecimento  $\alpha = \omega_0^2/2\kappa_0$  estabelece o tempo de relaxação  $\tau_r = \alpha^{-1}$ , onde  $\tau_r \gg \tau_t$ .

O tempo  $\tau_t = \omega_c^{-1}$  representa uma medida da duração de uma interação, e pode ser interpretado como um tempo de colisão. E neste caso, as colisões poderão ser consideradas independente quando tomamos o limite  $\omega_c \rightarrow \infty$  na Eq. (3.5), ou seja, quando consideramos  $\tau_t \rightarrow 0$ , obtemos a expressão

$$\langle f(t)f(t') \rangle = 2\alpha k_B T \delta(t - t') , \quad (3.6)$$

que é a forma conhecida da função de autocorrelação para o movimento Browniano. Somente nesse regime a dinâmica da partícula pode ser descrita por um processo estocástico estacionário.

Observe que a função de autocorrelação, Eq. (3.5), é válida somente quando se considera um espectro contínuo  $N \rightarrow \infty$ , e para escalas de tempo de interesse da ordem  $t \gg \tau_t$ .

---

<sup>3</sup>A expansão do campo eletromagnético é dada em termos dos modos normais de vibração dentro de uma cavidade esférica de raio  $L$ , sendo cada modo de vibração expresso por  $\omega_j = j\pi/L$ .



### 3.2.2 Discreto

O exemplo apresentado acima deixou claro como são as relações entre as diferentes escalas de tempo do problema. No entanto, quando consideramos a função de autocorrelação para um número  $N$  finito de osciladores, Eq. (3.4), fica difícil definir uma escala de tempo de relaxação ou transiente para o problema. Na sequência apresentamos três exemplos para ilustrar essa situação. Cada um dos exemplos se refere a diferentes valores para a constante de acoplamento  $\Gamma_j$  da Eq. (3.4), onde as frequências dos osciladores  $\omega_j$  do *meio*, foram geradas aleatoriamente de acordo com a distribuição de Debye [65] que para  $N \rightarrow \infty$  é dada por  $\rho(\omega_j) \propto \omega_j^2$ . Essas frequências são distribuídas no intervalo  $0 < \omega_j \lesssim 2,5$ , os detalhes desta distribuição serão dados na Sec. 3.2.3.

O análogo discreto da função de autocorrelação para o exemplo do elétron no campo eletromagnético que mencionamos acima é dado pela Eq. (3.4), com  $\Gamma_j^2 = 4\alpha\omega_c^2\omega_j^2/(\omega_c^2 + \omega_j^2)$  [20]. A Fig. 3.4 mostra a função de autocorrelação para  $N = 10, 100$  e  $10000$ . Observe que a medida que  $N$  aumenta, as oscilações aproximam-se de zero (para tempos mais longos). Isto significa que sucessivas colisões perdem sua correlação no limite  $N \rightarrow \infty$  e  $t \rightarrow \infty$ .

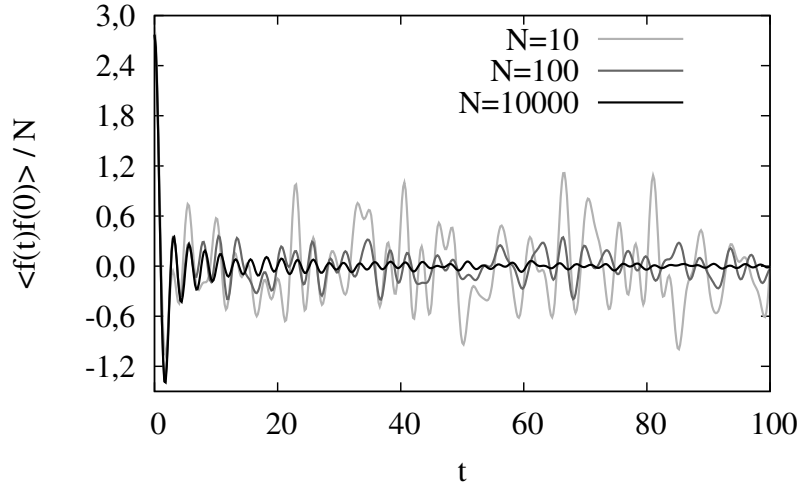


Fig. 3.4: Função de autocorrelação (Eq. (3.4)) para  $N = 10, 100$  e  $10000$ , com os seguintes valores de parâmetros:  $k_B T = 1$ ,  $m_j = 1$  e  $\alpha = 1$ .



No entanto podemos observar que para poucos osciladores, como o exemplo  $N = 10$  mostrado na Fig. 3.4, a amplitude das freqüentes oscilações são bastante significativas. Mesmo com a escolha apropriada de  $\Gamma_j$ , para um número finito de osciladores, as recorrências na função de autocorrelação tendem a persistirem por um tempo muito longo ( $t \rightarrow \infty$ ). Neste caso, existe uma forte dependência entre as sucessivas colisões da partícula com os osciladores do *meio*, e a dinâmica da partícula irá depender de forma significativa das freqüências que caracterizam o espectro dos osciladores.

Considerando  $\Gamma_j = \Gamma = 0,1$  para todos os osciladores do *meio*, a função de autocorrelação Eq. (3.4) é exibida na Fig. 3.5 para valores diferentes de  $N$ . Neste caso também observamos as oscilações temporais para todos os valores de  $N$ . Observe que à medida que o valor de  $N$  aumenta de 10 pra 10000, o período das oscilações também aumenta e a amplitude das oscilações são mais próxima de zero quando  $N = 10000$ . A amplitude das oscilações para  $N = 10000$  variam entre -0,005 e 0,005 (não é visível na escala mostrada na figura).

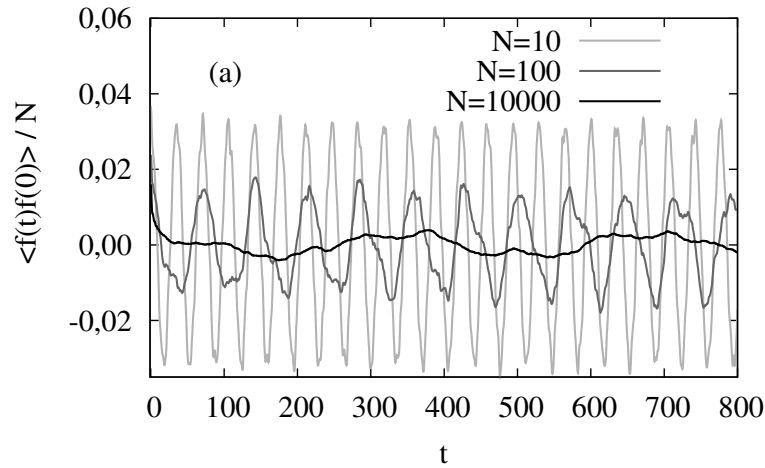


Fig. 3.5: Função de autocorrelação (Eq. (3.4)) para  $N = 10, 100$  e  $10000$ , com os seguintes valores de parâmetros:  $k_B T = 1$ ,  $m_j = 1$ , a constante de acoplamento  $\Gamma_j = 0,1$  é a mesma para todos  $N$  osciladores.

Vamos considerar um outro exemplo em que  $\Gamma_j$  assume valores aleatórios entre 0 e 0,1. A Fig. 3.6 mostra a função de autocorrelação para diferentes  $N$ .

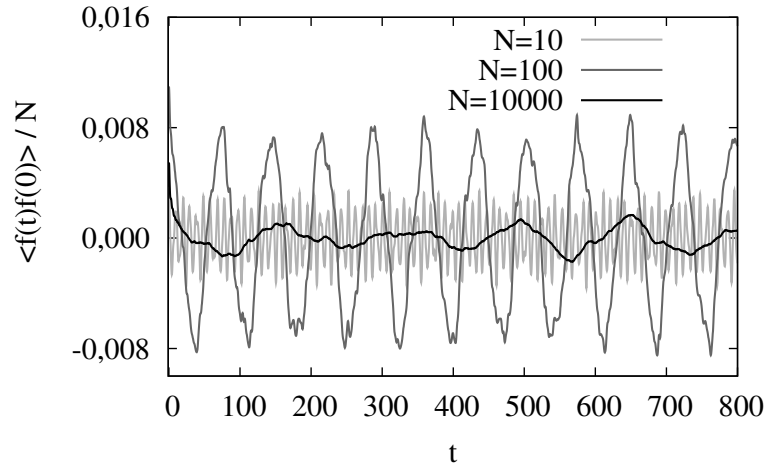


Fig. 3.6: Função de autocorrelação (Eq. (3.4)) para  $N = 10, 100$  e  $1000$ , com os seguintes valores de parâmetros:  $k_B T = 1$ ,  $m_j = 1$ , a constante de acoplamento  $\Gamma_j$  assume valores aleatórios entre 0 e 0,1 para cada um dos osciladores do meio.

Podemos observar uma situação muito parecida com o exemplo anterior, as oscilações temporais da função de autocorrelação aparecem para todos os valores de  $N$ , e como no caso anterior, o período das oscilações aumenta quando  $N$  aumenta. Neste caso a amplitude das oscilações para  $N = 10000$  variam entre -0,002 e 0,002 (não é visível na escala mostrada na figura). Novamente podemos constatar que quando o número de osciladores é finito as colisões consecutivas da partícula com os osciladores são correlacionadas no tempo, o que implica que a dinâmica da partícula dependerá dos detalhes do espectro dos osciladores com os quais ela interage.

De acordo com as Figs. 3.4, 3.5 e 3.6 podemos concluir que quando o *meio* é representado por poucos osciladores, independente da escolha do parâmetro de acoplamento  $\Gamma_j$ , a função de autocorrelação apresentará recorrência temporal. Existirá dependência entre as sucessivas colisões da partícula com os osciladores do *meio*. Portanto, podemos dizer que a dinâmica do sistema de interesse (quando acoplado com um *meio* discreto) é caracterizada por um processo não Markoviano.

### 3.2.3 Meio Utilizado Neste Trabalho

A representação de um *meio* constituído por um número finito de graus de liberdade, pode representar o que chamamos de um *meio* modulado, o que corresponde a um espectro de frequências discreto. Abruptas variações modulam o espectro, visto que, muitas frequências não estão presentes no intervalo de interesse. Portanto, a partícula do sistema é fortemente acoplada a alguns modos especiais de vibração desse *meio*. A Fig. 3.7 (a)-(h) mostra várias realizações, para diferentes números de

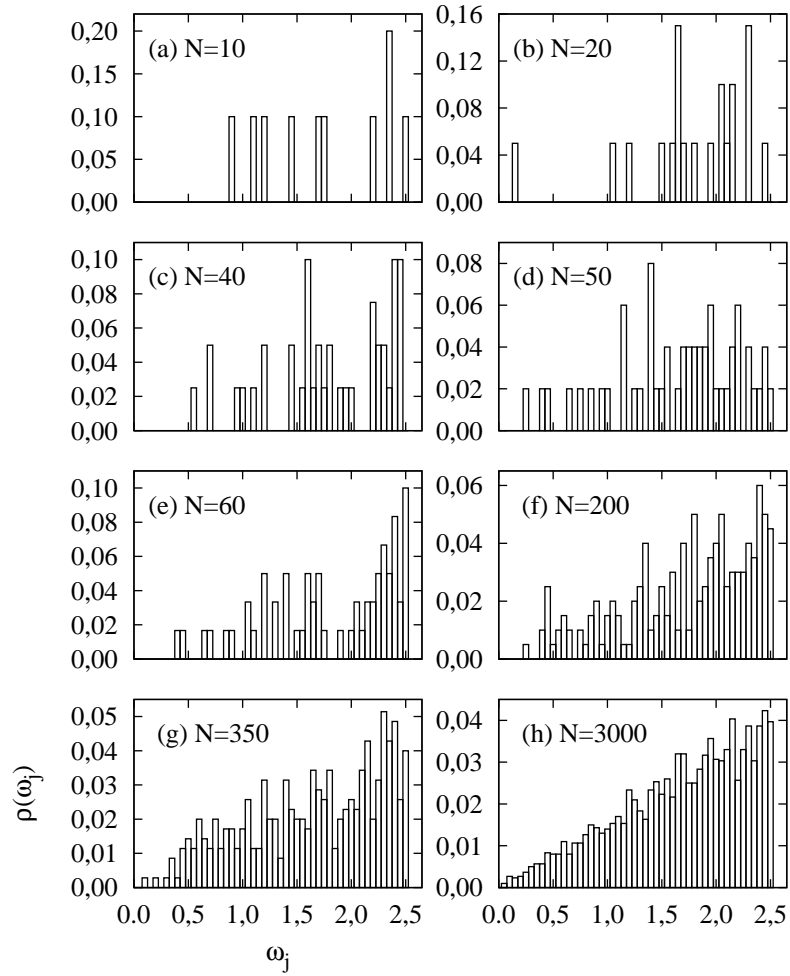


Fig. 3.7: Diferentes realizações para a distribuição de frequências dos osciladores. As distribuições são geradas aleatoriamente [73] dentro do intervalo  $0 < \omega_j \lesssim 2,5$ , e possuem uma forma quadrática (distribuição de Debye  $\rho(\omega_j) \propto \omega_j^2$ ) no limite  $N \rightarrow \infty$ . Diferentes valores de  $N$  são atribuídos para cada umas das realizações de (a)-(h). Para os casos em que  $N < 200$  esse espectro representa o que chamamos de um *meio* modulado.

osciladores  $N$ , da distribuição de frequências utilizada em nosso modelo de estudo. Essas distribuições são geradas aleatoriamente [73] e possuem uma forma quadrática, distribuição de Debye  $\rho(\omega_j) \propto \omega_j^2$  (quando  $N \rightarrow \infty$ ) [65], com frequência de corte  $\omega_c \sim 2,5$ . Para poucos osciladores ( $N \leq 60$ ), podemos observar que existem várias “janelas” no espectro, ou seja, existem muitas frequências que não estão presentes no intervalo de interesse. Quando comparamos as diferentes distribuições de  $N = 10$  até  $N = 3000$ , Fig. 3.7 (a)-(h), constatamos que para poucos osciladores ( $N < 200$ ) o espectro possui uma forma bastante estruturada e, à medida que o número  $N$  de frequências aumenta, o espectro tende a ser mais suave, porém discreto. Apenas no limite  $N \rightarrow \infty$ , o espectro representaria de fato um banho térmico e poderia ser descrito por uma função contínua.

### 3.3 Equações de Movimento para as Catracas

Neste trabalho, diferentemente da abordagem teórica proposta pela equação de Langevin, estudamos o conjunto das  $2N + 2$  equações diferenciais que descrevem o sistema global que é descrito por um sistema de interesse acoplado a  $N$  osciladores harmônicos. Portanto, o conceito usual de banho térmico não é mais empregado, e os osciladores harmônicos do *meio* fazem parte integrante da dinâmica do sistema de interesse.

Esta descrição, embora mais complexa, nos possibilita uma análise mais detalhada do efeito de um *meio* finito sobre a dinâmica do sistema de interesse. Outro aspecto interessante dessa abordagem é a possibilidade de realizar um estudo sobre o processo dissipativo, a dinâmica de transferência de energia e o transporte de partículas, aumentando um a um o número de osciladores do *meio*. Desse modo, acreditamos que o presente trabalho possa contribuir para o conhecimento e entendimento dos efeitos da dissipação em sistemas interagentes com poucos graus de liberdade.

Vamos considerar o problema unidimensional de uma partícula sujeita a um potencial periódico assimétrico, do tipo *catraca*, interagindo com  $N$  osciladores

harmônicos independentes. O potencial efetivo, ao qual a partícula é submetida, é expresso pela seguinte equação:

$$V_{ef}(X, \vec{x}) = V(X) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N m_j \omega_j^2 \left( x_j - \frac{\Gamma_j}{m_j \omega_j^2} X \right)^2, \quad (3.7)$$

onde  $X$  é a coordenada da partícula,  $\vec{x}$  é o vetor representando as coordenadas dos  $N$  osciladores ( $x_j$ , onde  $j = 1, 2, 3, \dots, N$ );  $m_j$  e  $\omega_j$  são, respectivamente, a massa e a frequência de cada um dos osciladores. O parâmetro  $\Gamma_j$  fornece a amplitude da interação entre o sistema e os osciladores.  $V(X)$  é o potencial periódico e assimétrico [29] dado por

$$V(X) = V_1 - V_0 \sin 2\pi \frac{(X - X_0)}{L} - \frac{V_0}{4} \sin 4\pi \frac{(X - X_0)}{L}, \quad (3.8)$$

com período  $L$ , amplitude  $V_0$  e constante arbitrária  $V_1$ . O potencial é deslocado por um valor  $X_0$  para que o mínimo fique localizado na origem. Veja a ilustração desse potencial na Fig. 3.8.

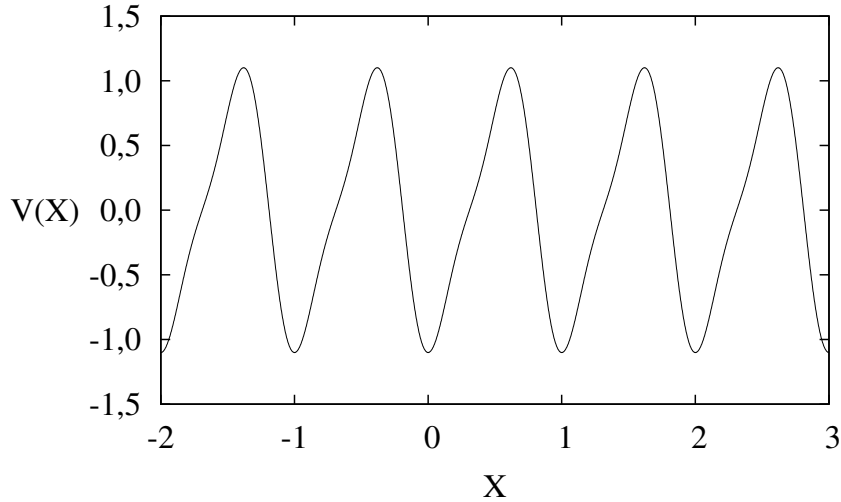


Fig. 3.8: Potencial assimétrico  $V(X)$  descrito pela Eq. (3.8), com os seguintes valores de parâmetros: período  $L = 1$ , amplitude  $V_0 = 1$ , constantes  $V_1 = 1$  e  $X_0 = -0,19$ .

As equações de movimento, para o sistema e osciladores, são dadas por

$$M\ddot{X} = -\frac{\partial V_{ef}(X, \vec{x})}{\partial X}, \quad (3.9)$$

$$m_j \ddot{x}_j = -\frac{\partial V_{ef}(X, \vec{x})}{\partial x_j} , \quad (3.10)$$

sendo  $V_{ef}(X, \vec{x})$  o potencial dado pela Eq. (3.7). Essas equações compõem um sistema global conservativo, no qual não é possível se obter o transporte de partícula através dos múltiplos poços do potencial assimétrico. Como já foi demonstrado por estudos anteriores [26], para se obter o transporte é necessário considerar a partícula sujeita a uma força externa. Desse modo, como nosso objetivo inclui o estudo do transporte de partículas, vamos então considerar a partícula submetida a uma força dependente do tempo, cuja média temporal é nula. Essa força é dada por

$$F_{ext}(t) = F_0 \cos \omega_E t , \quad (3.11)$$

sendo  $F_0$  a amplitude e  $\omega_E$  a frequência. Assim, as equações de movimento são expressas por

$$M \ddot{X} = -\frac{dV(X)}{dX} + \sum_{j=1}^N \left( \Gamma_j x_j - \frac{\Gamma_j^2}{m_j \omega_j^2} X \right) + F_0 \cos \omega_E t , \quad (3.12)$$

$$m_j \ddot{x}_j = -m_j \omega_j^2 x_j + \Gamma_j X . \quad (3.13)$$

De modo geral, a integração numérica das  $N + 1$  equações, ou seja, das Eqs. (3.12) e (3.13) não é trivial. Essa complexidade ocorre devido a existência de muitas escalas de tempo distintas entre sistema e osciladores, o que pode conduzir a problemas técnicos no momento de fazer a integração numérica. Procurando contornar esse problema, podemos escrever as Eqs. (3.12) e (3.13) em termos de variáveis adimensionais, definidas por:

$$\begin{aligned} X' &= \frac{X}{L} , & X'_0 &= \frac{X_0}{L} , & x'_j &= \frac{x_j}{L} , & t' &= \omega_0 t , \\ \ddot{X}' &= \frac{\ddot{X}}{L \omega_0^2} , & \ddot{x}'_j &= \frac{\ddot{x}_j}{L \omega_0^2} , & m'_j &= \frac{m_j}{M} , & \omega'_j &= \frac{\omega_j}{\omega_0} , \\ \omega &= \frac{\omega_E}{\omega_0} , & F &= \frac{F_0}{M L \omega_0^2} , & \gamma_j &= \frac{\Gamma_j}{M \omega_0^2} , \end{aligned}$$

cuja a frequência  $\omega_0$  é expressa pela equação

$$\omega_0^2 = \frac{4\pi^2 V_0 \delta}{M L^2} , \quad (3.14)$$

sendo  $\delta$  definido por  $\delta = \sin 2\pi|X'_0| + \sin 4\pi|X'_0|$ . Essa é a frequência do movimento da partícula em torno do mínimo do potencial periódico assimétrico. Veja a ampliação na Fig. 3.9.

Reescrevendo as equações de movimento (3.12) e (3.13) em termos das variáveis adimensionais, já omitindo o sobrescrito *linha*, obtemos

$$\ddot{X} = -\frac{dV(X)}{dX} + \sum_{j=1}^N \gamma_j x_j - X \sum_{j=1}^N \frac{\gamma_j^2}{m_j \omega_j^2} + F \cos \omega t, \quad (3.15)$$

$$\ddot{x}_j = -\omega_j^2 x_j + \frac{\gamma_j}{m_j} X. \quad (3.16)$$

O potencial adimensional (Eq. (3.8) dividida por  $ML^2\omega_0^2$ ) é mostrado na Fig. 3.9, e expresso por

$$V(X) = C - \frac{1}{4\pi^2\delta} \left[ \sin 2\pi(X - X_0) + \frac{1}{4} \sin 4\pi(X - X_0) \right]. \quad (3.17)$$

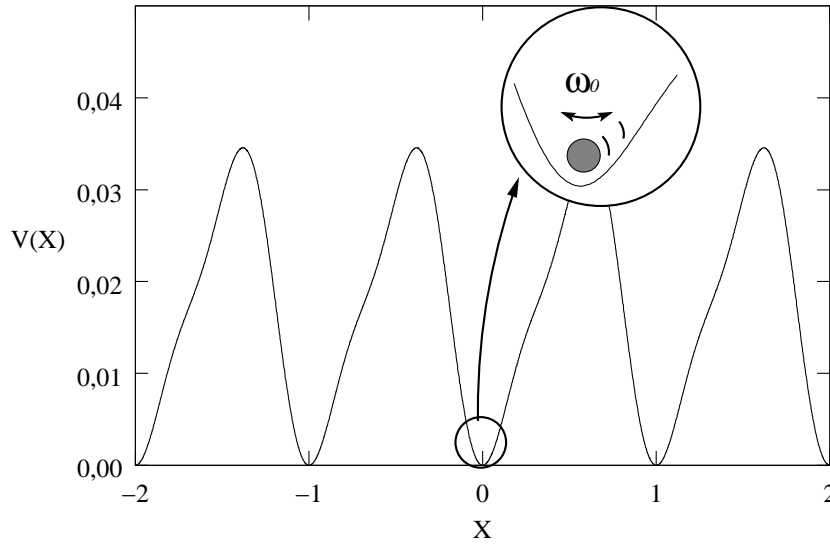


Fig. 3.9: Potencial adimensional  $V(X)$  descrito pela Eq. (3.17). A ampliação da região do mínimo, em  $X = 0$ , ilustra a partícula oscilando em torno desse ponto com frequência  $\omega_0$  dada pela Eq. (3.14).

Para que  $V(0) = 0$ , devemos ter:  $C = -\frac{1}{4\pi^2\delta} \left[ \sin 2\pi X_0 + \frac{1}{4} \sin 4\pi X_0 \right]$ , e ainda, para que a origem seja um mínimo devemos ter:  $X_0 = -\frac{1}{2\pi} \arccos \left( \frac{\sqrt{3}-1}{2} \right) \simeq -0,19$ , onde admitimos  $L = 1$ . Com isso temos  $\delta \simeq 1,6$ , e  $C \simeq 0,0173$ . Os

mínimos desse potencial estão localizados em  $X_{min} = n$  ( $n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \dots$ ), e os máximos estão localizados em  $X_{max} = -0,38 + n$  ( $n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \dots$ ).

