

JANE ROSA

**TRANSPORTE DE PARTÍCULAS EM POTENCIAIS
ASSIMÉTRICOS**

Dissertação 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 Mestre em Ciências.

Orientador: Prof. Dr. Marcus Werner Beims

CURITIBA

2004

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ
SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

DEFESA DE DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

JANE ROSA

TÍTULO: “ TRANSPORTE DE PARTÍCULAS EM POTENCIAIS ASSIMÉTRICOS.”

Em sessão pública iniciada às dezesseis horas, nesta data, após um Seminário sob o título acima, e posterior arguição por esta banca examinadora, esta decidiu atribuir a candidata o conceito global

A.

Banca Examinadora

Prof. MARCUS WERNER BEIMS
(Orientador/Presidente) (UFPR)

Prof. FELIPE BARBEDO RIZZATO
(UFRGS)

Prof. MARCOS GOMES ELEUTÉRIO DA LUZ
(UFPR)

Assinatura

Conceito

Marcus Werner Beims