As expressões para as energias das diferentes partes que compõe o sistema global (sistema + *meio* + interação) na ausência do campo externo, são dadas em termos dos parâmetros adimensionais por:

— Energia do sistema

$$E_S = \frac{\dot{X}^2}{2} + V(X) , \quad (3.18)$$

sendo  $V(X)$  o potencial assimétrico dado pela Eq. (3.17);

— Energia dos osciladores

$$E_O = \sum_{j=1}^N \left( \frac{m_j \dot{x}_j^2}{2} + \frac{m_j \omega_j^2 x_j^2}{2} \right) ; \quad (3.19)$$

— Energia de interação

$$E_I = - \sum_{j=1}^N \left( \gamma_j x_j X - \frac{\gamma_j^2 X^2}{2m_j \omega_j^2} \right) . \quad (3.20)$$

Finalmente a energia total é dada por

$$E_T = \frac{\dot{X}^2}{2} + V(X) + \sum_{j=1}^N \left( \frac{m_j \dot{x}_j^2}{2} + \frac{m_j \omega_j^2 x_j^2}{2} \right) - \sum_{j=1}^N \left( \gamma_j x_j X - \frac{\gamma_j^2 X^2}{2m_j \omega_j^2} \right) . \quad (3.21)$$

### 3.4 Tratamento Numérico

Neste trabalho vamos apresentar uma investigação numérica das equações adimensionais de movimento (3.15) e (3.16) usando então um número finito  $N$  de osciladores. Para a integração numérica dessas equações foi utilizado o algoritmo de Runge-Kutta de quarta ordem com passo fixo ( $\Delta t = 10^{-3}$ ) [73].

Para todos os casos apresentados, foi utilizado o valor  $m_j = 0,1$  para a massa adimensional. A amplitude do acoplamento entre o *sistema* e os osciladores é dada por  $\gamma_j = 0,1$ , no caso de usarmos um valor diferente, será feita a especificação no texto, logo no início da seção.



Para o estudo da dinâmica de transferência de energia e de dissipação — onde consideramos  $F = 0$  — no instante inicial  $t = 0$  a energia de interação é nula  $E_I = 0$ , a energia do sistema é muito próxima da energia total  $E_S \sim E_T$  e os osciladores possuem uma energia  $E_O$  próxima de zero  $E_O \sim 0$ .

Os valores para as frequências dos osciladores foram gerados aleatoriamente e no limite  $N \rightarrow \infty$  são atribuídos de acordo com duas distribuições diferentes, uma distribuição quadrática (distribuição de Debye) e a outra forma é uma distribuição Gaussiana, veja a Fig. 3.10 (a) e (b).

A distribuição de Debye mostrada na Fig. 3.10 (a) apresenta uma frequência de corte em  $\omega_c \sim 2,5$ . As frequências são distribuídas no intervalo  $0 < \omega_j \lesssim 2,5$ . Esta distribuição inclui a frequência  $\omega_0$  (Eq. (3.14)) de oscilação da partícula em torno do mínimo do poço do potencial assimétrico (Fig. 3.9). Essa frequência está localizada em  $\omega_j = 1$ , pois todas as frequências  $\omega_j$  estão em unidades de  $\omega_0$ . Em alguns casos

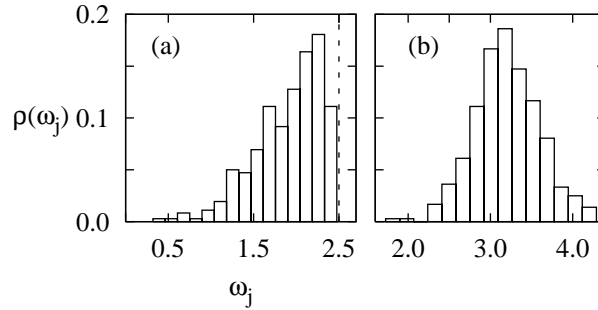


Fig. 3.10: Distribuições para as frequências dos osciladores, onde  $N = 360$ . (a) Distribuição de Debye com frequência de corte em  $\omega_c \sim 2,5$  (Debye baixa) e (b) Distribuição Gaussiana centrada em torno da frequência  $\omega_c \sim 3,1$ .

utilizamos essa mesma distribuição, porém, com intervalos diferentes:  $1,5 \lesssim \omega_j \lesssim 4,0$  e  $1,1 \lesssim \omega_j \lesssim 2,1$ . Consideramos esses casos com o propósito de abranger frequências maiores que um ( $\omega_j > 1$ ), ou seja, osciladores com frequências maiores que  $\omega_0$ . Portanto, vamos nos referir ao longo do texto com a seguinte denominação: distribuição de Debye *baixa* (inclui  $\omega_0$ ) ou Debye *alta* (não inclui  $\omega_0$ ).

As posições e velocidades iniciais (em  $t = 0$ ) dos osciladores do *meio* foram geradas aleatoriamente e obedecem uma distribuição linear em torno de zero.

## 4

# Transferência de Energia e Dissipação

### 4.1 Dinâmica da Transferência de Energia

Nesta seção discutiremos os resultados referentes a duas situações físicas distintas: a redistribuição interna de energia e a transferência da partícula entre os poços de potencial. Para a questão da redistribuição de energia vamos analisar como a energia do sistema total é redistribuída — entre o sistema de interesse e os osciladores do *meio* — com o passar do tempo, enquanto a partícula permanece confinada em apenas um poço de potencial, ou seja, a energia inicial da partícula é menor do que a energia referente a altura da barreira do poço de potencial. Para o caso da transferência da partícula vamos analisar a redistribuição da energia quando a partícula salta entre os poços do potencial assimétrico, neste caso a energia inicial da partícula é maior que a energia da barreira de potencial.

Essas duas situações podem ser encaradas como o análogo clássico de uma dinâmica quântica bem mais complicada, como por exemplo, a redistribuição intramolecular de energia e a transferência intermolecular de cargas [85]. Nessa analogia a partícula confinada em um dos poços do potencial poderia corresponder a uma carga ligada a uma molécula; enquanto a transferência da partícula entre os poços

de potencial corresponderia a transferência de carga de uma molécula para outra. Devemos salientar que esta é apenas uma analogia, não sendo a intenção deste trabalho fazer qualquer correspondência direta entre os resultados clássicos com o problema quântico. Lembramos também que todos os resultados apresentados neste capítulo foram obtidos via a integração numérica das equações de movimento: Eq. (3.15) e Eq. (3.16), considerando a força externa nula  $F = 0$ , e normalizando os somatórios que aparecem na Eq. (3.15) pelo fator  $1/N$ . Fizemos essa normalização porque o acoplamento efetivo entre sistema e *meio* aumenta com  $N$ , como já foi mostrado na Ref. [86].

Trataremos nesta seção das duas situações mencionadas anteriormente, e para esse propósito apenas uma trajetória foi considerada, em outras palavras, não são apresentadas médias sobre um conjunto de trajetórias. A distribuição de Debye, Fig. 3.10 (a), é utilizada em ambos os casos.

#### 4.1.1 Redistribuição Interna de Energia

A Fig. 4.1 mostra, simultaneamente, a dependência temporal: da energia total  $E_T$  (Eq. (3.21)), da energia do sistema  $E_S$  (Eq. (3.18)), da energia de interação  $E_I$  (Eq. (3.20)) e da energia dos osciladores  $E_O$  (Eq. (3.19)). Neste caso, apenas um oscilador foi considerado, ou seja, tomamos  $N = 1$ . O tempo de integração apresentado na figura não é muito grande para que se possa ver os detalhes das variações temporais nas diferentes energias. Essas variações na energia da partícula ocorrem próximas da energia total, enquanto a dependência temporal da energia do oscilador e da energia de interação apresenta o mesmo comportamento qualitativo mas com sinais opostos. As variações que ocorrem no valor das energias acontecem com uma frequência alta de troca ( $\omega_{alta} \sim 1,4$ ), enquanto a frequência do oscilador é  $\omega_1 \sim 2,05$ . A trajetória da partícula no espaço de fases pode ser observada na Fig. 4.2 (a). Nessa situação a partícula está oscilando em torno do mínimo do poço de potencial apresentando pequenas variações temporais em sua energia, que é bastante próxima da energia total (ver detalhes desta variação na figura menor contida na

Fig. 4.1).

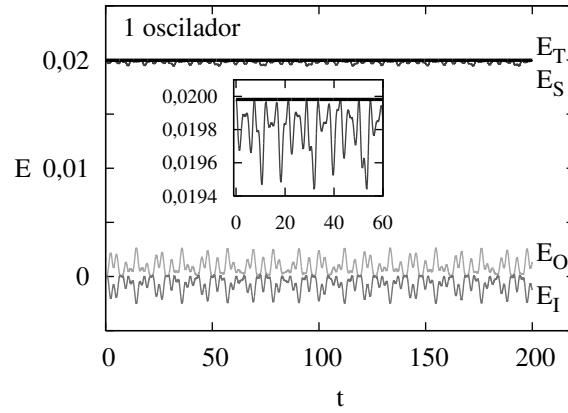


Fig. 4.1: Evolução temporal das energias individuais:  $E_T$ ,  $E_S$ ,  $E_O$  e  $E_I$ . A figura interna mostra os detalhes da evolução temporal para a energia da partícula no intervalo de tempo  $0 \leq t \leq 60$ .

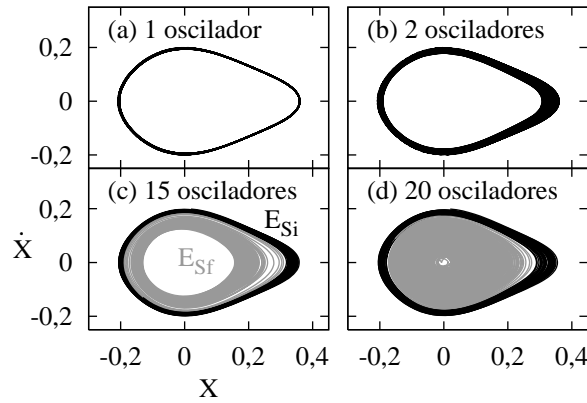


Fig. 4.2: Espaço de fases da partícula acoplada com um meio composto por (a) 1 oscilador, (b) 2 osciladores, (c) 15 osciladores e (d) 20 osciladores.

Na Fig. 4.3 (a) podemos ver a dependência temporal das energias para o caso onde temos dois osciladores ( $N = 2$ ), com frequências  $\omega_1 \sim 2,05$  e  $\omega_2 \sim 1,77$ . Como no caso anterior, as trocas de energia ocorrem com frequência alta  $\omega_{alta}$ , que não pode ser observada para a escala de tempo mostrada na Fig. 4.3 (a). Porém, podemos observar uma nova oscilação de troca com uma frequência menor  $\omega_{menor} \sim 0,023$ , e com amplitude de oscilação maior. Observamos que quando a energia do sistema diminui, conseqüentemente a energia dos osciladores aumenta, e uma porcentagem

maior dessa energia é transferida para o oscilador de frequência mais baixa, no caso  $\omega_2 \sim 1,77$ . Isso é observado na Fig. 4.3 (b) onde a energia dos osciladores é mostrada individualmente em função do tempo. Claramente observamos que a maior fração da energia, aproximadamente 80%, é transferida para o oscilador com a frequência menor. Observar que os máximos para  $E_O$  da Fig. 4.3 (a) coincidem exatamente com os máximos da Fig. 4.3 (b). Ainda neste caso, o sistema possui em média a maior parte da energia total.

A dinâmica da partícula pode ser observada no espaço de fases mostrado na Fig. 4.2 (b). Quando comparado com a Fig. 4.3 (a), podemos perceber que neste caso a trajetória da partícula está confinada numa região do espaço de fases localizada ainda distante da origem. As oscilações visíveis no valor da energia  $E_S$ , observadas na Fig. 4.3 (a), estão relacionadas com o movimento da partícula no espaço de fases. Para os instantes de tempo em que a partícula move-se sobre a curva mais

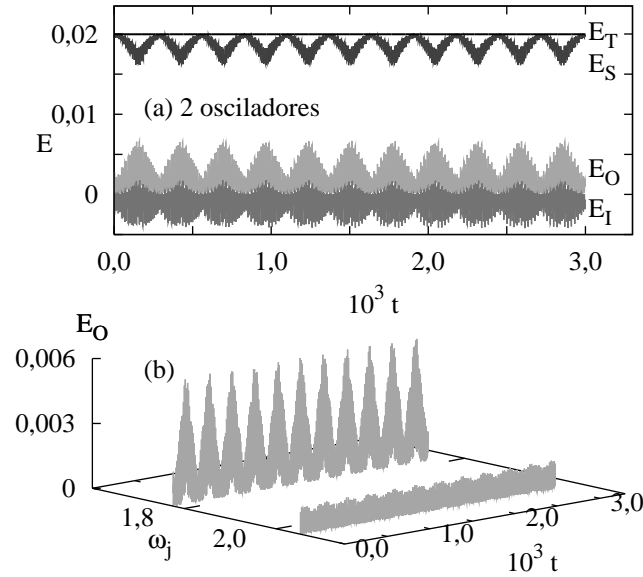


Fig. 4.3: Evolução temporal das energias individuais para o caso  $N = 2$ . (a) Essa figura mostra a variação temporal das energias:  $E_T$ ,  $E_S$ ,  $E_O$  e  $E_I$ . (b) Detalhes da energia dos Osciladores  $E_O$ , exibindo o fluxo de energia para cada uma das frequências.

externa do espaço de fases, a energia  $E_S$  encontra-se mais próxima da energia total. Devido ao acoplamento com o *meio*, a partícula perde temporariamente parte de sua

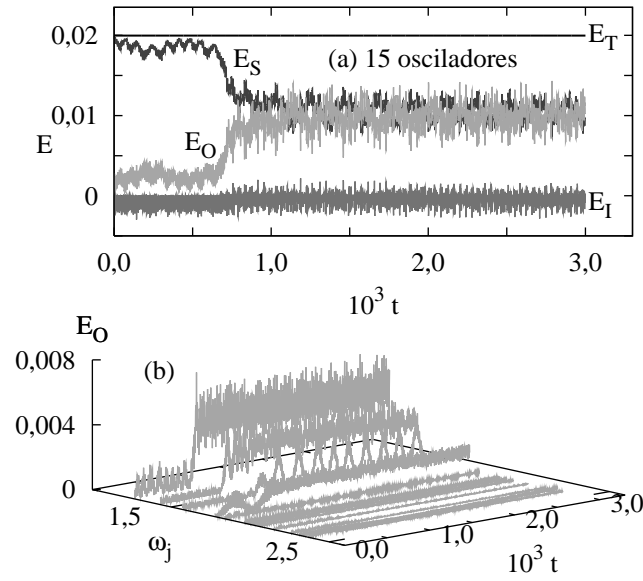


Fig. 4.4: Evolução temporal das energias individuais para o caso  $N = 15$ . (a) Energia total  $E_T$ , energia do sistema  $E_S$ , energia dos osciladores  $E_O$  e energia de interação  $E_I$ . (b) Detalhes da energia dos Osciladores  $E_O$ , exibindo o fluxo de energia para cada uma das freqüências.

energia inicial e move-se para a curva localizada na região mais interna do espaço de fases, voltando mais tarde para a curva mais externa. Essas freqüentes mudanças no movimento da partícula, entre a curva mais externa e interna, ocorrem com a freqüência  $\omega_{menor} \sim 0,023$ .

A Fig. 4.4, de forma semelhante às figuras anteriores, mostra a evolução temporal das energias mas agora considerando  $N = 15$  osciladores. A freqüência menor com que ocorrem as trocas de energia é  $\omega_{menor} \sim 0,035$  (neste caso para tempos  $t \lesssim 670$ ). Para esses tempos, a partícula move-se no espaço de fases sobre as curvas de cor preta na região mais externa do espaço de fases, veja na Fig. 4.2 (c) a indicação  $E_{Si}$ . A diferença em relação aos casos anteriores, ou seja, para  $N = 1$  e  $N = 2$  osciladores, Figs. 4.2 (a) e 4.2 (b), é que próximo de  $t \sim 670$  parte da energia  $E_S$  do sistema é transferida para o *meio*, reduzindo-se praticamente à metade.

Na Fig. 4.4 (b) podemos ver que os osciladores com menor freqüência recebem a maior porcentagem da energia cedida pela partícula. Nesse momento a trajetória da partícula no espaço de fases fica restringida a região mais próxima da

origem, ou seja, sobre as curvas de cor cinza, como podemos ver na indicação  $E_{Sf}$  da Fig. 4.2 (c), não retornando mais (para o tempo integrado) para a região externa  $E_{Si}$ . A partícula perde uma parte considerável de sua energia inicial que não é mais recuperada, aparecendo pela primeira vez o efeito característico de dissipação. Para os parâmetros aqui considerados,  $N \sim 15$  apresenta-se como o limiar para o surgimento dos efeitos de dissipação de energia. É importante lembrar que usamos somente uma trajetória, portanto o limiar  $N \sim 15$  pode mudar quando calculamos valores médios, ou seja, quando calculamos médias sobre condições iniciais.

Como podemos observar, para todos os casos apresentados nesta seção, a energia total  $E_T$  é constante no tempo enquanto os valores para as energias do sistema  $E_S$ , dos osciladores  $E_O$  e da interação  $E_I$  então constantemente variando com o tempo. Como já havíamos comentado anteriormente, o sistema como um todo é conservativo, porém quando analisamos o sistema isolado podemos perceber os efeitos de dissipação e as trocas de energia entre a partícula e o *meio*.

Na Fig. 4.5 (a) a dependência temporal das energias para o caso  $N = 20$  osciladores é apresentada. Neste caso, a partícula perde uma porcentagem ainda maior de sua energia inicial. Para tempos entre 0 e  $1,3 \times 10^3$ , o sistema perde cerca de 75% de sua energia inicial para os osciladores do *meio*, que têm um aumento de energia na mesma proporção. Após esse “transiente”, a dinâmica parece atingir uma situação de equilíbrio, onde a amplitude da energia de interação  $E_I$  diminui, enquanto o sistema e os osciladores ficam constantemente trocando energia. A frequência com que ocorre essas constantes trocas de energia é  $\sim 0,057$ .

Observamos que para os instantes de tempo em que a energia dos osciladores aproxima-se da energia total  $E_O \sim E_T$ , e simultaneamente a energia do sistema aproxima-se de zero  $E_S \sim 0$ , a amplitude de oscilação da energia de interação vai a zero  $E_I \rightarrow 0$ . Nesses instantes de tempo, a maior fração da energia total é usada pelo *meio*, e a partícula fica oscilando, com uma pequena amplitude, em torno do mínimo do poço de potencial.

Essa situação é bastante diferente do caso anterior  $N = 15$ , na Fig. 4.4,

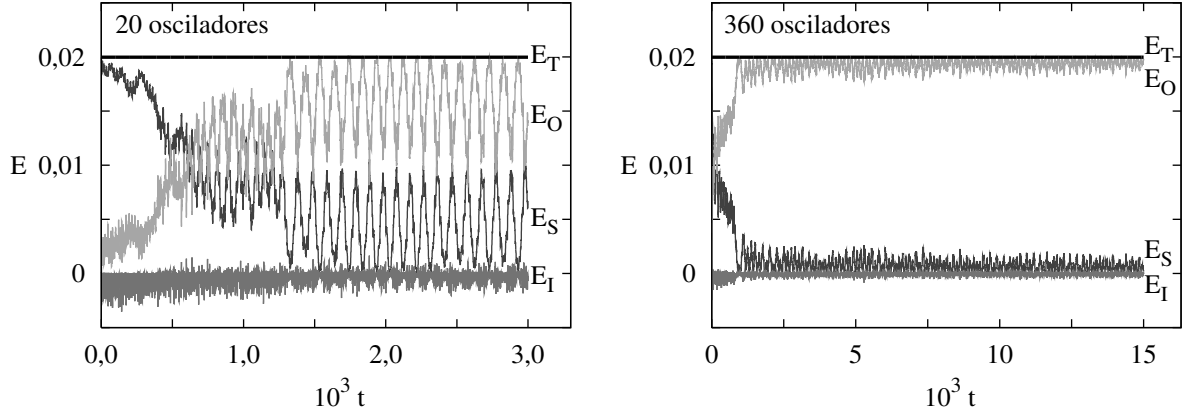
(a)  $N = 20$  osciladores.(b)  $N = 360$  osciladores.

Fig. 4.5: Evolução temporal das energias. Energia total  $E_T$ , energia do sistema  $E_S$ , energia dos osciladores  $E_O$  e energia de interação  $E_I$ .

onde a energia dos osciladores não tinha um valor próximo da energia total. Logo, podemos perceber que quando  $N$  aumenta, a energia dos osciladores também pode aumentar, chegando mais próximo do valor da energia total. Essa é uma primeira manifestação que, no limite de  $N \rightarrow \infty$ , a energia do sistema pode ser totalmente transferida para os osciladores do *meio*. A abordagem usada neste trabalho, que considera um *meio* finito, nos permite observar detalhadamente como isso acontece.

A trajetória para  $N = 20$  no espaço de fases é mostrada na Fig. 4.2 (d). Neste caso, a partícula move-se rapidamente da curva inicial mais externa (as curvas mais externas estão diferenciadas pela cor preta) em direção a origem do espaço de fases. Após o “transiente”  $t \gtrsim 1,30 \times 10^3$ , nos tempos em que a energia do sistema aproxima-se de zero, a partícula movimenta-se em direção à origem do espaço de fases (curvas de cor cinza). Por outro lado, para tempos em que ela recupera um pouco da energia, ela retoma o movimento sobre as curvas (de cor preta) na parte mais afastada da origem. A partícula movimenta-se entre esses dois limites com a mesma frequência ( $\sim 0,057$ ) da troca de energia.

Pode ser observado que, após se estabelecer uma situação de “equilíbrio”, em média cerca de 75% da energia total é usada pelo *meio* e 25% é usada pelo sistema. O *meio* faz parte da dinâmica total e afeta a partícula não apenas via



dissipação e amortecimento, mas também cedendo energia para ela. No caso limite de  $N \rightarrow \infty$ , a maior parte da energia do sistema é transferida para o *meio*, e desse modo apenas flutuações temporais são esperadas. Isto pode ser observado na Fig. 4.5 (b) com o aumento no número de osciladores para  $N = 360$ . Após se estabelecer uma situação de equilíbrio em  $t \sim 1100$ , as energias do sistema e *meio* apresentam apenas flutuações, enquanto a energia de interação fica próxima de zero. Como esperado, para um *meio* composto por muitos osciladores, a maior parte da energia total é transferida do sistema para o *meio*. Em vez de uma frequência de troca de energia bem definida entre sistema e *meio*, observamos apenas flutuações no valor da energia do sistema.

### 4.1.2 Transferência da Partícula

Um outro aspecto do estudo da dinâmica de transferência de energia ocorre quando a partícula salta de um poço do potencial para outro. Neste caso, em  $t = 0$ , a partícula recebe energia suficiente para saltar sobre a barreira de potencial. Então, ela move-se sobre outros poços do potencial, e os efeitos de amortecimento e dissipação de energia farão com que a partícula “caia” em um dos poços do potencial e permaneça lá. Para ilustrar esse comportamento, a intensidade do acoplamento entre sistema e *meio* foi tomada como sendo  $\gamma_j = 0,03$ .

Na Fig. 4.6 a evolução temporal para as energias é mostrada para vinte osciladores ( $N = 20$ ). A energia inicial do sistema é  $E_S(t = 0) \sim 0,0346$ , esse valor é maior comparado com o valor apresentado na última subseção, e a partícula salta (para a direita) sobre dois poços do potencial (veja o potencial na Fig. 3.9). A energia referente a altura da barreira de potencial é  $E_{pot} \sim 0,0323$ . Como o valor da intensidade do acoplamento entre sistema e *meio* é menor, os efeitos de dissipação são esperados ocorrer para tempos mais longos. Portanto, o tempo de integração para a Fig. 4.6 é maior. Todos os demais parâmetros do problema são os mesmos da Fig. 4.5 (a).

Com a finalidade de discutir melhor a dinâmica da transferência de energia,

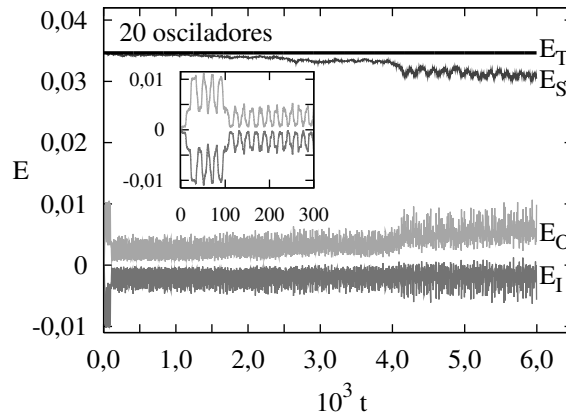


Fig. 4.6: Evolução temporal das energias individuais para o caso de transferência da partícula com  $N = 20$  osciladores. A ampliação mostrada dentro da figura exhibe os detalhes das energias dos osciladores  $E_O$  e da interação  $E_I$  para o intervalo de tempo  $0 \leq t \leq 300$ .

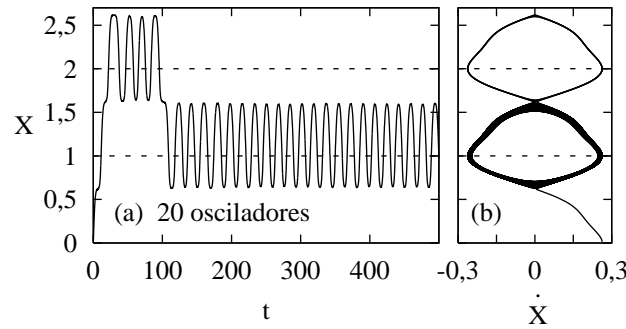


Fig. 4.7: Trajetória no espaço de fases para  $N = 20$ , mostrando em (a) a dependência temporal da posição da partícula e em (b) a sua correspondente trajetória no espaço de fases.

é importante observar também o que acontece com a posição da partícula no espaço de fases, mostrado na Fig. 4.7. Em  $t = 0$  a partícula encontra-se dentro do primeiro poço do potencial em  $X = 0$ , com velocidade  $\dot{X} = 0,263$ . Durante o intervalo de tempo  $0 \leq t \lesssim 22$ , a partícula movimenta-se para a direita ( $\dot{X} > 0$ ) sobre dois poços do potencial (lembrando que o período do potencial é 1) e, devido aos efeitos de dissipação, a partícula “cai” no poço de potencial localizado em torno do mínimo  $X = 2$  e fica oscilando em torno desse ponto durante o intervalo de tempo  $22 \lesssim t \lesssim 101$ .

Quando a partícula salta sobre os poços do potencial, a energia fica “ar-

mazenada” no *meio* que aparentemente alcança um tipo de “estado excitado” com energia média em torno de 0,0075. Isto pode ser observado na ampliação mostrada na Fig. 4.6 para  $t \lesssim 101$ . O mesmo acontece com a energia de interação, porém com valores negativos de energia. Quando o instante de tempo  $t \sim 101$  é atingido, a energia armazenada no *meio* é transferida de volta para a partícula, e ela salta para a esquerda retornando um poço de potencial, e fica oscilando em torno do mínimo  $X = 1$  durante todo o tempo integrado.

Quando a partícula pulou de volta para o último poço de potencial — em torno de  $X = 1$  — o *meio* decaiu para um “estado excitado” mais baixo, com energia média em torno de 0,0025. Podemos ver isso na ampliação exibida na Fig. 4.6 para  $t \gtrsim 101$ . Essa energia restante no *meio* não é suficiente para fazer com que a partícula salte para outro poço de potencial. Portanto, a partícula fica presa nesse poço de potencial centrado em torno de  $X = 1$  para todo o tempo de integração. Para tempos  $101 \lesssim t < 6,0 \times 10^3$ , a energia do sistema é lentamente transferida para o *meio* e a partícula presa no poço de potencial perde lentamente sua energia. Isso é manifestado pelo alargamento da curva referente a trajetória da partícula no espaço de fases da Fig. 4.7 (b).

Para baixos valores de  $N$  — em torno de 15 — o *meio* apresenta dois efeitos sobre a partícula: a) de amortecimento, fazendo ela “cair” em um poço de potencial e permanecer lá por um certo tempo, e b) pode injetar energia de volta para o sistema, transferindo a partícula para um outro poço de potencial. Com o acréscimo do número de osciladores o segundo efeito tende a desaparecer para  $N \gtrsim 27$ , e somente efeitos de dissipação e amortecimento se fazem presentes. Para valores de  $N$  ainda menores (como 1, 2, 3,..., 14), ambos efeitos estão presentes, embora os efeitos de amortecimento sejam muito pequenos. Por esta razão, dependendo da energia inicial da partícula ela pode se deslocar continuamente para o infinito.

Concluindo essa análise, observamos que para um *meio* composto por  $N \lesssim 27$ , ele é capaz de induzir a transferência da partícula de um poço do potencial para outro. Embora esse limite de 27 osciladores certamente mude com o uso de

outras condições iniciais e outros valores para a intensidade do acoplamento, um *meio* capaz de induzir a transferência da partícula foi observado para todos os casos que estudamos.

## 4.2 A Dependência da Taxa de Dissipação com o Meio

Embora os resultados apresentados na última seção sejam importantes para esclarecer e descrever os processos da dinâmica de transferência de energia para uma particular trajetória, eles não são suficientes para tirarmos conclusões sobre as leis gerais que regem a dinâmica de transferência de energia. Nosso objetivo agora é buscar por uma lei que seja geral. Com isso em mente, realizamos um estudo sobre a transferência de energia do sistema para o *meio* utilizando um conjunto de trajetórias, a fim de estudar a redistribuição interna de energia para o caso apresentado na Sec. 4.1.1 <sup>1</sup>. Com esse propósito fizemos uma média sobre 800 trajetórias, ou seja, uma média sobre 800 condições iniciais. Estudamos também a taxa com que a energia do sistema é perdida para o *meio* quando o número de osciladores cresce. A intensidade do acoplamento entre sistema e *meio* foi assumida como  $\gamma_j = 0,1$ , a mesma usada na Sec. 4.1.1. Discutimos os resultados somente para os instantes de tempo maiores que 1000. Para os instantes iniciais existe um regime transiente e, portanto, o sistema não encontra-se em uma situação de “equilíbrio”.

A Fig. 4.8 (a) mostra, em escala logarítmica, a evolução temporal da energia média do sistema  $\langle E_S \rangle$  para diferentes valores do número de osciladores que compõem o *meio*. Para  $N = 2$  não é observado um apreciável decaimento no valor da energia média do sistema, e deste modo, a dissipação é considerada nula. No entanto, para  $N \geq 20$  foi observado decaimento para todos os casos. Este fato concorda com os

---

<sup>1</sup>O caso da transferência de partícula não é necessário estudar aqui porque, após alguns instantes de tempo, ele se reduz ao caso da redistribuição interna de energia, ou seja, os efeitos de dissipação fazem com que a partícula permaneça num único poço de potencial.

resultados apresentados na última seção onde os efeitos de dissipação começam a aparecer por volta de  $N \sim 15$ . O objetivo agora é encontrar uma lei geral que descreva o decaimento temporal do valor da energia média do sistema para os instantes de tempos  $t > 1000$ .

Na Fig. 4.8 (a) podemos observar que a energia média decai de forma linear com o tempo, na escala logarítmica do gráfico. Portanto, a energia do sistema pode ser bem ajustada por uma lei de potência, dada pela curva

$$\langle E_S \rangle = A_0 t^{-\nu}, \quad (4.1)$$

onde  $A_0$  é uma constante e  $\nu$  é o expoente que determina a taxa de dissipação de energia. Ambas as constantes mudam quando o valor de  $N$  é modificado.

Na Fig. 4.8 (a) as curvas ajustadas pela Eq. (4.1) são representadas pela cor cinza para cada valor de  $N$ , demonstrando que a taxa de decaimento da energia média do sistema obedece uma lei de potência. A dependência de  $\nu$  com  $N$  para a distribuição de Debye *baixa* é mostrada na Fig. 4.8 (b) com os pontos (■). Neste

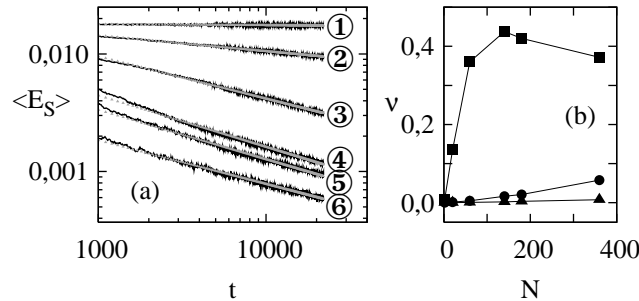


Fig. 4.8: (a) Evolução temporal da energia média do sistema  $\langle E_S \rangle$  (na cor preta) e as curvas ajustadas para  $N=2$ (①), 20(②), 60(③), 140(④), 180(⑤) e 360(⑥) (na cor cinza), com escala logarítmica. (b) Valores para o expoente  $\nu$  em função de  $N$ , para as seguintes distribuição de frequência dos osciladores do meio: Debye baixa (■), Gauss (●) e Debye alta (▲).

caso, pode ser observado que a taxa de dissipação de energia ( $\nu$ ) aumenta quando o número de osciladores aumenta entre  $N = 2$  e  $N = 140$ . Para esses valores de  $N$ , a energia do sistema é transferida mais rapidamente para o *meio* à medida que o número de osciladores aumenta. Para  $N = 140$  o expoente de dissipação de energia ( $\nu$ ) atinge um máximo, porém diminui um pouco para valores de  $N$  maiores.

O máximo observado na Fig. 4.8 (b) (com os pontos ■) para  $N = 140$ , significa que para esse número de osciladores a taxa de transferência de energia é maior, isso acontece porque existem osciladores com determinadas frequências que possivelmente favorecem a transferência de energia. Relembrando os resultados da Fig. 4.4 na Sec. 4.1.1, observamos que os osciladores do *meio* com frequência menor, isto é, aqueles com menor energia recebem uma maior porcentagem da energia fornecida pelo sistema. Uma outra observação a ser feita é que, a energia média do sistema é transferida mais rapidamente para o *meio* quando  $\omega_j \leq \omega_0$  do que quando  $\omega_j > \omega_0$ . Isso fica claro se percebemos que a transferência de energia  $E_0 \rightarrow E_j$  ocorre de forma mais provável se  $E_0 > E_j$ .

No presente caso, a distribuição de Debye *baixa* está centrada em torno de  $\omega_0$ , e o número de osciladores com frequência “menor” ou “maior” que  $\omega_0$  pode variar quando comparamos diferentes realizações para valores finito de  $N$  (isto depende do gerador de frequências utilizado). Fazendo uma análise mais detalhada da distribuição de frequências utilizada, verificamos que para uma realização específica, o número de osciladores com frequências “menores” que  $\omega_0$  é proporcionalmente maior para  $N = 140$  do que para  $N = 180$  e  $N = 360$ . Portanto, é esperado que a taxa de transferência de energia seja maior para o caso  $N = 140$ , como observado anteriormente na Fig. 4.8. Esse tipo de máximo pode ocorrer apenas para um número finito de osciladores que compõe um *meio* modulado. Esse máximo também não será encontrado quando a distribuição de frequências dos osciladores não incluir o valor  $\omega_0$ . A Fig. 4.8(b) exemplifica essa situação mostrando o valor de  $\nu$  da Eq. (4.1) em função de  $N$  para a distribuição Gaussiana (com os pontos ●) e para a distribuição de Debye *alta* (com os pontos ▲) com frequência de corte  $\omega_c \sim 4,0$ ; em ambos os casos todas as frequências dos osciladores são maiores que a frequência  $\omega_0$ , ou seja,  $\omega_j > 1$ . Deste modo, como é esperado, o valor do expoente  $\nu$  aumenta com o acréscimo de  $N$ . Como as distribuições de Debye (▲) e Gaussiana (●) estão centradas em torno de frequências mais altas ( $\omega_j > \omega_0$ ), os valores de  $\nu$  são menores quando comparados com os valores referentes a distribuição de Debye *baixa* (■).

## 5

# Surgimento da Dissipação sob a Ótica de Dinâmica não Linear

### 5.1 Transição: Conservativo - Dissipativo

Nesta seção apresentamos a discussão sobre o processo de transferência de energia do sistema para o *meio*. De acordo com os resultados apresentados no início do capítulo anterior, Cap.4 - Sec. 4.1, o sistema de interesse troca energia constantemente com os  $N$  osciladores do *meio*. Quando esse *meio* é constituído por poucos osciladores, a energia do sistema, que é transferida para o *meio*, pode retornar novamente para o sistema. É conhecido [18] que devido aos tempos de recorrência de Poincaré, a energia transferida para os osciladores do *meio* deve sempre retornar, em algum momento, para o sistema.

Em geral, quando consideramos poucos osciladores  $N \lesssim 15$ , os tempos de recorrência não são tão longos e podem ser observados em simulações numéricas [18]. Porém, para valores mais altos de  $N$ , os tempos de recorrência de Poincaré aumentam muito, e não podem mais ser observados para os tempos finitos de simulação. Neste caso, podemos dizer que a energia transferida para o *meio* não retorna mais, durante o tempo de integração, para o sistema. Portanto, quando consideramos valores de  $N$  mais altos é possível perceber que o sistema começa apresentar efeitos dissipativos a

tempos finitos.

Para todos os casos considerados neste capítulo, a amplitude de interação entre sistema e *meio* é  $\gamma_j = 0,01$ . Utilizamos sempre a mesma condição inicial para a partícula do sistema,  $X(t) = 0,0$  e  $V(t) = 0,2$ , sendo a energia adimensional<sup>1</sup> total  $E_T = 0,02$ . Consideramos a distribuição de Debye *alta* para as frequências dos osciladores, a qual compreende o intervalo  $1,1 \lesssim \omega_j \lesssim 2,1$ . A distribuição inicial das posições e velocidades dos osciladores é uniforme e em torno de zero. Em  $t = 0$  a energia inicial do sistema é dada por  $E_S \sim E_T = 0,02$ , a energia de interação é nula, e a energia dos osciladores é próxima de zero  $E_O \sim 0,0$ . Para todos os casos a amplitude da força externa é nula  $F = 0$ , e o sistema como um todo é conservativo. A partícula não tem energia suficiente para saltar sobre a barreira do potencial e, portanto, fica confinada num único poço do potencial assimétrico durante todo o tempo. A energia média da partícula  $\langle E \rangle$ , apresentada nesta seção, foi calculada sobre 800 condições iniciais dos osciladores.

A Fig. 5.1 mostra a energia média da partícula em função do tempo, para  $N = 12, 13, 14, 60$  e  $400$ . Para  $N = 12$  podemos observar que a energia oscila em torno do valor médio  $\sim 0,019$ , porém, a média temporal se mantém constante durante todo o tempo de integração. No entanto, para o caso  $N = 13$ , apesar das oscilações iniciais, a energia média começa a decrescer aproximadamente em  $t_{(13)} \sim 5 \times 10^3$ , ou seja, com o passar do tempo a média temporal da energia da partícula diminui. Isto significa que, no instante  $t \sim t_{(13)}$ , uma parcela da energia da partícula começa a ser transferida para o *meio*. Este resultado é mais nítido para  $N = 14$ , onde a energia média começa a diminuir em torno de  $t_{(14)} \sim 3 \times 10^3$ , e diminui continuamente durante todo o tempo de integração. Aumentando o valor de  $N$  para 60 e 400, observamos que o instante de tempo para o qual a energia começa ser transferida para o *meio* tende a diminuir. Por exemplo, para  $N = 400$  a energia do sistema começa ser transferida para o *meio* em  $t \sim 0,0$ . É interessante observar

---

<sup>1</sup>A energia é dada em unidades de  $ML^2\omega_0^2$  de acordo com as definições das variáveis adimensionais na Sec. 3.3 do terceiro capítulo.



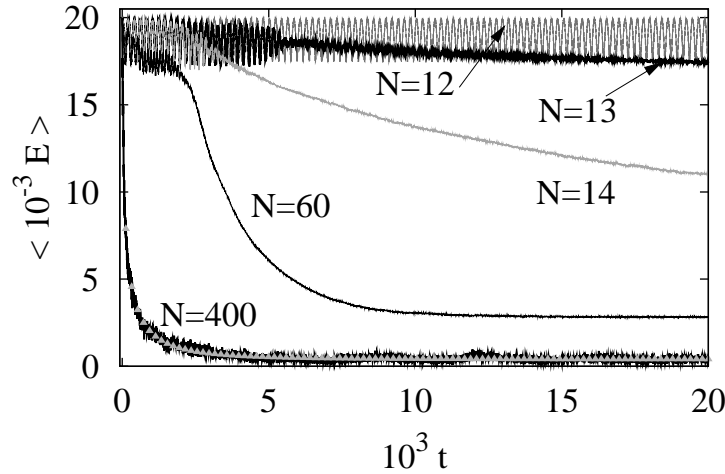


Fig. 5.1: Energia média da partícula em função do tempo, para  $N = 12, 13, 14, 60$  e  $400$ . A média foi realizada sobre 800 condições iniciais dos osciladores do *meio*. Os símbolos ( $\blacktriangle$ ), junto da curva  $N = 400$ , representam o ajuste da curva que é dado pela expressão:  $A + B \exp(-\alpha t^\beta)$  (*stretched exponential*) com os valores  $A \sim 4 \times 10^{-4}$ ,  $B \sim 0,027$ ,  $\alpha \sim 0,203$  e  $\beta \sim 0,384$ .

que a energia da partícula começa ser transferida para o *meio* exatamente quando a amplitude das oscilações temporais mais proeminentes da energia média diminuem.

O decaimento temporal da energia média para  $N = 400$  tem o comportamento descrito por uma função exponencial alongada — *stretched exponential* — expressa na forma  $A + B \exp(-\alpha t^\beta)$ . Veja o ajuste da curva representado pelos símbolos ( $\blacktriangle$ ) na Fig. 5.1 para  $N = 400$ , com os seguintes valores de parâmetros:  $A \sim 4 \times 10^{-4}$ ,  $B \sim 0,027$ ,  $\alpha \sim 0,203$  e  $\beta \sim 0,384$ . Os resultados apresentados na Sec. 4.2 do Cap. 4, mostraram que o decaimento da energia média do sistema é dado por uma lei de potência. Diferentemente, no caso aqui apresentado o decaimento temporal da energia média obedece uma função exponencial alongada ( $A + B \exp(-\alpha t^\beta)$ ) para  $N \gtrsim 150$  (na Fig. 5.1 mostramos o ajuste para  $N = 400$ ). A explicação para essa diferença entre os resultados é atribuída a dois fatores: (i) escolha do comprimento do intervalo em que são distribuídas as frequências dos osciladores do *meio*, (ii) o aumento do acoplamento efetivo entre sistema e *meio* quando o valor de  $N$  aumenta. Os resultados apresentados na Sec. 4.2 foram obtidos utilizando o compri-

mento da janela do espectro  $\sim 2,5$  que para distribuições de Debye *baixa* e Debye *alta* compreendem, respectivamente, os intervalos  $0 < \omega_j \lesssim 2,5$  e  $1,5 \lesssim \omega_j \lesssim 4,0$ . No presente capítulo o comprimento utilizado para a janela espectral é  $\sim 1,0$  e compreende o intervalo  $1,1 \lesssim \omega_j \lesssim 2,1$ . Para os resultados apresentados neste capítulo o acoplamento efetivo aumenta quando  $N$  aumenta, que é uma situação diferente do caso apresentado no Cap. 4.

De acordo com as observações a respeito da Fig. 5.1, podemos concluir que: a partícula do sistema começa “sofrer” os efeitos da dissipação para os valores de  $N$  entre 12 e 14. Para valores de  $N$  mais baixos, a partícula troca continuamente energia com o *meio*, porém, a média temporal da energia se mantém constante. Quando consideramos valores de  $N$  mais altos, a energia da partícula é transferida para o *meio* em  $t \sim 0,0$ , ou seja, a energia do sistema é rapidamente transferida para o *meio*. O decaimento temporal da energia média obedece uma função exponencial alongada quando  $N \gtrsim 150$ .

É importante novamente comentar que os resultados apresentados nesta seção, e neste trabalho, são válidos para o gerador específico de frequências usado nas simulações. Isto significa dizer que os valores de  $N$  no intervalo  $(12,14)$  — quando os efeitos da dissipação começam aparecer — poderiam mudar se outro gerador de frequências é usado. No entanto, usando outras sementes pudemos observar que o surgimento dos efeitos da dissipação ocorrem sempre para os valores de  $N$  no intervalo  $(10, 20)$ .

## 5.2 Análise das Séries Temporais

Uma série temporal consiste de um conjunto  $\{X_j\} = X(t_1), X(t_2), \dots, X(t_n)$  de valores, referentes aos instantes de tempo  $t_j$  (sendo  $j = 1, 2, 3, \dots, n$ ), que representam a evolução temporal de uma variável de estado de um sistema. Essa variável de estado, para o nosso caso, é a posição  $X(t)$  da partícula do sistema de interesse. Nosso objetivo consiste em obter informações sobre o comportamento dinâmico do sistema de interesse a partir da análise dessas séries temporais. Buscamos por in-

formações que nos permitam aferir se o comportamento do sistema é regular ou caótico quando variamos o número  $N$  de osciladores que compõe o *meio*. As ferramentas usadas para fazer o estudo das séries temporais foram: o espectro dos expoentes de Lyapunov [87,88] e o espectro de potências.

Para fazermos essa análise nós utilizamos o pacote numérico TISEAN [89,90]. A integração numérica para obtenção das séries foi feita até  $t = 2 \times 10^4$ , e o número total de pontos utilizados para cada série foi de  $2 \times 10^5$  pontos.

### 5.2.1 Expoentes de Lyapunov

Os expoentes de Lyapunov representam um dos critérios mais importantes utilizados para diagnóstico de caos em sistemas dinâmicos. Eles quantificam a dependência ou sensibilidade do sistema às condições iniciais, verificando a divergência exponencial no tempo de trajetórias vizinhas no espaço de fases de um sistema dinâmico. Para melhor entender essa situação, consideremos uma trajetória descrita por  $\vec{x}(t)$  e sua trajetória vizinha  $\vec{x}'(t)$ , definidas no espaço de fases  $m$ -dimensional. As respectivas condições iniciais são dadas por  $\vec{x}(t_0)$  e  $\vec{x}'(t_0) = \vec{x}(t_0) + \Delta\vec{x}(t_0)$ . Essas trajetórias evoluem no tempo e a distância entre elas, no instante  $t$ , é dada pela norma (no espaço Euclidiano) do vetor tangente  $\vec{w}(t)$ , ou seja,  $\|\vec{w}(t)\|$ . Em  $t = 0$  a distância entre as trajetórias vale  $\|\vec{w}(t_0)\|$ . Veja a ilustração na Fig. 5.2.

A taxa exponencial média de divergência do vetor tangente  $\vec{w}$ , em cada direção do espaço  $m$ -dimensional, é definida por [88,91]

$$\Lambda_i = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{t} \ln \frac{\|w_i(t)\|}{\|w_i(t_0)\|}, \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad (5.1)$$

os valores  $\Lambda_i$  são denominados de espectro dos expoentes de Lyapunov.

Para cada dimensão do espaço de fases existe um expoente de Lyapunov  $\Lambda_i$  associado que determina o comportamento do volume ocupado pelas condições iniciais ao longo do tempo. O comportamento caótico de um sistema é caracterizado pela existência de, pelo menos, um dos expoentes de Lyapunov positivo. A soma dos expoentes de Lyapunov ( $\sum_i \Lambda_i$ ) fornece informação a respeito da conservação

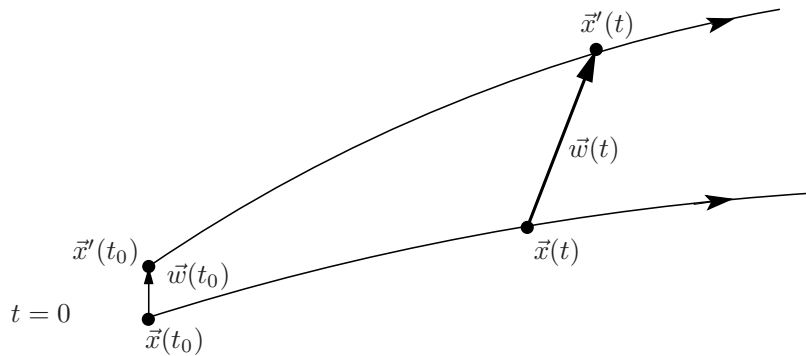


Fig. 5.2: Ilustração da evolução temporal de duas trajetórias vizinhas  $\vec{x}(t)$  e  $\vec{x}'(t)$ . Em  $t = 0$  as respectivas condições iniciais são  $\vec{x}(t_0)$  e  $\vec{x}'(t_0) = \vec{x}(t_0) + \Delta\vec{x}(t_0)$ . A distância entre essas trajetórias varia de  $\|\vec{w}(t_0)\|$  para  $\|\vec{w}(t)\|$ .

do volume inicial [87]. Se o sistema é dissipativo, o valor da soma dos expoentes de Lyapunov é negativo ( $\sum_i \Lambda_i < 0$ ) e se o sistema é conservativo, a soma dos expoentes é nula ( $\sum_i \Lambda_i = 0$ ).

Em séries temporais, o ponto de partida para o cálculo dos expoentes de Lyapunov é a trajetória reconstruída em uma dimensão de imersão adequada [92] (ver discussão na Sec. 5.2.2). Uma vez conhecendo a trajetória reconstruída, define-se uma trajetória fiducial a partir da seqüência de vetores reconstruídos. A seguir, deve-se analisar o que ocorre com pontos vizinhos desta trajetória. Com as informações sobre as taxas de divergência destes pontos, pode-se obter então os expoentes de Lyapunov.

### 5.2.2 Trajetória Reconstruída e Dimensão de Imersão

Para obter os valores dos expoentes de Lyapunov a partir da série temporal, primeiramente foi necessário determinar a dimensão de imersão  $m$  do espaço da trajetória reconstruída (espaço de imersão) [92]. O espaço da trajetória reconstruída consiste num espaço vetorial de dimensão  $m$ , que preserva as mesmas características do espaço vetorial “original” do qual a variável  $X(t)$  faz parte. Takens em 1981 provou que a partir de uma série temporal é possível obter a trajetória no espaço

vetorial reconstruído, e que ela preserva as mesmas informações da trajetória no espaço vetorial “original” [92].

De acordo com Takens o espaço de fases do sistema pode ser reconstruído a partir de uma série temporal escalar  $(X(t_1), X(t_2), \dots, X(t_n))$  usando o método das coordenadas defasadas. Esse método consiste em, a cada instante de tempo  $t_j$ , assinalar o ponto de coordenadas  $X(t_j), X(t_j + \tau), \dots, X(t_j + (m-1)\tau)$  no espaço de imersão  $m$ , sendo  $\tau$  uma defasagem temporal. Desse modo, variando  $j$  de 1 até  $n$ , obtém-se a trajetória reconstruída. Considerando que o vetor  $\vec{\xi}_\alpha$  representa a posição do ponto no espaço de imersão, no instante  $t_\alpha$ . Logo, a trajetória reconstruída é dada pela seqüência de vetores:

$$\begin{aligned}\vec{\xi}_1 &= (X(t_1), X(t_1 + \tau), \dots, X(t_1 + (m-1)\tau)) \\ \vec{\xi}_2 &= (X(t_2), X(t_2 + \tau), \dots, X(t_2 + (m-1)\tau)) \\ &\vdots \\ \vec{\xi}_\alpha &= (X(t_\alpha), X(t_\alpha + \tau), \dots, X(t_\alpha + (m-1)\tau))\end{aligned}$$

com  $\alpha = 1, 2, \dots, p$ , sendo a relação entre as constantes  $m, \tau, n$  e  $p$  dada por  $n = p + (m-1)\tau$ . O problema se resume em determinar os valores apropriados da dimensão de imersão  $m$  e do tempo de defasagem  $\tau$ . No entanto, de acordo com a Ref. [90], o cálculo do espectro do expoente de Lyapunov (utilizando o pacote TISEAN [89, 90]) é independente do tempo de defasagem  $\tau$ . Portanto, como nosso objetivo é apenas obter o espectro dos expoentes de Lyapunov, logo, nosso problema consiste em determinar apenas a dimensão de imersão  $m$  apropriada.

De acordo com o que acabamos de mostrar, a dimensão de imersão  $m$  é o número de coordenadas necessárias para localizar cada ponto da série no espaço reconstruído. Em nosso caso, os valores apropriados de  $m$  foram determinados utilizando o método dos falsos vizinhos [93]. A idéia do método consiste em assumir, inicialmente, um espaço de dimensão  $m$  e para cada ponto da trajetória reconstruída (representado pelo vetor  $\vec{\xi}_\alpha$ ) é calculado a distância entre esse ponto e seus pontos vizinhos mais próximos. Aumentando a dimensão de  $m$  para  $m+1$ , novamente verifica-se a distância entre os pontos vizinhos. Caso a distância entre os pontos

vizinhos tenha aumentado, dizemos que os falsos vizinhos foram separados. O processo se repete até encontrar o valor da dimensão cujo o número de falsos vizinhos se reduza a zero, ou seja, até que seja encontrado o valor ótimo da dimensão de imersão. Na Tab. 5.1 mostramos todos os valores apropriados da dimensão de imersão  $m$  para os diferentes valores de  $N$ .

$N$	dimensão de imersão $m$
1 - 5	2
6 - 12	3
13 e 14	4
$N \geq 15$	5

Tabela 5.1: Valores da dimensão de imersão  $m$  para diferentes valores de  $N$ .

Conhecendo a dimensão de imersão  $m$ , o passo seguinte foi calcular os expoentes de Lyapunov a partir da série temporal (utilizando o pacote numérico TISEAN [89, 90]). O algoritmo implementado pelo TISEAN para calcular o espectro de Lyapunov foi originalmente proposto por Sano e Sawada [88]. A idéia fundamental consiste numa aproximação das matrizes jacobianas a partir de um algoritmo de mínimos quadrados. Para maiores detalhes ver as Refs. [88, 90]. O espectro de potência foi calculado diretamente da série temporal utilizando o pacote TISEAN ou o *Software Livre* XMGRACE [94], o resultado obtido foi o mesmo.

Iniciaremos a discussão a respeito do espectro de potência e dos expoentes de Lyapunov, apresentando os resultados para valores de  $N$  mais baixos. Em seguida, quando aumentamos o valor de  $N$ , a discussão engloba a transição entre o regime conservativo e dissipativo. E finalmente, vamos encerrar essa análise discutindo os resultados para valores de  $N$  mais altos.

### 5.2.3 Caso $N = 0$

Neste caso não existe o *meio*. A partícula oscila livremente dentro do potencial assimétrico, Fig. 5.3, com uma frequência angular,  $\omega \sim 0,56$ , bem definida. O espaço de fases é bidimensional e conservativo, logo, este caso é integrável.

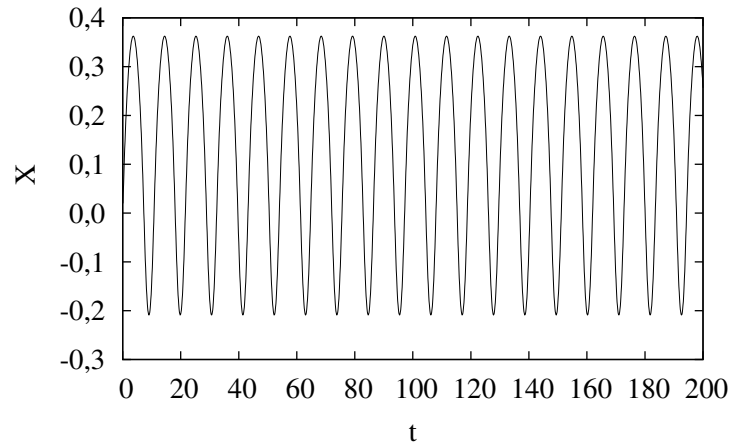


Fig. 5.3: Oscilações da partícula em torno do mínimo do potencial assimétrico em função do tempo para  $N = 0$ . O período das oscilações é  $T \sim 11$ .

### 5.2.4 Caso $1 \leq N \leq 12$

Para  $N > 0$  a dinâmica da série temporal da partícula começa apresentar alguns efeitos devido a interação com os osciladores do *meio*. No intervalo  $1 \leq N \leq 12$ , todos os valores que foram obtidos para o expoente de Lyapunov ( $\Lambda$ ) independem do tempo, e foram estimados como sendo  $\Lambda \lesssim 10^{-3}$ . Logo, podem ser considerados zero.

A Fig. 5.4 (a) mostra o espectro de potências para o caso  $N = 1$ . Podemos observar que os picos são bem localizados em certos valores de frequências. A frequência principal,  $\omega \sim 0,56$ , corresponde a frequência angular da partícula do sistema de interesse. Essa é a frequência do movimento da partícula em torno do mínimo do potencial assimétrico. Todos os outros picos são os altos harmônicos dessa frequência principal. Para valores de  $N$  entre 2 e 12 (o espectro não é mostrado),

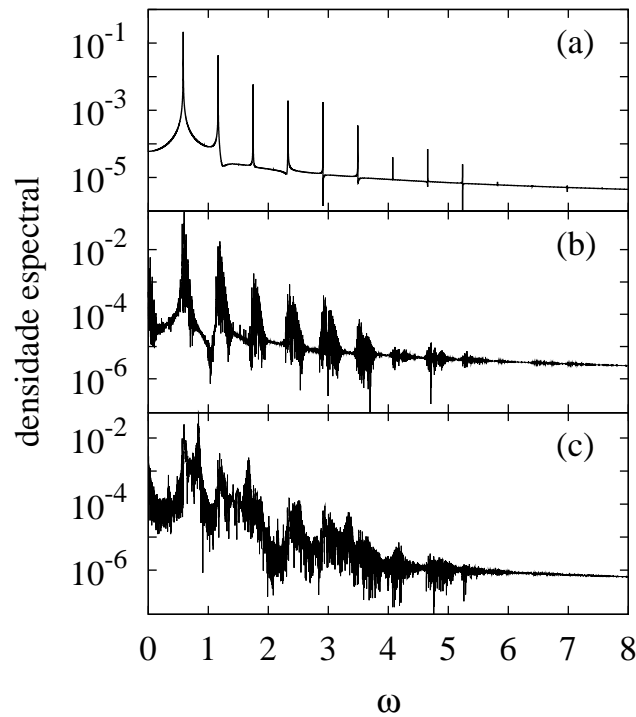


Fig. 5.4: Espectro de potências para (a)  $N = 1$ , (b)  $N = 13$  e (c)  $N = 20$ .

começam aparecer novas frequências em torno dos picos das frequências mostrados na Fig. 5.4 (a) para  $N = 1$ . De acordo com os resultados do espectro de potências, juntamente com os expoentes de Lyapunov nulos, podemos concluir que a dinâmica da partícula do sistema é regular para  $N \leq 12$ .

### 5.2.5 Caso $13 \leq N \leq 20$

Mudanças significativas ocorrem neste regime, o qual é caracterizado pela emergência da dissipação (veja a discussão na Sec.5.1). De acordo com o que foi mencionado anteriormente, para  $N = 13$  e 14 a dimensão de imersão apropriada é  $m = 4$  e para  $N \geq 15$  é  $m = 5$ , veja a Tab. 5.1. Primeiramente vamos mostrar os resultados para  $N = 13$ .

A Fig. 5.5 mostra: (a) a energia da partícula e (b) os quatro valores do Lyapunov em função do tempo. Lembramos que neste caso foi considerado apenas uma trajetória, e a média temporal da energia da partícula é constante (ver Fig. 5.5



(a)). Portanto, essa situação é diferente do resultado apresentado na Fig. 5.1 para  $N = 13$ , onde foi tomada uma média sobre 800 condições iniciais. Na Fig. 5.5 (b) podemos observar que dois expoentes de Lyapunov são negativos e dois são positivos, e são aproximadamente constantes durante todo tempo. A soma dos quatro expoentes de Lyapunov é zero, isso significa que toda a dinâmica descrita pela série temporal da partícula é conservativa, como esperado. Os erros associados aos valores dos expoentes de Lyapunov serão apresentados mais adiante.

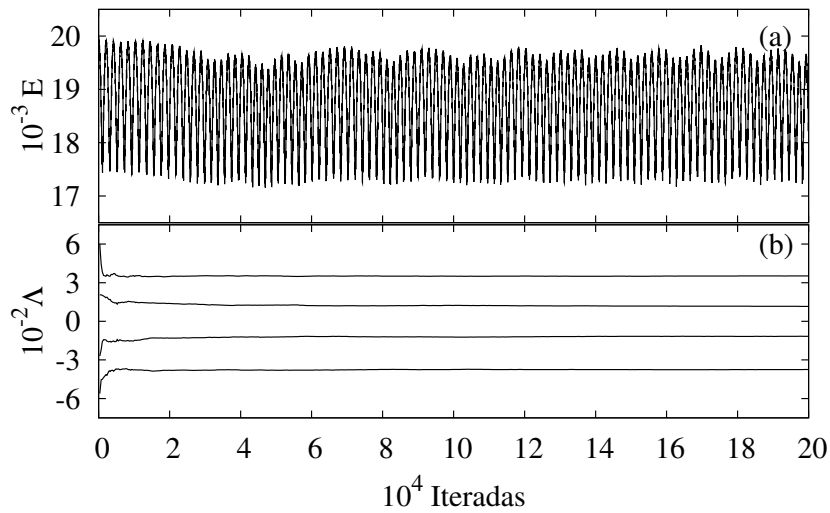


Fig. 5.5: (a) Energia da partícula do sistema e (b) o espectro de Lyapunov para  $N = 13$  em função das iterações da série temporal.

A Fig. 5.4 (b) mostra o correspondente espectro de potências para  $N = 13$ . Quando comparamos a Fig. 5.4 (a) e (b), podemos perceber que o efeito devido aos 13 osciladores do *meio* sobre a dinâmica da partícula, acaba resultando no aparecimento de novas frequências de pequena amplitude em torno das frequências principais. Em outras palavras, o espectro de frequências começa apresentar um alargamento em torno das frequências principais de oscilação da partícula no poço de potencial assimétrico.

O espectro de frequências para  $N = 20$  é apresentado na Fig. 5.4 (c). Neste caso podemos ver que as frequências principais praticamente desaparecem, e o que se

observa é um espectro complicado que pode ser um indicativo de que o caso  $N = 20$  apresenta uma dinâmica caótica. Esse resultado é confirmado, na sequência do texto, com a discussão sobre os expoentes de Lyapunov.

A Fig. 5.6 mostra: (a) a energia da partícula do sistema e (b) os valores dos Lyapunovs positivos em função do tempo para  $N = 20$ . Podemos observar que ambos os Lyapunovs positivos decrescem exatamente para os instantes que a amplitude de oscilação temporal da energia diminui. Na verdade, no momento que a amplitude de oscilação temporal da energia começa a diminuir, simultaneamente, a energia começa a ser transferida para o *meio*, e os expoentes de Lyapunov positivos decrescem. A

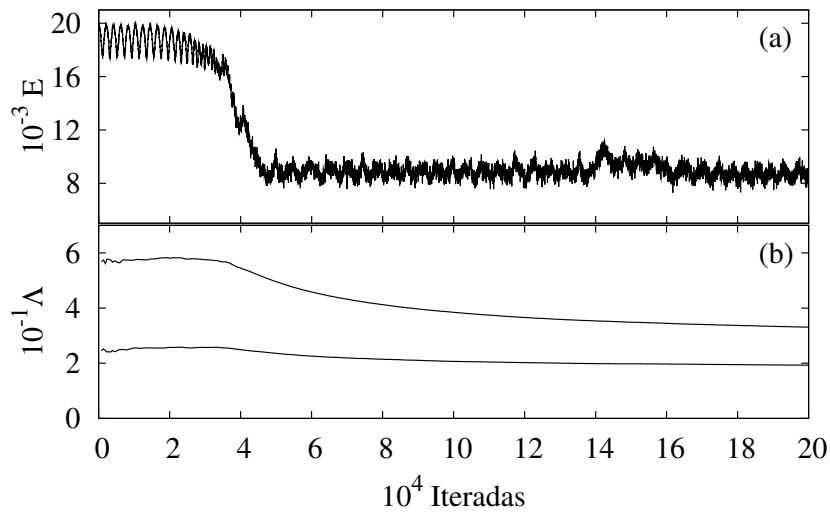


Fig. 5.6: (a) Energia da partícula do sistema e (b) os valores positivos do espectro de Lyapunov para  $N = 20$  em função das iterações da série temporal.

relação entre o decréscimo da amplitude das oscilações temporais da energia, e o fato dos expoentes de Lyapunov também decrescerem, é uma consequência da relação entre a taxa de contração do espaço de fases e o a soma dos expoentes de Lyapunov da partícula [91].

Note que em regiões onde a dissipação aparece, a partícula do sistema se comporta dissipativamente, logo, poderíamos esperar que a soma dos expoentes de Lyapunov fosse negativa. Entretanto, a soma dos expoentes de Lyapunov é sempre

próxima de zero (dentro do erro estimado). Aparentemente não existe uma maneira de separar os expoentes de Lyapunov relacionados com o sistema e os expoentes de Lyapunov relacionados com o *meio*. Em outras palavras, apesar da dinâmica do sistema ser dissipativa, a análise não linear aparentemente “reconhece” que a série temporal pertence a uma dinâmica que, em sua totalidade, é conservativa.

### 5.2.6 Caso $N > 20$

Para valores de  $N$  maiores, o comportamento da dependência temporal dos expoentes de Lyapunov não é significativamente diferente da discussão anterior. Basicamente, no instante de tempo para o qual a energia da partícula começa ser transferida para o *meio*, os expoentes de Lyapunov decrescem. Como mencionado anteriormente, Sec. 5.1, quando  $N$  aumenta a energia é transferida rapidamente para o *meio* e num curto intervalo de tempo perto de  $t \sim 0,0$ .

Na Fig. 5.7 é mostrado o espectro de potências para  $N = 60, 150$  e  $4000$ . Claramente é possível observar a complexidade resultante devido a presença de todos os osciladores do *meio*. As principais frequências, que eram observadas para valores de  $N$  mais baixos (ver Fig. 5.4), agora estão misturadas às outras frequências originadas pelas colisões da partícula com os osciladores. Em especial, a frequência fundamental principal,  $\omega \sim 0,56$ , desapareceu. Altas frequências foram excitadas e o espectro de frequências, Fig. 5.7 (a)-(b), sugere uma dinâmica caótica para  $N = 60$  e  $150$ . Para  $N = 4000$  o espectro de frequências, Fig. 5.7 (c), volta a exibir características de um movimento regular.

Na Fig. 5.7 (a) e (b) também é possível observar o surgimento de uma nova frequência próximo de  $\omega \sim 0,98$ . Para  $N = 4000$  essa nova frequência encontra-se próximo de  $\omega \sim 0,76$ . A origem física do surgimento dessa nova frequência é esclarecida na sequência do texto. No caso  $N = 4000$  (Fig. 5.7 (c)), além do aparecimento da frequência fundamental principal  $\omega \sim 0,76$  e seus altos harmônicos localizados em  $1,52, 2,28, 3,01, \dots$ , todas as  $N = 4000$  frequências dos osciladores do *meio* também aparecem no espectro de frequências da partícula, no intervalo

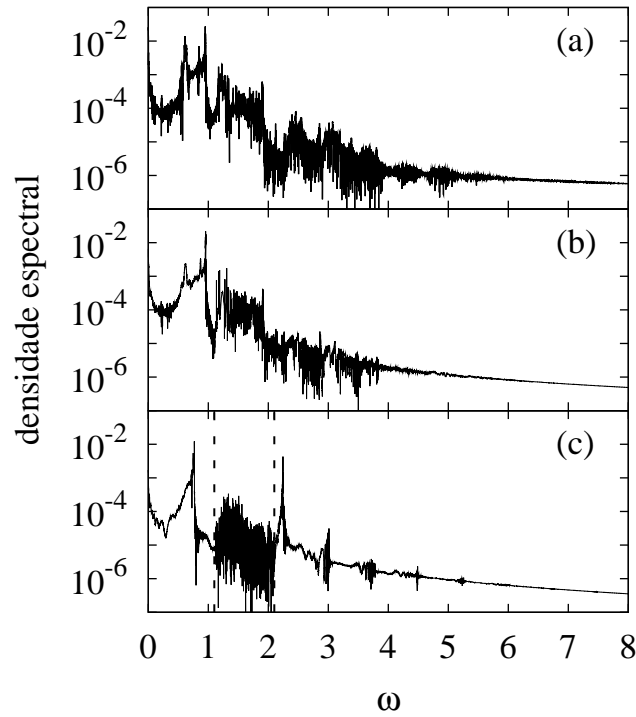


Fig. 5.7: Espectro de freqüências para (a)  $N = 60$  (b)  $N = 150$  e (c)  $N = 4000$ . As linhas verticais tracejadas na figura (c) indicam a região do espectro referente as freqüências dos osciladores do meio.

$1,1 \lesssim \omega \lesssim 2,1$  indicado pelas linhas verticais tracejadas. Observe que o pico da freqüência do primeiro alto harmônico ( $\omega \sim 1,52$ ) desaparece entre as freqüências dos osciladores.

Na sequência apresentamos um panorama geral a respeito do comportamento da energia e dos expoentes de Lyapunov em função de  $N$ . A Fig. 5.8 mostra: (a) a energia temporal média da partícula para os instantes finais do tempo de integração e (b) os expoentes de Lyapunov positivos em função de  $N$ . Essa energia média da partícula, referente aos instantes finais de tempo, foi calculada levando em conta os últimos  $2 \times 10^3$  instantes da integração numérica. Observe que para os valores de  $N \lesssim 12$ , a energia inicial ( $\sim 0,02$ ) é igual a energia final, ou seja, não houve transferência de energia do sistema para o *meio*. Neste caso, os valores dos expoentes de Lyapunov são próximos de zero e a dinâmica do sistema é regular.

Os erros associados aos valores dos expoentes de Lyapunov são identificados

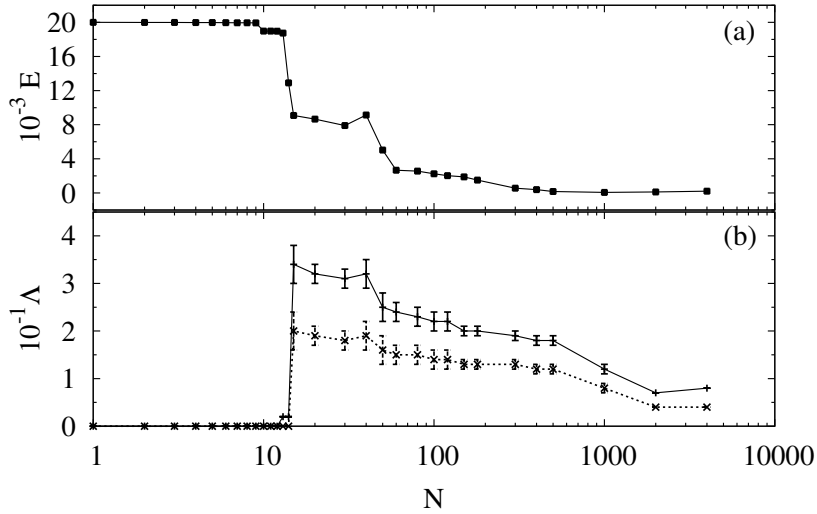


Fig. 5.8: (a) Energia média da partícula para os instantes finais da integração numérica e (b) os expoentes de Lyapunov positivos em função de  $N$ . As barras verticais em (b) indicam o erro associado com os valores do expoente de Lyapunov.

pelas barras verticais na Fig. 5.8 (b). Para  $N \leq 12$  a dimensão de imersão é  $m = 3$ , e obtemos apenas um expoente de Lyapunov positivo. Em torno de  $N \sim 13$  e 14 a energia média final começa a decrescer, significando que uma parcela da energia do sistema foi transferida para o *meio*, em acordo com o que foi observado na Sec.5.1. Próximos desses valores de  $N$  (13 e 14), para os quais a dimensão de imersão é dada por  $m = 4$ , os dois expoentes de Lyapunov positivos aumentam e a partícula começa a apresentar um comportamento caótico.

Para valores de  $N$  mais altos, os expoentes de Lyapunov decrescem lentamente (Fig. 5.8 (b)) seguindo o comportamento qualitativo da energia média final (Fig. 5.8 (a)). Isso é uma consequência de um resultado geral bem conhecido: o expoente de Lyapunov de uma partícula cresce (decresce) quando a energia total da mesma cresce (decresce). É interessante observar que muito próximo da região onde a dissipação começa aparecer ( $13 \lesssim N \lesssim 15$ ), os expoentes de Lyapunov crescem e a dinâmica do sistema sofre uma transição do movimento regular para caótico. No entanto, para valores de  $N$  ainda mais altos a energia média final da partícula decresce, os expoentes de Lyapunov também decrescem, e o movimento da partícula

tende a ser regular novamente. Isso pode ser visto quando comparamos as Fig. 5.7 (c) e Fig. 5.8 para  $N = 4000$ . Neste caso a partícula apresenta uma energia final muito baixa e os expoentes de Lyapunov assumem valores próximos de zero. Como a energia final da partícula é muito baixa, é esperado que essa partícula realize pequenas oscilações, com frequência  $\omega_0$ , em torno do mínimo do potencial. Essa frequência  $\omega_0$  é a frequência do movimento linear próximo do mínimo do potencial.

Visto que todas as frequências aqui apresentadas são dadas em unidades de  $\omega_0 = 1,0$ , então concluímos que para valores altos de  $N$ , a partícula do sistema oscila muito perto do mínimo do potencial e com uma frequência principal próximo de  $\omega \sim \omega_0 = 1,0$ . E essa é a origem física do surgimento das novas frequências que aparecem na Fig. 5.7, que são em torno de:  $\omega \sim 0,98$  para a figura (b) e  $\omega \sim 0,76$  para a figura (c), sobre as quais comentamos anteriormente.

## 6

# Transporte de Partículas

## 6.1 O Mecanismo de Transporte

O transporte de partículas, através dos múltiplos poços do potencial, ocorre devido a ação combinada da assimetria do potencial periódico com a força externa dependente do tempo, de acordo com o modelo de estudo dado pelas Eqs. (3.15) e (3.16). A força externa utilizada para representação do modelo é uma força periódica,

$$F_{ext} = F \cos(\omega t) , \quad (6.1)$$

e o potencial, devido a ação dessa força, somado ao potencial periódico e assimétrico  $V(X)$ , dado pela Eq. (3.17), resulta no potencial efetivo

$$V(X) - XF \cos(\omega t) . \quad (6.2)$$

Esse potencial efetivo é responsável pelo transporte da partícula através dos múltiplos poços do potencial. Para melhor entender o mecanismo de transporte, observamos a Fig. 6.1. Inicialmente, em  $t = 0$ , a partícula encontra-se confinada no poço de potencial com mínimo em  $X = 0$ , veja a curva contínua na Fig. 6.1. Posteriormente, para os instantes de tempo em que a força externa assume seu valor máximo  $(+F)$ , o potencial efetivo assemelha-se a uma escada ascendente para direita, veja a curva tracejada na Fig. 6.1. Para os instantes de tempo em que a força externa assume seu valor mínimo  $(-F)$ , o potencial efetivo assemelha-se a uma escada descendente

para direita, veja a curva pontilhada na Fig. 6.1. Portanto, podemos perceber que com o passar do tempo a força externa muda a inclinação do potencial assimétrico, e conseqüentemente, a partícula escapa do mínimo do potencial e pode movimentar-se através dos múltiplos poços<sup>1</sup>.

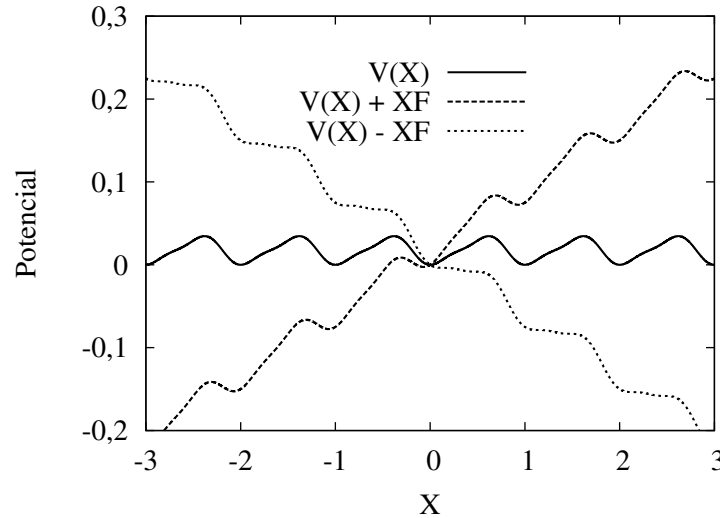


Fig. 6.1: Potencial efetivo,  $V(X) + XF \cos(\omega t)$ , representando a força externa para diferentes instantes de tempo:  $F \cos(\omega t) = 0$  (linha contínua),  $F \cos(\omega t) = F = 0,075$  (linha tracejada) e  $F \cos(\omega t) = -F = -0,075$  (linha pontilhada).

Para melhor entender a dinâmica do transporte de partículas, faremos algumas observações sobre o efeito da força externa no potencial efetivo, Eq. (6.2). Primeiramente, aumentando muito a amplitude  $F$ , o mínimo do potencial assimétrico desaparece nos tempos “extremos”. E devido a assimetria do potencial  $V(X)$ , esse mínimo desaparece para diferentes valores de  $F$ . Na verdade, ele desaparece para  $F > F_{min} \sim 0,075$  para os instantes nos quais a força externa assume o valor mínimo  $-F$ , veja a curva pontilhada na Fig. 6.1, e para  $F > F_{max} \sim 0,15$  para os instantes nos quais a força externa assume o valor máximo  $+F$ . Para valores intermediários de tempo, ou seja, entre os instantes em que  $F_{ext}$  assume os valores máximo e mínimo, o potencial efetivo continuamente muda sua inclinação: de uma escada ascendente

<sup>1</sup>Isso é possível, desde que a amplitude  $F$  seja grande o suficiente para que a partícula escape da primeira barreira de potencial em  $V(X = 0)$ .



para uma escada descendente em relação ao sentido positivo do eixo  $X$ . Nesses instantes, o mínimo do potencial assimétrico ainda está presente. Para os instantes de tempo, nos quais a partícula encontra-se presa em torno do mínimo do potencial assimétrico, o movimento é classificado como um estado “oscilante”. Se a partícula salta por cima da barreira do potencial, então, o movimento é classificado como um estado em “movimento”. Portanto, quanto maior o valor da amplitude  $F$ , menor o número de estados “oscilantes”. Voltaremos a falar sobre os estados “oscilantes” e em “movimento”, ainda nesse capítulo, porém, um pouco mais adiante. Agora, na seção que segue, apresentamos os primeiros resultados sobre a corrente de partículas.

## 6.2 Corrente de Partículas

A corrente de partículas ao longo do potencial assimétrico pode ser definida como a média temporal da velocidade média sobre um conjunto de condições iniciais e expressa na forma [29]

$$J = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M v_i , \quad (6.3)$$

sendo a soma feita sobre  $M$  diferentes instantes de tempo  $t_i$ , e  $v_i$  é a velocidade média da partícula sobre 800 condições iniciais diferentes no instante  $t_i$ . Nesta seção, vamos analisar a corrente  $J$  e a mobilidade  $J/F$  [95] como função do número  $N$  de osciladores e da amplitude  $F$  da força externa. Para todos os casos aqui apresentados a frequência da força externa é  $\omega = 0,035$  e a intensidade do acoplamento é  $\gamma_j = 0,1$ . A fim de normalizar o efeito da soma sobre os osciladores, o fator  $1/N$  foi incluído na frente dos somatórios que aparecem na Eq. (3.15), isso foi feito porque o acoplamento efetivo entre sistema e *meio* tende a aumentar quando  $N$  aumenta [86]. Os demais parâmetros são especificados ao longo do texto conforme a necessidade.

A corrente  $J$  desaparece no limite  $F \rightarrow 0$ . Por outro lado, se a intensidade da força externa é muito grande comparada com as forças devido a ação do *meio* e do potencial assimétrico, a partícula seguirá o forçamento externo, e neste caso, a

mobilidade  $J/F$  tende a zero.

A Fig. 6.2 mostra a corrente  $J$  em função de  $N$  para diferentes valores da amplitude da força externa:  $F = 0,05$  ( $\blacksquare, \square$ ),  $F = 0,1$  ( $\blacktriangle, \triangle$ ) e  $F = 0,5$  ( $\bullet, \circ$ ). Os resultados ilustrados pelos símbolos cheios referem-se à distribuição de freqüências de Debye *baixa* e os símbolos vazios representam os resultados referentes à distribuição de freqüências de Debye *alta*.

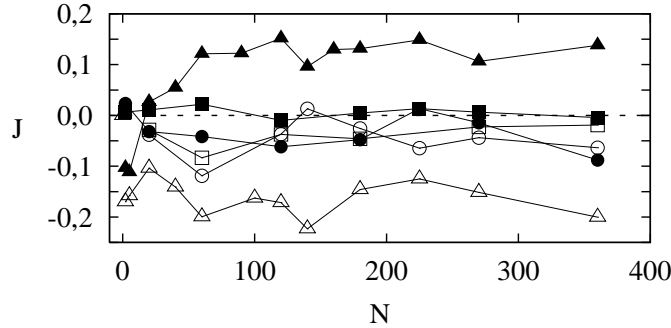


Fig. 6.2: Corrente  $J$  em função do número  $N$  de osciladores para diferentes valores da amplitude  $F$  da força externa:  $F = 0,05$  ( $\blacksquare, \square$ ),  $F = 0,1$  ( $\blacktriangle, \triangle$ ) e  $F = 0,5$  ( $\bullet, \circ$ ). Os símbolos cheios representam os resultados referentes à distribuição de freqüências de Debye *baixa* e os símbolos vazios à distribuição de freqüências de Debye *alta*.

Para todos os valores da amplitude da força externa, apresentados na Fig. 6.2, à medida que  $N \rightarrow 360$  a corrente  $J$  não apresenta grandes mudanças. Porém, para  $F = 0,1$  ( $\blacktriangle$ ) uma interessante situação pode ser observada, que é o surgimento de corrente reversa para valores baixos de  $N$ . Isso pode ser verificado na Fig. 6.3 que mostra apenas a corrente  $J$  para o caso  $F = 0,1$  ( $\blacktriangle$ ). Observe que para os valores de  $N < 20$  a corrente é negativa<sup>2</sup>, mas para  $N > 20$  a corrente torna-se positiva. Esse fenômeno também foi observado em trabalhos [26,96,97] onde as correntes reversas são obtidas das variações de parâmetros como: massa da partícula, coeficiente de viscosidade, temperatura e amplitude da força externa. Podemos também classificar outras duas situações na Fig. 6.2: (i) corrente máxima para  $F = 0,1$  ( $\blacktriangle, \triangle$ ); (ii)

<sup>2</sup>Corrente negativa significa que a partícula movimenta-se em média para a esquerda em relação a origem ( $X = 0$ ) do potencial assimétrico, veja a Fig. 6.1.

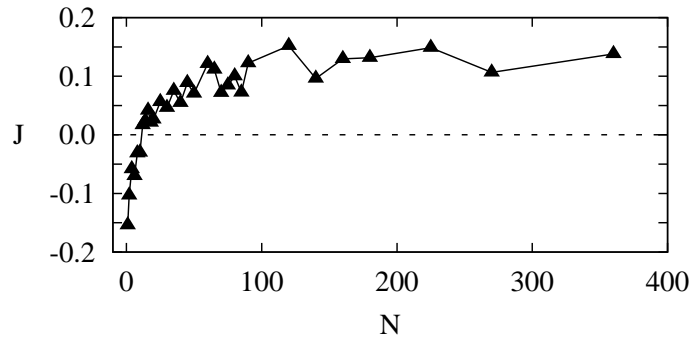


Fig. 6.3: Corrente  $J$  em função do número  $N$  de osciladores para o caso  $F = 0,1$  referente a distribuição de frequências de Debye baixa.

corrente baixa para  $F = 0,05$  ( $\blacksquare$ ,  $\square$ ) e  $F = 0,5$  ( $\bullet$ ,  $\circ$ ). A situação que apresenta corrente máxima em  $F = 0,1$  ( $\blacktriangle$ ,  $\triangle$ ), é observada para os casos referentes às distribuições de frequências de Debye *baixa* ( $\blacktriangle$ ) e Debye *alta* ( $\triangle$ ). Porém, no segundo caso a corrente assume valores negativos para todo  $N$ . Considerando os valores  $F = 0,05$  ( $\blacksquare$ ,  $\square$ ) e  $F = 0,5$  ( $\bullet$ ,  $\circ$ ) observamos que a corrente é baixa para qualquer  $N$ , ou seja, a corrente assume valores mais próximos de zero.

Resumindo nossa análise em relação à Fig. 6.2, podemos constatar que para  $F = 0,05$  ( $\blacksquare$ ,  $\square$ ) a corrente assume valores próximos de zero, para qualquer  $N$ , aumentando até um valor máximo em  $F = 0,1$  e retornando para valores próximos de zero para valores mais altos de  $F$ . Isto fica mais evidente na Fig. 6.4, que mostra a mobilidade  $J/F$  em função da amplitude da força externa para valores intermediários de  $F$  e para diferentes valores de  $N$ .

Na Fig. 6.4 podemos observar que a mobilidade  $J/F$  apresenta um valor máximo em  $F = 0,1$ , independente do valor de  $N$ . Por outro lado, quando  $F$  aumenta, a mobilidade diminui. No ponto onde a corrente é máxima,  $F = 0,1$ , observamos corrente reversa quando mudamos as distribuições de frequências dos osciladores do *meio* de Debye *baixa* ( $\blacktriangle$ ) para Debye *alta* ( $\triangle$ ).

Na próxima seção, os resultados referente ao comportamento difusivo da partícula são apresentados, e também, propriedades desse comportamento são discutidas e relacionadas com a amplitude  $F$  do campo externo e a mobilidade  $J/F$ .

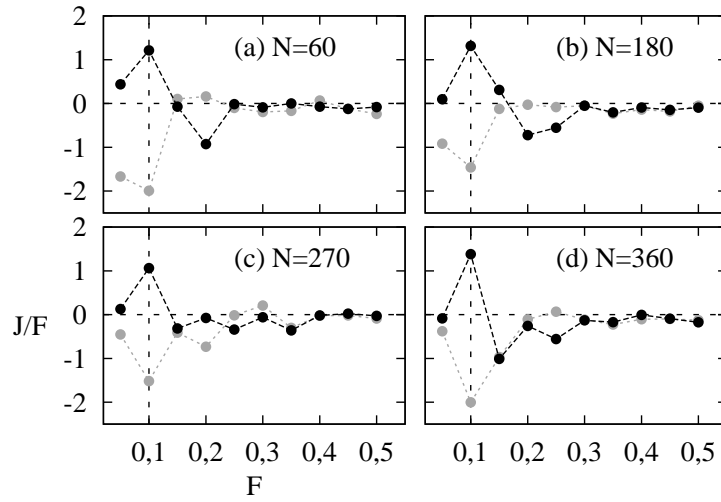


Fig. 6.4: Mobilidade  $J/F$  em função da amplitude  $F$  da força externa e diferentes valores de  $N$ : (a)  $N = 60$  (b)  $N = 180$  (c)  $N = 270$  e (d)  $N = 360$ . Os resultados apresentados referem-se as distribuições de frequências de Debye baixa (●) e Debye alta (●).

### 6.3 Comportamento Difusivo

Nesta seção fazemos uma discussão sobre o comportamento difusivo da partícula. Estes resultados são relacionados com a mobilidade  $J/F$  em função da amplitude  $F$  da força externa e para diferentes valores de  $N$ . Optamos por mostrar aqui apenas os resultados referentes à distribuição de frequências de Debye *baixa*. Fizemos essa escolha porque os resultados obtidos para a distribuição de frequências de Debye *alta* apresentaram o mesmo comportamento qualitativo.

O comportamento difusivo da partícula é medido pelo aumento temporal da variância da posição, cuja dependência no tempo é expressa por

$$\sigma^2(t) = \langle x^2(t) \rangle - \langle x(t) \rangle^2 \propto t^\alpha. \quad (6.4)$$

As médias  $\langle . \rangle$  foram feitas sobre um conjunto de 800 trajetórias referentes a diferentes condições iniciais. O expoente  $\alpha$  é a grandeza que caracteriza o tipo de difusão: para o caso  $\alpha = 1$  a difusão é normal;  $\alpha < 1$  caracteriza sub-difusão; para o caso  $1 < \alpha < 2$  o sistema exibe um comportamento super-difusivo, ou seja, apresenta difusão anômala; e se  $\alpha = 2$  o movimento é balístico. Para os resultados aqui apresentados, o expoente  $\alpha$  foi obtido via ajuste da curva numérica  $\sigma^2$  em função

do tempo. Na Fig. 6.5, como exemplo, é mostrada a dependência temporal de  $\sigma^2$ , para  $N = 360$ , com o respectivo ajuste da curva. Os valores da amplitude  $F$  da

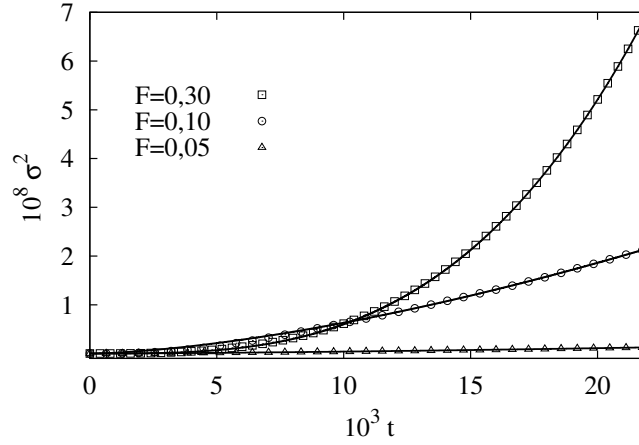


Fig. 6.5: Dependência temporal da variância  $\sigma^2$  para  $N = 360$ , onde  $F = 0,30$  ( $\square$ ),  $F = 0,10$  ( $\circ$ ) e  $F = 0,05$  ( $\triangle$ ). A linha contínua é o ajuste da curva numérica.

força externa e os respectivos expoentes  $\alpha$  são:  $F = 0,05$  e  $\alpha \sim 1,47$ ;  $F = 0,10$  e  $\alpha \sim 1,56$ ;  $F = 0,30$  e  $\alpha \sim 3,12$ .

A Fig. 6.6 (a)-(b) mostra os valores de  $\alpha$  em função de  $F$  para  $N = 60, 360$ . A primeira e importante observação que fazemos é que para valores de  $F < 0,15$ , independente de  $N$ , o valor de  $\alpha$  encontra-se entre 1 e 2, o que caracteriza um movimento super-difusivo. Observe que o valor de  $\alpha$  muda com a amplitude da força externa  $F$ , e para  $F \geq 0,2$  ele fica em torno de  $\alpha \sim 3$ . Esse valor elevado para o expoente  $\alpha$  pode ser atribuído a coexistência de dois estados: “oscilante” e em “movimento” [98].

Os argumentos usados na Ref. [98] mostram que, no instante de tempo  $t$  encontram-se:  $n_o(t)$  partículas no estado “oscilante” e  $n_r(t)$  partículas no estado em “movimento”. O número total de partículas é  $n = n_o(t) + n_r(t)$ . As posições médias das partículas, em cada estado, são expressas por

$$\begin{aligned} \langle x_o(t) \rangle &= \frac{1}{n_o} \sum_{i=1}^{n_o} x_i \sim 0, \\ \langle x_r(t) \rangle &= \frac{1}{n_r} \sum_{i=1}^{n_r} x_i \propto t^\beta. \end{aligned} \tag{6.5}$$

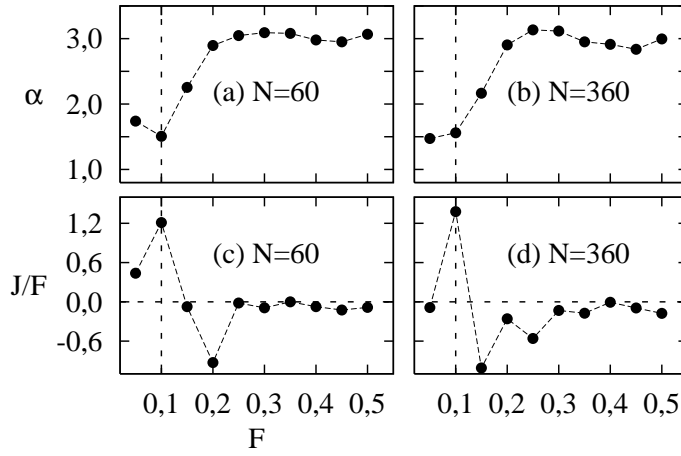


Fig. 6.6: (a)-(b) Expoente  $\alpha$  da variância  $\sigma^2$ , Eq. (6.4), e (c)-(d) mobilidade da corrente como função da amplitude do campo externo  $F$ , respectivamente para os valores de  $N = 60, 360$ .

Conseqüentemente, a posição média total ao quadrado apresenta a seguinte dependência temporal:

$$\langle x(t) \rangle^2 = \left\{ \frac{1}{n} [\langle x_o(t) \rangle n_o + \langle x_r(t) \rangle n_r] \right\}^2 \propto t^{2\beta}, \quad (6.6)$$

sendo  $\beta > 1$ . Portanto, de acordo com a Eq. (6.4), é esperado que a dependência temporal da variância apresente um expoente maior que 2, visto que na Eq. (6.6)  $\beta > 1$ .

Esse mesmo argumento pode ser usado para explicar o expoente  $\alpha \sim 3$  que encontramos em nossos resultados. Porém, em nosso caso, dois estados em “movimento” coexistem; para direita e esquerda, com diferentes valores para a potência  $\beta$ , ou seja,  $\beta_d$  e  $\beta_e$ . Veja, como exemplo, a Fig. 6.7 (a)-(c) que mostra a distribuição estroboscópica<sup>3</sup> de velocidades para as 800 trajetórias e para diferentes valores de  $F$ . Muitos estados “oscilantes”, com velocidades próximas de zero:  $V \sim 0$ , estão presentes para o caso  $F = 0,05$ , os quais são identificados pelos pontos pretos na Fig. 6.7 (a). Estados em “movimento”, para direita ou para esquerda, são obtidos para velocidades positivas e negativas, respectivamente. Enquanto que, para  $F = 0,05$  e  $F = 0,10$  as velocidades dos estados em “movimento” têm um limite superior (positivo) e inferior (negativo),  $V$  aumenta, em função do tempo, indefinidamente para

<sup>3</sup>A velocidade é computada a cada período  $T$  do campo externo.

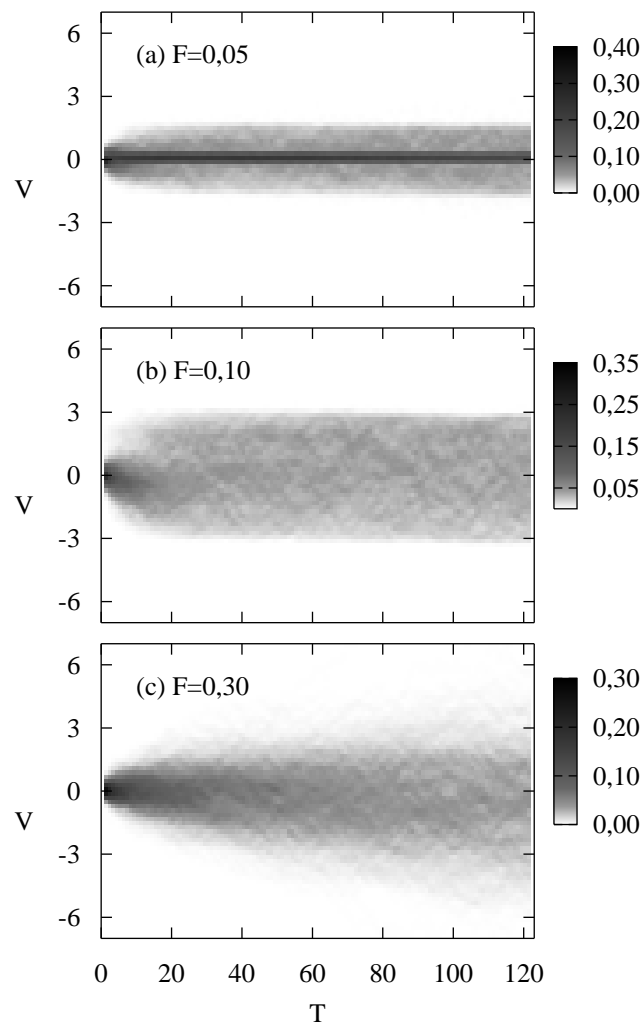


Fig. 6.7: Distribuição estroboscópica das velocidades sobre um conjunto de 800 trajetórias para 122 períodos de oscilação da força externa, com (a)  $F = 0,05$  (b),  $F = 0,10$  e (c)  $F = 0,30$ .

$F = 0,30$ .

Em nosso caso, as médias dos estados em “movimento” (para direita e esquerda) no instante  $t$ , são expressas respectivamente por

$$\begin{aligned} \langle x_d(t) \rangle &\propto t^{\beta_d} , \\ \langle x_e(t) \rangle &\propto -t^{\beta_e} . \end{aligned} \tag{6.7}$$

A posição média total, elevada ao quadrado, é dada por

$$\langle x(t) \rangle^2 \propto t^{2\bar{\beta}} , \tag{6.8}$$

onde assumimos  $\bar{\beta} = (\beta_d + \beta_e)/2$ . Das simulações numéricas obtivemos os seguintes

valores:  $\beta_d \sim 1,54$  e  $\beta_e \sim 1,39$  para  $F = 0,30$ . Então,  $\bar{\beta} = 1,47$ , e de acordo com a equação acima, a potência total igual a 2,94, está bem próxima do valor  $\alpha \sim 3$  referente ao cálculo da variância  $\sigma^2$  apresentado na Fig. 6.6 (a). Essa é uma espécie de decomposição dos estados em “movimento” da direita e da esquerda. Portanto, podemos admitir que a potência  $\alpha$ , da variância  $\sigma^2$ , é duas vezes a média  $\bar{\beta}$ . Entretanto, verificamos que estes resultados são válidos somente para os casos em que  $F \geq 0,20$ , ou seja, quando  $\alpha > 2$ .

Uma outra propriedade interessante que observamos, está relacionada com o cálculo das variâncias separadas, dos estados em “movimento” para direita e esquerda. O valor do expoente  $\alpha$ , da variância total, pode ser obtido tomando separadamente a média dos expoentes das variâncias dos estados em “movimento”, da direita e da esquerda,

$$\begin{aligned}\sigma_d^2(t) &= \langle x_d^2(t) \rangle - \langle x(t) \rangle^2 \propto t^{\alpha_d} , \\ \sigma_e^2(t) &= \langle x_e^2(t) \rangle - \langle x(t) \rangle^2 \propto t^{\alpha_e} .\end{aligned}\tag{6.9}$$

Por exemplo, para  $F = 0,05$  os expoentes da variância da direita e esquerda valem, respectivamente:  $\alpha_d \sim 1,46$  e  $\alpha_e \sim 1,99$ . O valor médio é  $(\alpha_d + \alpha_e)/2 \sim 1,72$  que está de acordo com o valor  $\alpha \sim 1,73$  apresentado na Fig. 6.6 (a), referente a variância total. Essa propriedade também foi observada para os demais valores de  $F$ , incluindo  $F \geq 0,20$ .

A Fig. 6.8 mostra a dependência: (a) da potência  $\alpha$  da variância total e (b) a corrente  $J$  para a amplitude  $F = 0,10$ , onde a mobilidade é máxima, como função do número  $N$  de osciladores. Neste caso o movimento super-difusivo,  $1 < \alpha < 2$  é observado para qualquer valor  $N$ , e o expoente  $\alpha$  converge para o valor  $\sim 1,55$  quando  $N \rightarrow 360$ . Notamos que para  $N \lesssim 90$  aparecem significativas variações no valor de  $\alpha$ , ou seja, significativas variações do expoente que caracteriza o movimento super-difusivo. Essa é uma região onde as partículas ainda vêem o *meio* como um número finito de frequências, em outras palavras, ainda existem “janelas” no espectro de potências onde algumas frequências não estão presentes. À medida que  $N$  aumenta, além de  $N \sim 90$ , o espectro de potências do *meio* aproxima-se cada vez mais de uma



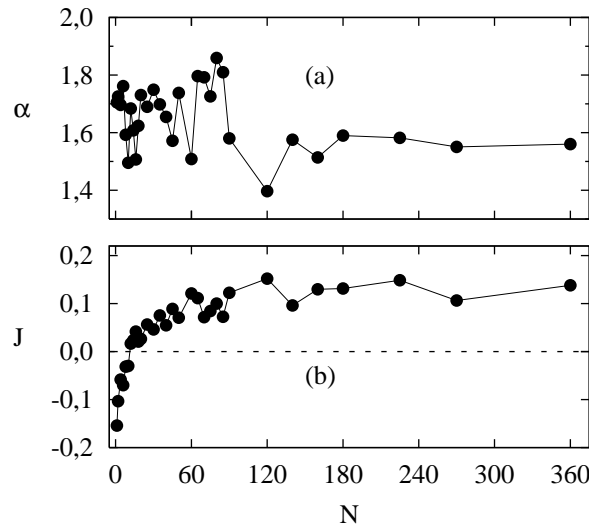


Fig. 6.8: (a) Expoente  $\alpha$  e (b) corrente  $J$  como função de  $N$  para  $F = 0, 10$ .

função suave, e o expoente  $\alpha$  tende a estabilizar em torno de  $\sim 1,55$ .

Na sequência, apresentamos os resultados que mostram a existência dos passeios de Lévy em nosso sistema. Esse fato é relacionado com a mobilidade máxima da corrente.

## 6.4 Passeios de Lévy e Mobilidade Máxima

Agora vamos apresentar um resultado estatístico referente aos deslocamentos da partícula ao longo da estrutura periódica. A Fig. 6.9 é um exemplo de uma trajetória típica da partícula através dos múltiplos poços do potencial. Pode ser observado que apesar das oscilações<sup>4</sup> induzidas pela força externa, a partícula movimenta-se aleatoriamente para direita ou para esquerda, ou seja, em direção ao sentido positivo ou negativo do eixo  $X$ . Dizemos que a partícula desloca-se, ao longo de  $X$ , executando passos para direita ou esquerda.

Com a finalidade de caracterizar cada passo, foi calculado o deslocamento da partícula entre dois períodos consecutivos ( $T_{i-1}$  e  $T_i$ ) e expresso na forma  $\Delta X_i =$

<sup>4</sup>O período de oscilação da força externa é:  $T = 2\pi/\omega$  e  $\omega = 0,035$ .

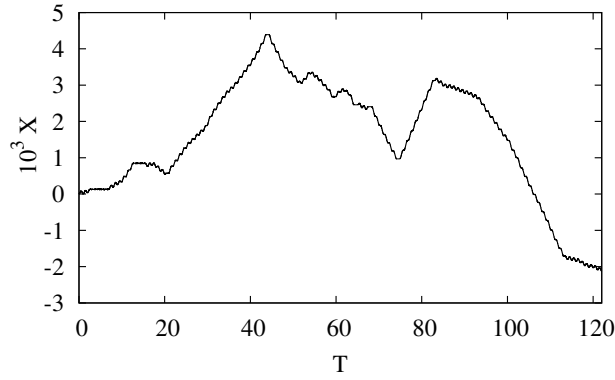


Fig. 6.9: Trajetória típica da partícula em função do período  $T$  do campo externo, para  $F = 0,05$  e  $N = 60$ .

$X_i - X_{i-1}$ . Para tornar a discussão mais simples, veja a Fig. 6.10, que exibe uma ampliação da Fig. 6.9 entre os períodos 65 e 85. Observe que cada período  $T_i$  é identificado por um ponto. A Fig. 6.10 mostra, como exemplo, a representação de um

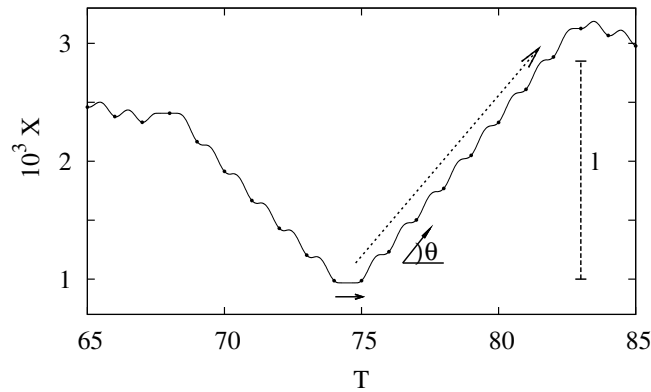


Fig. 6.10: Ampliação da Fig. (6.9), na região entre os períodos 65 e 85, onde a posição da partícula em cada período  $T$  é marcada com um ponto. A velocidade média da partícula entre dois períodos consecutivos é  $\tan \theta$ . A linha vertical (tracejada) indica o tamanho de um vôo ou passo.

deslocamento  $\Delta X_i$  entre os períodos 76 e 77, onde a velocidade média da partícula é dada por  $\tan \theta$ . Definimos que os deslocamentos consecutivos ( $\Delta X_{i-1}$ ,  $\Delta X_i$ ,  $\Delta X_{i+1}$ ) podem ser somados, desde que, sigam uma mesma direção. Porém, respeitando uma tolerância de  $|\Delta \tan \theta| \leq 0,1$ . Isso significa que, quando a partícula movimentou-se para mesma direção, entre dois ou mais períodos consecutivos, com velocidades aproximadamente constantes, temos então um único passo (ou vôo) de comprimento

$l = \sum_i |\Delta X_i|$ . Portanto, o menor comprimento do passo é equivalente a um único deslocamento. Os passos obtidos podem ser pequenos ou grandes. Veja um exemplo na seta pontilhada, que indica os deslocamentos consecutivos que foram somados, e a linha vertical tracejada indica o comprimento total  $l$ , ou seja, o tamanho do vôo. Um exemplo de passo curto é dado pela seta contínua entre os períodos 74 e 75, onde o deslocamento  $\Delta X$  é próximo de zero ( $\theta \sim 0$ ), e não é possível ser visualizado no gráfico.

A existência de longos passos é uma característica dos passeios aleatórios anômalos ou passeios de Lévy [69, 70]. Outros exemplos de passos estão ilustrados na Fig. 6.11 (a) (veja as setas), onde é mostrado um exemplo com três trajetórias referentes a três condições iniciais diferentes.

Com o objetivo de quantificar os passeios de Lévy, foi calculado a distribuição de probabilidade  $P(l) \sim l^{-\mu}$ . Sistemas que apresentam passeios de Lévy são caracterizados pelo decaimento da probabilidade  $P(l)$  cujo expoente é  $\mu < 3$  [69, 70, 99]. Para os casos em que  $\mu > 3$ , o sistema é caracterizado como passeio aleatório normal (movimento Browniano). Uma outra característica dos passeios de Lévy é o fato de apresentarem um segundo momento  $\langle l^2 \rangle = \infty$ .

Chamamos atenção para o fato de utilizarmos o termo passeio de Lévy, em vez de vôos de Lévy. Isto é consequência do fato que, em nosso caso os vôos (ou passos) ocorrem a velocidades constantes e não instantaneamente [69]. Para os resultados aqui apresentados, os passos  $l$  foram calculados sobre 122 períodos, isso para um conjunto de 800 trajetórias, num total de 97600 períodos  $T$ . Esses cálculos foram realizados para diferentes valores de  $N$ , como também, para diferentes valores de  $F$ .

A Fig. 6.11(b) mostra o gráfico, em escala logarítmica, da distribuição de probabilidade  $P(l)$  para  $F = 0,05$  e  $N = 60$ . A curva ajustada é identificada pela linha tracejada, com o valor  $\mu \sim 2,60$ . Observe que esse expoente é característico de sistemas que apresentam passeios de Lévy. As Figs. 6.11(c)-(d) referem-se aos valores  $F = 0,10$  e  $F = 0,30$ , respectivamente, com os expoentes  $\mu \sim 2,82$  (passeio

de Lévy) e  $\mu \sim 3,44$  (difusão normal [69]). Embora não apresentamos aqui todos os resultados obtidos para diferentes  $F$  e  $N$ , nosso estudo mostrou que para  $F \geq 0,20$ , independentemente do valor de  $N$ , temos  $\mu > 3$ .

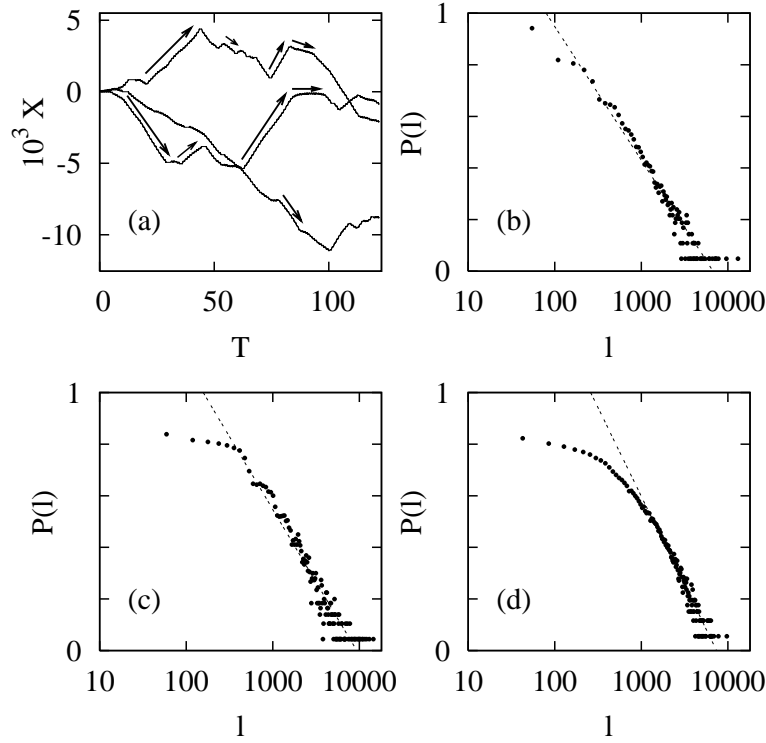


Fig. 6.11: (a) Três trajetórias típicas em função do período  $T$  do campo externo, para diferentes condições iniciais. As setas indicam alguns exemplos de passos. (b)-(d) mostra a distribuição de probabilidades  $P(l)$ , em escala logarítmica, para  $N = 60$ , e respectivamente, para  $F = 0,05$ ,  $0,10$  e  $0,30$ . A linha tracejada é o ajuste de  $P(l)$  para longos  $l$ .

Quando comparamos estes resultados com os resultados referente a mobilidade  $J/F$  (Fig. 6.6), podemos perceber que a mobilidade da corrente é máxima ( $F = 0,10$ ) na região próxima dos valores de  $F$  para os quais os passeios de Lévy deixam de existir. Em outras palavras, a mobilidade da corrente é máxima quando os longos passeios de Lévy tornam-se menos freqüentes, ou seja, quando  $\mu \rightarrow 3$ . Isso pode parecer um tanto contraditório se pensarmos que, quanto mais freqüentes forem os longos passeios ( $\mu \rightarrow 2$ ), maior a contribuição para transporte. No entanto, vamos mostrar que a resposta para essa aparente contradição está relacionada com o direcionamento temporal dos passeios de Lévy. Para isso vamos retomar a dis-

cussão a respeito da Fig. 6.10, sobre a caracterização dos passos de comprimento  $l$ . Lembramos que a cada passo  $l$  está associado um ângulo  $\theta$  em relação ao eixo temporal  $T$  (veja um exemplo na Fig. 6.10). Considerando a possibilidade da partícula movimentar-se em direções opostas (direita ou esquerda), esse ângulo  $\theta$  pode assumir um valor no intervalo  $-\pi/2 < \theta < \pi/2$ . Definindo a diferença entre os ângulos de dois passos subseqüentes:  $\Delta\theta_i = \theta_i - \theta_{i-1}$ , sendo  $i = 1, 2, \dots, n_p$ , e  $n_p$  o número total de passos. Por conseguinte, essa diferença nos fornece uma idéia sobre a mudança de direção entre passos subseqüentes. Considerando que a diferença  $\Delta\theta_i$  pode variar entre  $-\pi$  e  $\pi$ , isso indica que a partícula pode executar passos consecutivos aproximadamente numa mesma direção  $\Delta\theta_i \sim 0$ , ou em direções opostas  $\Delta\theta_i \sim \pm\pi$ .

A distribuição da diferença dos ângulos  $P(\Delta\theta_i)$  é exibida na Fig. 6.12 para o caso  $N = 60$ . Podemos observar que existe uma concentração maior dos  $\Delta\theta_i$  em torno de zero e  $\pm\pi$ . No entanto, para o caso  $F = 0,05$  (Fig. 6.12 (a)) a distribuição é mais larga em torno de  $\Delta\theta_i \sim 0$  quando comparada com o caso  $F = 0,10$  (Fig. 6.12 (b)), o qual apresenta uma distribuição bem estreita em torno de zero. Isso mostra que para  $F = 0,10$  os passos são mais direcionados, ou seja, a probabilidade da partícula movimentar-se numa mesma direção é maior. Adicionalmente, para  $F = 0,05$  a probabilidade de encontrar  $\Delta\theta_i \sim \pm\pi$  indica a existência de inversão da direção entre passos consecutivos. Embora para  $F = 0,05$  os passos longos, ou passeios de Lévy, sejam mais freqüentes ( $\mu = 2,60$ ), por outro lado, a direção tomada entre passos consecutivos assume valores mais variados. No entanto, para o caso  $F = 0,10$  a situação é diferente, embora, os longos passos não sejam tão freqüentes ( $\mu = 2,82$ ), quando comparados com o caso  $F = 0,05$  ( $\mu = 2,60$ ), eles são mais direcionados em torno de  $\Delta\theta \sim 0$ . Isso explica o fato da mobilidade da corrente ser máxima exatamente na fronteira entre o comportamento super-difusivo para o comportamento que apresenta difusão normal, ou seja, quando  $\mu \rightarrow 3$ .

O resultado que acabamos de apresentar é muito interessante pois mostra uma relação direta entre a otimização dos passeios de Lévy com a mobilidade máxima da corrente em estruturas periódicas. Chamamos a atenção, que em nosso

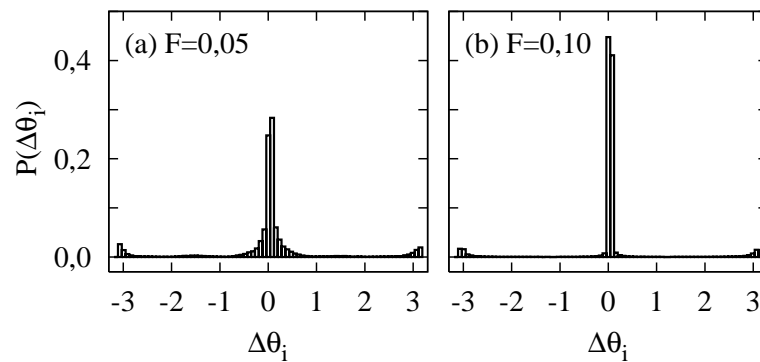


Fig. 6.12: Distribuição  $P(\Delta\theta_i)$  da diferença entre os ângulos dos subsequentes passeios de Lévy para  $N = 60$ , sendo (a)  $F = 0,05$  e (b)  $F = 0,10$ .

sistema a corrente líquida não é somente atribuída aos passeios de Lévy, mas é uma consequência do efeito combinado da amplitude da força externa, da assimetria do potencial periódico, dos passeios de Lévy e do *meio* modulado.

Passeios de Lévy também desempenham um importante papel na otimização de processos de busca aleatória [100,101], na maneira que certos animais usam para locomover-se [102], e também no modo em que seres humanos usam para movimentar-se em escalas geográficas [103].

# 7

## Conclusões

Apresentamos neste trabalho o estudo da dinâmica de transferência de energia, dissipação e transporte de partículas em *meios* modulados. Diferente das abordagens usuais que tratam de sistemas acoplados a um banho térmico que normalmente é representado por infinitos graus de liberdade, propomos aqui a descrição de um *meio* finito, onde o espectro de frequências apresenta muitas estruturas devido a ausência de frequências dentro do intervalo de interesse. Este espectro estruturado caracteriza o que chamamos de *meio* modulado.

Consideramos o sistema de interesse descrito por uma partícula sujeita a um potencial periódico e assimétrico (*catraca*), que é acoplado linearmente com um número  $N$  finito de osciladores harmônicos que representam o *meio* modulado. Fazendo a integração numérica das  $2N + 2$  equações de movimento do sistema global, obtivemos os resultados necessários para analisar o processo de transferência de energia, dissipação e o transporte da partícula, quando aumentamos um a um o número de osciladores que compõe o *meio*. Com base nos resultados que foram discutidos nos capítulos quatro, cinco e seis, na sequência apresentamos uma conclusão geral dos principais resultados.

## Capítulo quatro:

O estudo da dinâmica da transferência de energia entre o sistema de interesse e os osciladores do *meio*, para uma única trajetória, mostrou que a primeira manifestação de dissipação de energia da partícula do sistema ocorre para um *meio* com  $N \sim 15$  osciladores. Para valores menores de  $N$ , sistema e *meio* trocam energia continuamente com uma frequência alta de troca  $\omega_{alta}$  que é modulada por uma frequência menor de troca  $\omega_{menor}$  (quando  $N > 1$ ). Essas modulações são relacionadas com o movimento da partícula no espaço de fases. A partícula usa energia do *meio* para mover-se de uma região mais interna no espaço de fases, para uma região mais externa (região mais afastada da origem). Quando a partícula cede energia para o *meio* ela retorna novamente para a região mais próxima da origem. Esse contínuo movimento no espaço de fases ocorre com uma frequência  $\omega_{menor}$ .

Quando poucos osciladores compõe o *meio*, a energia inicial sempre retorna para o sistema. Porém, quando o número de osciladores aumenta ( $N \gtrsim 20$ ), os efeitos de dissipação tornam-se aparentes e uma parcela da energia do sistema é transferida para os osciladores. Uma situação interessante também foi observada para poucos osciladores ( $1 \leq N \lesssim 27$ ), quando a partícula tem energia inicial suficiente para saltar sobre a barreira de potencial do poço. Devido às trocas de energia com o *meio*, a partícula cede energia e conseqüentemente “cai” num outro poço de potencial próximo, permanecendo lá por algum tempo. Nesse período de tempo o *meio* tem armazenado energia num tipo de “estado excitado”, que depois é novamente transferida para a partícula, fazendo com que ela seja transferida para um outro poço do potencial. Esse efeito, do *meio* ser capaz de induzir a transferência da partícula, desaparece quando o número de osciladores aumenta ( $N \gtrsim 27$ ).

Para um conjunto de 800 trajetórias referentes a diferentes condições iniciais, mostramos que a energia média do sistema decai no tempo obedecendo uma lei de potência:  $\langle E_S \rangle \propto t^{-\nu}$ . Este resultado foi verificado para as distribuições: Debye *alta*, *baixa* e Gaussiana. Para o caso das distribuições de Debye *alta* e Gaussiana, o expoente  $\nu$  é pequeno e aumenta lentamente quando  $N$  aumenta. Para a distribuição



de Debye *baixa*, a qual inclui frequências  $\omega_j \leq \omega_0$ , a taxa de dissipação ( $\nu$ ) aumenta de forma mais significativa com  $N$ , atingindo um valor máximo em  $N = 140$ . Isso foi observado somente para a distribuição de Debye *baixa* e possivelmente devido as frequências  $\omega_j \leq \omega_0$ . Chamamos atenção que se outro gerador de frequências for usado, os valores de  $\nu$  e os correspondentes valores de  $N$ , podem diferir dos valores que apresentamos neste trabalho.

## Capítulo cinco:

Fazendo uma análise não linear das séries temporais da coordenada  $X(t)$  da partícula do sistema de interesse, para uma única trajetória, estudamos seu comportamento não linear dentro do poço de potencial assimétrico quando os efeitos da dissipação começam a surgir. O sistema global (sistema de interesse + *meio*) é conservativo mas, devido as trocas de energia entre o sistema e os osciladores do *meio*, o sistema sozinho apresenta um comportamento dissipativo.

A transição de uma dinâmica conservativa-dissipativa é obtida quando aumentamos um a um o número  $N$  de osciladores que compõe o *meio*. Para determinar o valor de  $N$  onde os efeitos da dissipação começam aparecer, primeiro analisamos a evolução temporal da energia média do sistema, que foi calculada sobre 800 realizações das condições iniciais do *meio*. Com isso, mostramos que o sistema começa apresentar um comportamento dissipativo para  $N$  no intervalo entre 10 e 20. Para valores menores de  $N$ , o sistema e *meio* trocam continuamente energia e a média temporal da energia da partícula permanece constante. A medida que  $N$  aumenta o instante de tempo para o qual a energia começa ser transferida para o *meio* diminui. A energia transferida para o *meio* não retorna mais para o sistema durante todo o tempo de integração.

Os resultados da análise não linear das séries temporais mostraram que a dinâmica da partícula do sistema começa apresentar um comportamento caótico para  $13 \lesssim N \lesssim 20$  que é exatamente o intervalo de  $N$  onde os efeitos de dissipação surgem. O espectro de potências confirmou estes resultados. Para valores maiores de

$N$ , a energia média final da partícula decresce, os expoentes de Lyapunov também decrescem, e o movimento da partícula tende ser regular novamente. Esse resultado também foi confirmado com o espectro de potências para  $N = 4000$ . Neste limite os expoentes de Lyapunov assumem valores próximos de zero, a energia da partícula é muito pequena e, portanto, fica oscilando dentro do poço de potencial com frequência  $\omega \sim \omega_0 = 1,0$ , que é a frequência do movimento linear da partícula em torno do mínimo do potencial.

As evidências numéricas mostram a conexão entre a variação temporal da amplitude de oscilação da energia da partícula, o decaimento da energia, e a diminuição dos expoentes de Lyapunov. Acreditamos que esta é uma consequência direta da relação entre a taxa de contração no espaço de fases e a soma dos expoentes de Lyapunov da partícula [91]. Essa relação foi também observada recentemente na equação complexa de Ginzburg-Landau [104]. É interessante mencionar que, apesar da dinâmica do sistema de interesse começar apresentar dissipação para valores de  $N$  no intervalo entre 10 e 20, a soma de todos os expoentes de Lyapunov é próxima de zero. Em outras palavras, embora a partícula do sistema apresente comportamento dissipativo, a análise não linear aparentemente “reconhece” que as séries temporais pertencem a uma dinâmica que em sua totalidade é conservativa (sistema de interesse + *meio*). Podemos então dizer que os expoentes de Lyapunov contêm informação da dinâmica do sistema global, e não é possível separar a contribuição dos expoentes de Lyapunov relacionados ao sistema dos expoentes de Lyapunov relacionados ao *meio*, fazendo uma análise apenas da série temporal da partícula do sistema.

Lembramos que os valores de  $N$  para os quais a dissipação e o movimento caótico surgem, são válidos para o gerador de frequências específico usado em nossas simulações. Esses valores podem mudar um pouco se outro gerador for usado, entretanto todas as quantidades físicas analisadas, quando a dissipação surge, devem ser as mesmas.

## Capítulo seis:

Os resultados referente ao transporte de partículas através dos múltiplos poços do potencial assimétrico foram obtidos quando sujeitamos a partícula do sistema de interesse a um campo externo periódico com média temporal nula. A corrente ao longo da estrutura periódica foi estudada como função do número  $N$  de osciladores do *meio* e para diferentes valores da amplitude do campo externo  $F$ .

Mostramos que uma situação de máxima mobilidade é obtida para  $F = 0, 10$ , para as duas distribuições de frequências dos osciladores do *meio*: distribuição de Debye *alta* e *baixa*, porém, com sinais contrários, ou seja, mobilidade negativa para distribuição de Debye *alta* e mobilidade positiva para distribuição de Debye *baixa*. Ainda para  $F = 0, 10$  com distribuição de Debye *baixa*, observamos que quando  $N < 20$ , a corrente é negativa (corrente reversa), e a medida que  $N$  aumenta, a corrente muda de sinal e fica positiva. Esse efeito de corrente reversa foi também observado em outros trabalhos com *catracas* [26,96,97]. Nestes trabalhos entretanto, parâmetros como massa da partícula, coeficiente de dissipação e amplitude da força externa foram variados.

O processo difusivo foi caracterizado da seguinte maneira: para valores da amplitude da força externa  $0, 05 \leq F < 0, 15$ , independente do valor de  $N$ , a partícula apresenta um comportamento anômalo exibindo super-difusão. Neste caso o expoente  $\alpha$  da variância ( $\sigma^2 \propto t^\alpha$ ) assume valores característicos de movimento super-difusivo  $1 < \alpha < 2$ . Neste regime, e para os valores  $N \lesssim 90$ , o expoente  $\alpha$  apresenta significativas variações em função de  $N$ , e tende a estabilizar em torno de  $\alpha \sim 1, 55$  para  $N \gtrsim 90$ . Para os valores de  $F \geq 0, 20$ , a partícula apresenta um movimento acelerado com  $\alpha \sim 3$ , independente do valor de  $N$ . Mostramos que esse valor alto para o expoente  $\alpha$  é atribuído a coexistência dos estados: “oscilantes” e em “movimento”, como também já foi observado em outro trabalho [98].

Verificamos também a existência dos passeios de Lévy [68–70] ao longo da estrutura periódica, os quais são caracterizados pelo expoente  $2 < \mu < 3$  na distribuição de probabilidade para o tamanho  $l$  dos passos:  $P(l) \sim l^{-\mu}$ . Foi mostrado

que o regime de máxima mobilidade da corrente ocorre exatamente no limite onde os passeios de Lévy deixam de existir, ou seja, quando os passeios de Lévy tornam-se menos frequentes  $\mu \rightarrow 3$ . Esse resultado é muito interessante porque mostra a relação direta entre a otimização dos passeios de Lévy com a máxima mobilidade das partículas em estruturas periódicas. É importante mencionar que no nosso caso a corrente líquida não é atribuída somente aos passeios de Lévy, mas é uma consequência do efeito combinado da amplitude da força externa, da assimetria do potencial periódico, dos passeios de Lévy e do *meio* modulado. Na literatura encontramos vários trabalhos que mostram a importância dos passeios de Lévy em diferentes processos dinâmicos [100–103].

### Trabalhos Futuros

Em relação aos resultados apresentados no capítulo seis que relacionam a corrente máxima com a otimização dos passeios de Lévy, um trabalho que pode ser feito é verificar se os passeios de Lévy estão presentes em outros modelos que tratam do transporte de partículas em estruturas periódicas, como por exemplo, a *catraca* Browniana modelada pela equação de Langevin [26], levando em conta o termo de inércia, a fim de verificar se os passeios de Lévy são responsáveis pela otimização da corrente nesse sistema. Um trabalho bastante interessante, que já foi iniciado, é tentar controlar a corrente de partículas através de modulações do campo externo, usando a técnica de controle inverso que foi recentemente proposta por J. Kuhn e M. G. E. da Luz [105]. Outra possibilidade de trabalho seria fazer um estudo da dinâmica da partícula associando diferentes comportamentos periódicos quando o número  $N$  de osciladores aumenta. Acreditamos que seja possível identificar órbitas com períodos diferentes para valores baixos de  $N$ , e a partir de um certo valor de  $N$  observaríamos o comportamento caótico.

# Apêndice A

## Derivação Explícita da Equação de Langevin Generalizada

Neste apêndice apresentamos uma completa derivação da equação de Langevin generalizada (Eq. (2.17)), tomamos como ponto de partida a Hamiltoniana clássica de um sistema de interesse acoplado com um *meio* constituído por  $N$  osciladores harmônicos independentes. Considerando o caso unidimensional a Hamiltoniana total é expressa por [19]

$$H = H_S(X, P) + H_M(\vec{x}, \vec{p}) + H_I(X, \vec{x}), \quad (\text{A.1})$$

sendo

$$H_S(X, P) = \frac{P^2}{2M} + V(X), \quad (\text{A.2})$$

a Hamiltoniana do sistema de interesse, onde  $X$  e  $P$  representam respectivamente, a coordenada e o momento do sistema. A Hamiltoniana do *meio* é expressa por

$$H_M(\vec{x}, \vec{p}) = \sum_{j=1}^N \left( \frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{m_j \omega_j^2}{2} x_j^2 \right), \quad (\text{A.3})$$

os  $x_j$  e  $p_j$  representam a coordenada e momento do  $j$ -ésimo oscilador de frequência  $\omega_j$  e massa  $m_j$  que constitui o *meio*. A interação entre sistema e *meio* é expressa através da Hamiltoniana

$$H_I(X, \vec{x}) = -X\Gamma(\vec{x}), \quad (\text{A.4})$$

onde  $\vec{x}$  representa as coordenadas dos osciladores  $\{x_j\}$ . O acoplamento entre o sistema de interesse e o *meio* é linear na coordenada do sistema e de forma mais geral nas coordenadas do *meio* via uma função analítica  $\Gamma(\vec{x})$ . A Hamiltoniana total Eq. (A.1) é expressa por

$$H = \frac{P^2}{2M} + V(X) + \sum_{j=1}^N \left( \frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{m_j \omega_j^2}{2} x_j^2 \right) - X\Gamma(\vec{x}). \quad (\text{A.5})$$

As equações de Hamilton [106] para o movimento nas variáveis do sistema são

$$\dot{X} = \frac{\partial H}{\partial P} = \frac{\partial H_S}{\partial P} = \frac{P}{M}, \quad (\text{A.6})$$

$$\dot{P} = -\frac{\partial H}{\partial X} = -\frac{\partial V(X)}{\partial X} + \Gamma(\vec{x}). \quad (\text{A.7})$$

E as equações do  $j$ -ésimo oscilador harmônico do *meio* são

$$\dot{x}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j} = \frac{\partial H_M}{\partial p_j} = \frac{p_j}{m_j}, \quad (\text{A.8})$$

$$\dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial x_j} = -m_j \omega_j^2 x_j + X\Gamma_j(\vec{x}), \quad (\text{A.9})$$

sendo

$$\Gamma_j(\vec{x}) \equiv \frac{\partial \Gamma(\vec{x})}{\partial x_j}. \quad (\text{A.10})$$

Com o objetivo de eliminar as coordenadas dos osciladores na Eq. (A.7), primeiramente resolveremos as Eqs. (A.8)-(A.9). Considerando  $p_j = m_j \dot{x}_j$ , reescrevemos as Eqs. (A.8)-(A.9) como

$$m_j \ddot{x}_j = -m_j \omega_j^2 x_j + X\Gamma_j(\vec{x}). \quad (\text{A.11})$$

Para encontrar a solução da equação não-homogênea Eq. (A.11) utilizaremos o método da variação de parâmetros [75]. A equação homogênea correspondente a Eq. (A.11) é expressa por

$$\ddot{x}_j + \omega_j^2 x_j = 0, \quad (\text{A.12})$$

cujas solução geral é

$$x_j(t) = c_1 \cos(\omega_j t) + c_2 \sin(\omega_j t). \quad (\text{A.13})$$

Para obter a solução da Eq. (A.11) devemos substituir as constantes  $c_1$  e  $c_2$  da Eq. (A.13) por funções  $u_1(t)$  e  $u_2(t)$ , respectivamente, e depois determinar estas funções de modo que a expressão resultante

$$x_j = u_1(t) \cos(\omega_j t) + u_2(t) \sin(\omega_j t), \quad (\text{A.14})$$

seja uma solução da equação não-homogênea Eq. (A.11). Para determinar  $u_1(t)$  e  $u_2(t)$ , precisamos substituir o  $x_j$  da Eq. (A.11) pelo  $x_j$  da Eq. (A.14). Para isso procedemos da seguinte forma:

Primeiro derivamos a Eq. (A.14) para obter

$$\dot{x}_j = \dot{u}_1(t) \cos(\omega_j t) - u_1(t) \omega_j \sin(\omega_j t) + \dot{u}_2(t) \sin(\omega_j t) + u_2(t) \omega_j \cos(\omega_j t). \quad (\text{A.15})$$

Impondo que a soma das parcelas que envolvem  $\dot{u}_1(t)$  e  $\dot{u}_2(t)$  na Eq. (A.15) seja nula [75]

$$\dot{u}_1(t) \cos(\omega_j t) + \dot{u}_2(t) \sin(\omega_j t) = 0, \quad (\text{A.16})$$

ficamos com

$$\dot{x}_j = -u_1(t) \omega_j \sin(\omega_j t) + u_2(t) \omega_j \cos(\omega_j t). \quad (\text{A.17})$$

Derivando novamente, obtemos

$$\ddot{x}_j = -\dot{u}_1(t) \omega_j \sin(\omega_j t) - u_1(t) \omega_j^2 \cos(\omega_j t) + \dot{u}_2(t) \omega_j \cos(\omega_j t) - u_2(t) \omega_j^2 \sin(\omega_j t). \quad (\text{A.18})$$

Agora substituímos as Eqs. (A.14) e (A.18) na Eq. (A.11). Após agruparmos os termos, obtemos

$$-\dot{u}_1(t) m_j \omega_j \sin(\omega_j t) + \dot{u}_2(t) m_j \omega_j \cos(\omega_j t) = X \Gamma_j(\vec{x}). \quad (\text{A.19})$$

Considerando as equações Eq. (A.16) e Eq. (A.19), temos assim um sistema de equações que podemos resolver para encontrar as expressões para  $\dot{u}_1(t)$  e  $\dot{u}_2(t)$ . Da Eq. (A.16) temos

$$\dot{u}_1(t) = -\frac{\dot{u}_2(t) \sin(\omega_j t)}{\cos(\omega_j t)}. \quad (\text{A.20})$$

Substituindo a Eq. (A.20) na Eq. (A.19), encontramos

$$\dot{u}_2(t) = \frac{\cos(\omega_j t)}{m_j \omega_j} X \Gamma_j(\vec{x}). \quad (\text{A.21})$$

Agora substituindo a Eq. (A.21) na Eq. (A.16), obtemos

$$\dot{u}_1(t) = -\frac{\sin(\omega_j t)}{m_j \omega_j} X \Gamma_j(\vec{x}). \quad (\text{A.22})$$

Fazendo a integração das equações Eq. (A.21) e Eq. (A.22) em  $d\tau$ , com o intuito de encontrar  $u_1(t)$  e  $u_2(t)$ , temos

$$u_1(t) = -\int_0^t d\tau \frac{\sin(\omega_j \tau)}{m_j \omega_j} X(\tau) \Gamma_j[\vec{x}(\tau)] + x_j(0), \quad (\text{A.23})$$

$$u_2(t) = \int_0^t d\tau \frac{\cos(\omega_j \tau)}{m_j \omega_j} X(\tau) \Gamma_j[\vec{x}(\tau)] + \frac{p_j(0)}{m_j \omega_j}, \quad (\text{A.24})$$

onde  $x_j(0) = u_1(0)$  e  $p_j(0)/m_j \omega_j = u_2(0)$  foram encontrados aplicando as condições de contorno  $x_j(0)$  e  $\dot{x}_j(0)$  na Eq. (A.14) e Eq. (A.17).

Substituindo as Eqs. (A.23)-(A.24) na Eq. (A.14) e agrupando os termos, encontramos a solução geral para a equação diferencial não-homogênea Eq. (A.11),

$$x_j(t) = x_j(0) \cos(\omega_j t) + \frac{p_j(0)}{m_j \omega_j} \sin(\omega_j t) + \int_0^t d\tau \frac{\sin[\omega_j(t - \tau)]}{m_j \omega_j} X(\tau) \Gamma_j[\vec{q}(\tau)]. \quad (\text{A.25})$$

Uma interpretação subsequente dos resultados requer que integremos a Eq. (A.25) por partes para obter

$$\begin{aligned} x_j(t) = & x_j(0) \cos(\omega_j t) + \frac{p_j(0)}{m_j \omega_j} \sin(\omega_j t) + D_j(\vec{x}; t, t) X(t) \\ & - D_j(\vec{x}; t, 0) X(0) - \int_0^t d\tau D_j(\vec{x}; t, \tau) \dot{X}(\tau), \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

sendo

$$D_j(\vec{x}; t, \tau) \equiv \int_\tau^t d\tau' \frac{\sin[\omega_j(t - \tau')]}{m_j \omega_j} \Gamma_j[\vec{x}(\tau')]. \quad (\text{A.27})$$

A dependência de  $D_j$  e  $\Gamma_j$  em  $\vec{x}$  serve para lembrar que a Eq. (A.25) e Eq. (A.26) são em geral equações integrais relacionando  $\vec{x}(t)$  com sua história anterior. Para utilizar esses resultados formalmente devemos transformar as expressões implícitas em expressões explícitas. Com esse propósito, podemos considerar uma



interação bilinear entre sistema e *meio*, de modo que  $\Gamma_j$  seja independente de  $\vec{x}$  e a Eq. (A.26) torna-se uma solução explícita.

Para um acoplamento bilinear entre sistema e *meio*, temos

$$\Gamma(\vec{x}) = \sum_{j=1}^N \Gamma_j x_j, \quad (\text{A.28})$$

sendo  $\Gamma_j$  uma constante. Logo,

$$\Gamma_j(\vec{x}) = \frac{\partial \Gamma(\vec{x})}{\partial x_j} = \Gamma_j.$$

Deste modo a Eq. (A.27) fica (escolhendo o limite inferior apropriadamente)

$$D_j(t - \tau) = \frac{\Gamma_j}{m_j \omega_j^2} \cos[\omega_j(t - \tau)]. \quad (\text{A.29})$$

Neste caso a Eq. (A.26) torna-se

$$\begin{aligned} x_j(t) = & \frac{\Gamma_j}{m_j \omega_j^2} X(t) + \left[ x_j(0) - \frac{\Gamma_j}{m_j \omega_j^2} X(0) \right] \cos(\omega_j t) + \frac{p_j(0)}{m_j \omega_j} \sin(\omega_j t) \\ & - \frac{\Gamma_j}{m_j \omega_j^2} \int_0^t d\tau \cos[\omega_j(t - \tau)] \dot{X}(\tau). \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

Aplicando essa solução explícita na Eq. (A.28) ficamos com

$$\begin{aligned} \Gamma(\vec{x}) = & \sum_{j=1}^N \Gamma_j \left\{ \frac{\Gamma_j}{m_j \omega_j^2} X(t) + \left[ x_j(0) - \frac{\Gamma_j}{m_j \omega_j^2} X(0) \right] \cos(\omega_j t) + \frac{p_j(0)}{m_j \omega_j} \sin(\omega_j t) \right. \\ & \left. - \frac{\Gamma_j}{m_j \omega_j^2} \int_0^t d\tau \cos[\omega_j(t - \tau)] \dot{X}(\tau) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

Substituindo a Eq. (A.31) na Eq. (A.7), obtemos a equação de movimento do sistema

$$\begin{aligned} M \ddot{X}(t) = & - \left[ \frac{\partial V(X)}{\partial X} - \sum_{j=1}^N \frac{\Gamma_j^2}{m_j \omega_j^2} X(t) \right] - \sum_{j=1}^N \frac{\Gamma_j^2}{m_j \omega_j^2} \int_0^t d\tau \cos[\omega_j(t - \tau)] \dot{X}(\tau) \\ & + \sum_{j=1}^N \left\{ \left[ \Gamma_j x_j(0) - \frac{\Gamma_j^2}{m_j \omega_j^2} X(0) \right] \cos(\omega_j t) + \Gamma_j \frac{p_j(0)}{m_j \omega_j} \sin(\omega_j t) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

Podemos perceber na Eq. (A.32) que o efeito do acoplamento do sistema  $H_S$  com os osciladores do *meio*  $H_M$  causa três efeitos: (i) uma correção harmônica no potencial  $V(X)$ , (ii) um termo de convolução com a velocidade  $\dot{X}(t)$ , e (iii) uma força

dependente do tempo, das condições iniciais dos osciladores  $(x_j(0), p_j(0))$  e da coordenada inicial do sistema  $X(0)$ . Se reescrevermos a Hamiltoniana total Eq. (A.5), considerando um acoplamento bilinear entre o sistema de interesse e o *meio* [11,18], como

$$H = \frac{P^2}{2M} + V(X) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \left[ \frac{p_j^2}{m_j} + m_j \omega_j^2 \left( x_j - \frac{\Gamma_j}{m_j \omega_j^2} X \right)^2 \right], \quad (\text{A.33})$$

podemos cancelar o termo de correção harmônica no potencial  $V(X)$ , mantendo os demais termos inalterados. Desse modo, a solução para a equação de movimento do sistema Eq. (A.32) é reescrita como

$$M \ddot{X}(t) + V'(X) = - \int_0^t d\tau \, \gamma(t - \tau) \dot{X}(\tau) + f(t), \quad (\text{A.34})$$

onde a memória dissipativa é representada por

$$\gamma(t - \tau) = \sum_{j=1}^N \frac{\Gamma_j^2}{m_j \omega_j^2} \cos[\omega_j(t - \tau)], \quad (\text{A.35})$$

e a força flutuante dada por

$$f(t) = \sum_{j=1}^N \left\{ \left[ \Gamma_j x_j(0) - \frac{\Gamma_j^2}{m_j \omega_j^2} X(0) \right] \cos(\omega_j t) + \Gamma_j \frac{p_j(0)}{m_j \omega_j} \sin(\omega_j t) \right\}. \quad (\text{A.36})$$

A equação integro-diferencial (A.34) é chamada de equação de Langevin generalizada.

## Apêndice B

### Valor Médio e Função de Autocorrelação da Força $f(t)$

Considerando a distribuição canônica Eq. (2.20),

$$\rho = Z^{-1} \exp \left\{ -\beta \sum_{j=1}^N \left[ \frac{p_j^2(0)}{2m_j} + \frac{m_j \omega_j^2}{2} \left( x_j(0) - \frac{\Gamma_j}{m_j \omega_j^2} X(0) \right)^2 \right] \right\}, \quad (\text{B.1})$$

vamos calcular o valor médio e a função de autocorrelação da força  $f(t)$ ;

$$\langle f(t) \rangle = \int f(t) \rho[\vec{x}(0), \vec{p}(0)] d\vec{x}(0) d\vec{p}(0), \quad (\text{B.2})$$

$$\langle f(t) f(\tau) \rangle = \int f(t) f(\tau) \rho[\vec{x}(0), \vec{p}(0)] d\vec{x}(0) d\vec{p}(0), \quad (\text{B.3})$$

lembrando que

$$f(t) = \sum_j^N \left\{ \left[ \Gamma_j x_j(0) - \frac{\Gamma_j^2}{m_j \omega_j^2} X(0) \right] \cos(\omega_j t) + \Gamma_j \frac{p_j(0)}{m_j \omega_j} \sin(\omega_j t) \right\}. \quad (\text{B.4})$$

Primeiramente vamos calcular a função partição canônica  $Z$  que é expressa por [77]

$$Z = \int e^{-\beta \hat{H}(\vec{x}, \vec{p})} d\vec{x} d\vec{p}, \quad (\text{B.5})$$

sendo

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^N \left[ \frac{p_j^2(0)}{2m_j} + \frac{m_j \omega_j^2}{2} \left( x_j(0) - \frac{\Gamma_j}{m_j \omega_j^2} X(0) \right)^2 \right]. \quad (\text{B.6})$$

Para facilitar nossos cálculos podemos escrever a Hamiltoniana dada pela Eq. (B.6) como

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^N h_j, \quad (\text{B.7})$$

sendo

$$h_j = \frac{p_j^2(0)}{2m_j} + \frac{m_j \omega_j^2 x_j^2(0)}{2} + \frac{\Gamma_j^2 X^2(0)}{2m_j \omega_j^2} - \Gamma_j X(0) x_j(0). \quad (\text{B.8})$$

Então, a função partição é expressa por

$$\begin{aligned} Z = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta \sum_j h_j} dx_j dp_j &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta h_1} dx_1 dp_1 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta h_2} dx_2 dp_2 \\ &\times \dots \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta h_N} dx_N dp_N. \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Cada uma das integrais do lado direito da equação acima pode ser dividida em duas novas integrais, uma para a variável  $x_j$  e outra para a variável  $p_j$ . O resultado é obtido calculando integrais do tipo [107]

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(ay^2+by+c)} dy = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{(b^2-4ac)/4a}. \quad (\text{B.10})$$

Logo, a função partição canônica (Eq. (B.9)) é expressa por

$$Z = \left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^N \prod_{j=1}^N \frac{1}{\omega_j}. \quad (\text{B.11})$$

Considerando o resultado acima, podemos escrever a distribuição para os estados iniciais do *meio* dada pela Eq. (B.1) como sendo

$$\rho = C e^{-\beta \hat{H}}, \quad (\text{B.12})$$

onde  $C \equiv (\beta/2\pi)^N \prod_{j=1}^N \omega_j$  e a Hamiltoniana  $\hat{H}$  é dada pela Eq. (B.6). Para calcular a Eq. (B.2) vamos escrever a Eq. (B.4) como

$$f(t) = \sum_{i=1}^N f_i, \quad (\text{B.13})$$

onde

$$f_i = \Gamma_i x_i(0) \cos(\omega_i t) + \frac{\Gamma_i}{m_i \omega_i} p_i(0) \sin(\omega_i t) - \frac{\Gamma_i^2}{m_i \omega_i^2} X(0) \cos(\omega_i t). \quad (\text{B.14})$$

Considerando as equações Eq. (B.12) e Eq. (B.13) a média dada pela Eq. (B.2) é expressa por

$$\langle f(t) \rangle = C \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} (f_1 + f_2 + \dots f_N) \prod_{j=1}^N e^{-\beta h_j} dx_j(0) dp_j(0) \right], \quad (\text{B.15})$$

ou ainda

$$\begin{aligned} \langle f(t) \rangle = C & \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} f_1 e^{-\beta h_1} dx_1(0) dp_1(0) \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta h_2} dx_2(0) dp_2(0) \right. \\ & \times \dots \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta h_N} dx_N(0) dp_N(0) + \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta h_1} dx_1(0) dp_1(0) \\ & \times \int_{-\infty}^{+\infty} f_2 e^{-\beta h_2} dx_2(0) dp_2(0) \dots \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta h_N} dx_N(0) dp_N(0) \\ & + \dots \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta h_1} dx_1(0) dp_1(0) \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta h_2} dx_2(0) dp_2(0) \\ & \left. \times \dots \int_{-\infty}^{+\infty} f_N e^{-\beta h_N} dx_N(0) dp_N(0) \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

A primeira integral da equação acima é escrita na forma

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} f_1 e^{-\beta h_1} dx_1(0) dp_1(0) = & \Gamma_1 \cos(\omega_1 t) \int_{-\infty}^{+\infty} x_1(0) e^{-\beta h_1} dx_1(0) dp_1(0) \\ & + \frac{\Gamma_1}{m_1 \omega_1} \sin(\omega_1 t) \int_{-\infty}^{+\infty} p_1(0) e^{-\beta h_1} dx_1(0) dp_1(0) \\ & - \frac{\Gamma_1^2}{m_1 \omega_1^2} X(0) \cos(\omega_1 t) \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta h_1} dx_1(0) dp_1(0), \end{aligned} \quad (\text{B.17})$$

onde cada integral é separada em duas novas integrais, uma para variável  $x_1$  e outra para a variável  $p_1$ . Efetuando os cálculos obtemos

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_1 e^{-\beta h_1} dx_1(0) dp_1(0) = 0. \quad (\text{B.18})$$

De forma análoga, a resolução das demais integrais, tipo  $\int_{-\infty}^{+\infty} f_k e^{-\beta h_k} dx_k(0) dp_k(0)$ , são todas nulas. Portanto o valor médio (Eq. (B.16)) da força flutuante  $f(t)$  é dado por

$$\langle f(t) \rangle = 0. \quad (\text{B.19})$$

Para calcular a função de autocorrelação Eq. (B.3) consideramos as equações Eq. (B.12) e Eq. (B.13) e também a função

$$f(\tau) = \sum_{k=1}^N g_k, \quad (\text{B.20})$$

onde

$$g_k = \Gamma_k x_k(0) \cos(\omega_k \tau) + \frac{\Gamma_k}{m_k \omega_k} p_k(0) \sin(\omega_k \tau) - \frac{\Gamma_k^2}{m_k \omega_k^2} X(0) \cos(\omega_k \tau). \quad (\text{B.21})$$

Assim a função de autocorrelação para  $f(t)$  fica

$$\begin{aligned} \langle f(t)f(\tau) \rangle &= C \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \sum_{i,k} f_i g_k \right) \prod_{j=1}^N e^{-\beta h_j} dx_j(0) dp_j(0) \right] \\ &= C \left[ \int_{-\infty}^{+\infty} (f_1 + f_2 + \dots f_N) (g_1 + g_2 + \dots g_N) \prod_{j=1}^N e^{-\beta h_j} dx_j(0) dp_j(0) \right], \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

ou ainda

$$\begin{aligned} \langle f(t)f(\tau) \rangle &= C \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} (f_1 g_1 + f_1 g_2 + \dots f_1 g_N) \prod_{j=1}^N e^{-\beta h_j} dx_j(0) dp_j(0) \right. \\ &\quad + \int_{-\infty}^{+\infty} (f_2 g_1 + f_2 g_2 + \dots f_2 g_N) \prod_{j=1}^N e^{-\beta h_j} dx_j(0) dp_j(0) \\ &\quad \left. + \dots \int_{-\infty}^{+\infty} (f_N g_1 + f_N g_2 + \dots f_N g_N) \prod_{j=1}^N e^{-\beta h_j} dx_j(0) dp_j(0) \right\} \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

A primeira integral da equação acima, assim como as demais, pode ser dividida em uma soma de várias integrais. Expressamos abaixo a primeira e segunda integral desta soma, respectivamente temos

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} f_1 g_1 \prod_{j=1}^N e^{-\beta h_j} dx_j(0) dp_j(0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} f_1 g_1 e^{-\beta h_1} dx_1(0) dp_1(0) \\ &\quad \times \prod_{j=2}^N \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta h_j} dx_j(0) dp_j(0), \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

e

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{+\infty} f_1 g_2 \prod_{j=1}^N e^{-\beta h_j} dx_j(0) dp_j(0) &= \int_{-\infty}^{+\infty} f_1 e^{-\beta h_1} dx_1(0) dp_1(0) \\
&\times \int_{-\infty}^{+\infty} g_2 e^{-\beta h_2} dx_2(0) dp_2(0) \\
&\times \prod_{j=3}^N \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta h_j} dx_j(0) dp_j(0).
\end{aligned} \tag{B.25}$$

E ainda, cada uma das integrais do lado direito da Eq. (B.24) e Eq (B.25) pode ser escrita em termos de um produto de duas novas integrais para as variáveis  $x_j$  e  $p_j$ . Efetuando os cálculos obtemos as seguintes soluções

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_1 g_1 \prod_{j=1}^N e^{-\beta h_j} dx_j(0) dp_j(0) = \left( \frac{2\pi}{\beta} \right)^N \prod_{j=1}^N \frac{1}{\omega_j} \left\{ \frac{\Gamma_1^2}{\beta m_1 \omega_1^2} \cos [\omega_1(t - \tau)] \right\}, \tag{B.26}$$

e

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_1 g_2 \prod_{j=1}^N e^{-\beta h_j} dx_j(0) dp_j(0) = 0. \tag{B.27}$$

Procedendo o cálculo de forma análoga para as demais integrais da Eq. (B.23), ficamos com

$$\begin{aligned}
\langle f(t) f(\tau) \rangle &= C \left\{ \left( \frac{2\pi}{\beta} \right)^N \prod_{j=1}^N \frac{1}{\omega_j} \left\{ \frac{\Gamma_1^2}{\beta m_1 \omega_1^2} \cos [\omega_1(t - \tau)] \right. \right. \\
&\quad + \frac{\Gamma_2^2}{\beta m_2 \omega_2^2} \cos [\omega_2(t - \tau)] \\
&\quad \left. \left. + \cdots + \frac{\Gamma_N^2}{\beta m_N \omega_N^2} \cos [\omega_N(t - \tau)] \right\} \right\},
\end{aligned} \tag{B.28}$$

lembrando que  $C \equiv (\beta/2\pi)^N \prod_{j=1}^N \omega_j$  e  $\beta = 1/k_B T$  e ainda expressando a soma em termos de um somatório, obtemos a seguinte expressão para a função de autocorrelação da força flutuante  $f(t)$

$$\langle f(t) f(\tau) \rangle = k_B T \sum_j \frac{\Gamma_j^2}{m_j \omega_j^2} \cos[\omega_j(t - \tau)]. \tag{B.29}$$

# Referências Bibliográficas

- [1] T. Tomé e M. J. Oliveira. **Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade**. Edusp - Editora da Universidade de São Paulo (2001).
- [2] R. Luzzi. **Tópicos em Termodinâmica Estatística de Processos Dissipativos**. Editora da Unicamp (2000).
- [3] C. Q. Wu, J. X. Li, e D. H. Lee. **Switching and Nonswitching Phases of Photomechanical Molecules in Dissipative Environments**. *Physical Review Letters* **99**, 038302 (2007).
- [4] R. Hanson, L. P. Kouwenhoven, J. R. Petta, S. Tarucha, e L. M. K. Vandersypen. **Spins in few-electron quantum dots**. *Reviews of Modern Physics* **79**, 1217-1265 (2007).
- [5] O. Zaitsev, D. Frustaglia, e K. Richter. **Role of orbital dynamics in spin relaxation and weak antilocalization in quantum dots**. *Physical Review Letters* **94**, 026809 (2005).
- [6] I. Zutic, J. Fabian, e S. D. Sarma. **Spintronics: Fundamentals and applications**. *Reviews of Modern Physics* **76**, 323-410 (2004).
- [7] I. Burghardt, M. Nest, e G. A. Worth. **Multiconfigurational system-bath dynamics using Gaussian wave packets: Energy relaxation and decoherence induced by a finite-dimensional bath**. *Journal of Chemical Physics* **119**, 5364-5378 (2003).



- [8] M. Gruebele e P. G. Wolynes. **Vibrational energy flow and chemical reactions.** *Accounts of Chemical Research* **37**, 261-267 (2004).
- [9] V. Bernshtein e I. Oref. **Intermolecular energy transfer probabilities from trajectory calculations: A new approach.** *Journal of Chemical Physics* **108** , 3543-3553 (1998).
- [10] A. O. Caldeira e A. J. Leggett. **Influence of dissipation on quantum tunneling in macroscopic systems.** *Physical Review Letters* **46**, 211-214 (1981).
- [11] A. O. Caldeira e A. J. Leggett. **Quantum tunneling in a dissipative system.** *Annals of Physics* **149**, 374-456 (1983).
- [12] R. Ait-Haddou. e W. Herzog. **Force and Motion Generation of Myosin Motors: Muscle Contraction.** *Journal of Electromyography an Kinesiology* **12**, 435-445 (2002).
- [13] F. Jülicher, A. Ajdari, e J. Prost. **Modeling Molecular Mortors.** *Reviews of Modern Physics* **69**, 1269-1281 (1997).
- [14] P. Reimann. **Brownian Motors: noisy transport far from equilibrium.** *Physics Reports* **361**, 57-265 (2002).
- [15] R. Dean Astumian. **Thermodynamics and Kinetics of a Brownian Motor.** *Science* **276**, 917-922 (1997).
- [16] M. V. S. Bonança e M. A. M. de Aguiar. **Classical dissipation and asymptotic equilibrium via interaction with chaotic systems.** *Physica A* **365**, 333-350 (2006).
- [17] T. O. Carvalho e M. A. M. de Aguiar. **Classical chaos as an environment for dissipation.** *Physical Review Letters* **76**, 2690 (1996).
- [18] U. Weiss. **Quantum Dissipative Systems.** World Scientific Publishing (1993).

- [19] E. Cortés, Bruce J. West, e K. Lindenberg. **On the generalized Langevin equation: Classical and quantum mechanical.** *Journal of Chemical Physics* **82**, 2708-2717 (1985).
- [20] P. Ullersma. **An exactly solvable model for Brownian motion.** *Physica* **32**, 27, 56, 74, 90 (1966).
- [21] J. Ford. **The Fermi-Pasta-Ulam problem: Paradox turns discovery.** *Physics Reports* **213**, 271-310 (1992).
- [22] H. L. Yang e G. Radons. **Hydrodynamic Lyapunov modes and strong stochasticity threshold in Fermi-Pasta-Ulam models.** *Physical Review E* **73**, 066201 (2006).
- [23] V. Wong e M. Gruebele. **Sub-exponential spin-boson decoherence in a finite bath.** *Chemical Physics* **284**, 29-44 (2002).
- [24] F. Q. Potiguar e U. M. S. Costa. **Fluctuation of energy in the generalized thermostatics.** *Physica A* **321**, 482-492 (2003).
- [25] M. R. Bastida, D. Castaneda, e E. Braun. **Macroscopic evidence of microscopic dynamics in the Fermi-Pasta-Ulam oscillator chain from nonlinear time-series analysis.** *Physical Review E* **71**, 046207 (2005).
- [26] M. O. Magnasco. **Forced Thermal Ratchets.** *Physical Review Letters* **71**, 1477-1481 (1993).
- [27] C. R. Doering, W. Horsthemke, e J. Riordan. **Nonequilibrium Fluctuation-Induced Transport.** *Physical Review Letters* **72**, 2984-2987 (1994).
- [28] P. Jung, J. G. Kissner, e P. Hänggi. **Regular and Chaotic Transport in Asymmetric Periodic Potentials: Inertia Ratchets.** *Physical Review Letters* **76**, 3436-3439 (1996).
- [29] J. L. Mateos. **Chaotic Transport and Current Reversal in Deterministic Ratchets.** *Physical Review Letters* **84**, 258-261 (2000).

- [30] U. E. Vincent, A. Kenfack, A. N. Njah, e O. Akinlade. **Bifurcation and chaos in coupled ratchets exhibiting synchronized dynamics.** *Physical Review E* **72**, 056213 (2005).
- [31] P. Reimann, M. Grifoni, e P. Hänggi. **Quantum Ratchets.** *Physical Review Letters* **79**, 10-13 (1997).
- [32] H. Linke et al. **Quantum ratchets and quantum heat pumps.** *Applied Physics A* **75**, 237-246 (2002).
- [33] J. Lehmann, S. Kohler, P. Hänggi, e A. Nitzan. **Molecular Wires Acting as Coherent Quantum Ratchets.** *Physical Review Letters* **88**, 228305 (2002).
- [34] G. G. Carlo, G. Benenti an G. Casati, e D. L. Shepelyansky. **Quantum Ratchets in Dissipative Chaotic Systems.** *Physical Review Letters* **94**, 164101 (2005).
- [35] *Especial Issue.* **Ratchets and Brownian motors: Basics, experiments and applications.** *Applied Physics A* **75**, 167 (2002).
- [36] M. Bier e R. D. Astumian. **Biasing Brownian Motion in Different Directions in a 3-State Fluctuating Potential and an Application for the Separation of Small Particles.** *Physical Review Letters* **76**, 4277-4280 (1996).
- [37] A. van Oudenaarden e S. G. Boxer. **Brownian ratchets: molecular separations in lipid bilayers supported on patterned arrays.** *Science* **285**, 1046-1048 (1999).
- [38] C. Kettner, P. Reimann, P. Hänggi, e F. Müller. **Drift ratchet.** *Physical Review E* **61**, 312-323 (2000).
- [39] S. Savel'ev, F. Marchesoni, e F. Nori. **Controlling Transport in Mixtures of Interacting Particles using Brownian Motors .** *Physical Review Letters* **91**, 010601 (2003).

- [40] I. Derényi. **Applications of the ratchet effect to improve material quality (reducing vortex density in superconductors and soothing surfaces)**. *Applied Physics A* **75**, 217-222 (2002).
- [41] C.-S. Lee, B. Jankó, I. Derényi, e A.-L. Barabási. **Reducing vortex density in superconductors using the ratchet effect**. *Nature* **400**, 337-340 (1999).
- [42] R. P. Feynman, R. B. Leighton, e M. Sands. **Lectures on Physics** volume 1, capítulo 46. Editora Addison-Wesley (1964).
- [43] R. D. Astumian e M. Bier. **Fluctuation Driven Ratchets: Molecular Motors**. *Physical Review Letters* **72**, 1766-1769 (1994).
- [44] H. X. Zhou e Y. D. Chen. **Chemically Driven Motility of Brownian Particles**. *Physical Review Letters* **77**, 194-197 (1996).
- [45] W. T. Coffey, Yu. P. Kalmykov, e J. T. Waldron. **The Langevin Equation**. Second edition. World Scientific Publishing (2004).
- [46] J. Prost, J.-F. Chauwin, L. Peliti, e A. Ajdari. **Asymmetric Pumping of Particles**. *Physical Review Letters* **72**, 2652-2655 (1994).
- [47] P. Reimann, R. Bartussek, R. Häubler, e P. Hänggi. **Brownian Motors Driven by Temperature Oscillations**. *Physics Letters A* **215**, 26-31 (1996).
- [48] L. Ibarra-Bracamontes e V. Romero-Rochín. **Stochastic ratchets with colored thermal noise**. *Physical Review E* **56**, 4048-4051 (1997).
- [49] J. Rousselet, L. Salome, A. Ajdari, e J. Prost. **Directional motion of brownian particles induced by a periodic asymmetric potential**. *Nature* **370**, 446-448 (1994).
- [50] L. P. Faucheux, L. S. Bourdieu, P. D. Kaplan, e A. J. Libchaber. **Optical Thermal Ratchet**. *Physical Review Letters* **74**, 1504-1507 (1995).

- [51] I. Derényi e A. Ajdari. **Collective transport of particles in a "flashing" periodic potencial** . *Physical Review E* **54**, R5-R8 (1996).
- [52] H. Linke, B. J. Aleman, L. D. Melling, M. J. Taormina, M. J. Francis, C. C. Dow-Hygelund, V. Narayanan, R. P. Taylor, e A. Stout. **Self-Propelled Leidenfrost Droplets**. *Physical Review Letters* **96**, 154502 (2006).
- [53] M. M. Millonas e M. I. Dykman. **Transport and current reversal in stochastically driven ratchets** . *Physics Letters A* 65-69 (1994).
- [54] M. Barbi e M. Salerno. **Phase locking effect and current reversals in deterministic underdamped ratchets**. *Physical Review E* **62**, 1988-1994 (2000).
- [55] W.-S. Son, I. Kim, Y.-J. Park, e C.-M. Kim. **Current reversal with type-I intermittency in deterministic inertia ratchets**. *Physical Review E* **68**, 067201 (2003).
- [56] M. Kostur, P. Hänggi, P. Talkner, e J. L. Mateos. **Anticipated synchronization in coupled inertial ratchets with time-delayed feedback: A numerical study**. *Physical Review E* **72**, 036210 (2005).
- [57] U. E. Vincent, A. N. Njah, O. Akinlade, e A. R. T. Solarin. **Phase synchronization in unidirectionally coupled chaotic ratchets**. *Chaos* **14**, 1018-1025 (2004).
- [58] T. Sintès e K. Sumithra. **Isothermal ratchets: Numerical study of the efficiency of the energy transduction**. *Computer Physics Communications* **147**, 646-649 (2002).
- [59] I. Derényi, M. Bier, e R. D. Astumian. **Generalized Efficiency and its Application to Microscopic Engines**. *Physical Review Letters* **83**, 903-906 (1999).

- [60] D. Suzuki e T. Munakata. **Rectification efficiency of a Brownian motor.** *Physical Review E* **68**, 021906 (2003).
- [61] J. Rosa e M. W. Beims. **Dissipation and Transport in a Ratchet Coupled to a Discrete Bath.** Submetido para *Physical Review E* (2008).
- [62] C. Manchein, J. Rosa, e M. W. Beims. **Chaos at the emergence of dissipation.** Submetido para *Chaos Solitons and Fractals* (2008).
- [63] J. Rosa e M. W. Beims. **Optimal transport in a ratchet coupled to a modulated environment: The role of Levy walks.** *Physica A* **386**, 54-62 (2007).
- [64] A. Einstein. **Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen.** *Annalen der Physik* **17**, 549 (1905).
- [65] F. Reif. **Fundamentals of Statistical and Thermal Physics.** McGraw-Hill (1965).
- [66] G. W. Gardiner. **Handbook of Stochastic Methods.** Third Edition. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York (2004).
- [67] D. S. Lemons. **An Introduction to Stochastic Processes in Physics.** The Johns Hopkins University Press (2002).
- [68] J. P. Bouchaud e A. Georges. **Anomalous diffusion in disordered media: Statistical mechanisms, models and physical applications.** *Physics Reports* **195**, 127-293 (1990).
- [69] M. F. Shlesinger, G. M. Zaslavsky, e J. Klafter. **Strange kinetics.** *Nature* **363**, 31-37 (1993).
- [70] J. Klafter, M. F. Shlesinger, e G. Zumofen. **Beyond Brownian motion.** *Physics Today* **49**, 33-39 (1996).

- [71] T. H. Solomon, E. R. Weeks, e H. L. Swinney. **Chaotic advection in a two-dimensional flow: Lévy flights and anomalous diffusion.** *Physica D* **76**, 70-84 (1994).
- [72] S. Denisov, J. Klafter, M. Urbakh, e S. Flach. **DC currents in Hamiltonian systems by Lévy flights.** *Physica D* **170**, 131-142 (2002).
- [73] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, e B. P. Flannery. **Numerical Recipes in Fortran: The Art of Scientific Computing.** Cambridge University Press 2nd edition (1992). <http://www.nr.com/>. Acessado em 17/03/2008.
- [74] H. P. Breuer e F. Petruccione. **The Theory of Open Quantum Systems.** Oxford University Press (2002).
- [75] W. E. Boyce e R. C. Di Prima. **Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de contorno.** Guanabara Koogan S.A. (1994).
- [76] P. Hänggi. **Generalized Langevin Equations: A Useful Tool for the Perplexed Modeller of Nonequilibrium Fluctuations?** *Lecture Notes in Physics* **484**, 15-22 (1997). <http://www.physik.uni-augsburg.de/theo1/hanggi/Reviews.html>. Acessado em 17/03/2008.
- [77] S. R. Salinas. **Introdução à Física Estatística.** Edusp- Editora da Universidade de São Paulo (1997).
- [78] R. Kubo. **The fluctuation-dissipation theorem.** *Reports on Progress in Physics* **29**, 255-284 (1966).
- [79] M. Esposito e P. Gaspard. **Quantum master equation for the microcanonical ensemble.** *Physical Review E* **76**, 041134 (2007).
- [80] M. V. S. Bonança e M. A. M. de Aguiar. **Quantum dissipation and decoherence via interaction with low-dimensional chaos: A Feynman-Vernon approach.** *Physical Review A* **74**, 012105 (2006).

- [81] W. M. Gelbart, S. A. Rice, e K. F. Freed. **Random Matrix Theory and the Master Equation for Finite Systems.** *The Journal of Chemical Physics* **57**, 4699-4712 (1972).
- [82] A. Damjanović, I. Kosztin, U. Kleinekathöfer, e K. Schulten. **Excitons in a photosynthetic light-harvesting system: A combined molecular dynamics, quantum chemistry, and polaron model study.** *Physical Review E* **65**, 031919 (2002).
- [83] J. M. Raimond, T. Meunier, P. Bertet and S. Gleyzes, P. Maioli, A. Auffeves, G. Nogues, M. Brune, e S. Haroche. **Probing a quantum field in a photon box.** *Journal of Physics B* **38**, S535-S550 (2005).
- [84] P. Bertet, S. Osnaghi, P. Milman, A. Auffeves, P. Maioli, M. Brune, J. M. Raimond, e S. Haroche. **Generating and probing a two-photon Fock State with a single atom in a cavity.** *Physical Review Letters* **88**, 143601 (2002).
- [85] V. May e O. Kühn. **Charge and Energy Transfer Dynamics in Molecular Systems.** WILEY-VCH Verlag Berlin (2000).
- [86] J. Rosa e M. W. Beims. **Environment Dependent Transport in Multiple Asymmetric Well Potentials.** *Physica A* **342**, 29-33 (2004).
- [87] L. H. A. Monteiro. **Sistemas Dinâmicos.** Segunda edição - Editora Livraria da Física (2006).
- [88] M. Sano e Y. Sawada. **Measurement of the Lyapunov Spectrum from a Chaotic Time Series.** *Physical Review Letters* **55**, 1082 (1985).
- [89] R. Hegger, H. Kantz, e T. Schreiber. **Practical implementation of nonlinear time series methods: The TISEAN package.** *Chaos* **9**, 413 (1999). <http://www.mpi-pks-dresden.mpg.de/~tisean/>. Acessado em 17/03/2008.



- [90] H. Kantz e T. Schreiber. **Nonlinear Time Series Analysis**. Cambridge University Press (1997).
- [91] A. J. Lichtenberg e M. A. Lieberman. **Regular and Chaotic Dynamics**. Springer-Verlag (1992).
- [92] F. Takens. **Dynamical Systems and Turbulence, Lecture Notes in Mathematics** volume 898. Springer-Verlag (1981).
- [93] M. B. Kennel, R. Brown, e H. D. I. Abarbanel. **Determining embedding dimension for phase-space reconstruction using a geometrical construction** . *Physical Review A* **45**, 3403 (1992).
- [94] P. J. Turner e E. Stambulchik. **GRACE**. <http://plasma-gate.weizmann.ac.il/Grace/>. Acessado em 17/03/2008.
- [95] F. Marchesoni, S. Savel'ev, e F. Nori. **Achieving optimal rectification using underdamped rocked ratchets**. *Physical Review E* **73**, 021102 (2006).
- [96] J. D. Bao, Y. Abe, e Y. Z. Zhuo. **Competition and cooperation between thermal noise and externa driving force**. *Physica A* **277**, 127-135 (2000).
- [97] T. Sintès e K. Sumithra. **Optimal efficiency condition and current reversal in forced underdamped ratchets**. *Physica A* **312**, 86-98 (2002).
- [98] J. D. Bao, Y. Zhou, e K. Lü. **Anomalous diffusion in periodic potentials under self-similar colored noise**. *Physical Review E* **74**, 041125 (2006).
- [99] E. R. Weeks, J. S. Urbach, e H. L. Swinney. **Anomalous diffusion in asymmetric random walks with a quasi-geostrophic flow example**. *Physica D* **97**, 291-310 (1996).
- [100] M. C. Santos, G. M. Viswanathan, E. P. Raposo, e M. G. E. da Luz. **Optimization of random searches on regular lattices**. *Physical Review E* **72**, 046143 (2005).

- [101] G. M. Viswanathan, S. V. Buldyrev, S. Havlin, M. G. E. da Luz, E. P. Raposo, e H. E. Stanley. **Optimizing the success of random searches.** *Nature* **401**, 911-914 (1999).
- [102] L. Seuront, A. C. Duponchel, e C. Chapperon. **Heavy-tailed distributions in the intermittent motion behaviour of the intertidal gastropod *Littorina littorea*.** *Physica A* **385**, 573–582 (2007).
- [103] D. Brockmann, L. Hufnagel, e T. Geisel. **The scaling laws of human travel.** *Nature* **439**, 462-465 (2006).
- [104] N. B. Garnier e D. K. Wójcik. **Spatiotemporal Chaos: The Microscopic Perspective.** *Physical Review Letters* **96**, 114101 (2006).
- [105] J. Kuhn e M. G. E. da Luz. **Piecewise time-independent procedure to control two-level systems.** *Physical Review A* **75**, 053410 (2007).
- [106] H. Goldstein, C. Poole, e J. Safko. **Classical Mechanics.** Third edition. Addison-Wesley (2002).
- [107] M. R. Spiegel. **Mathematical Handbook of Formulas and Tables.** McGraw-Hill (1968).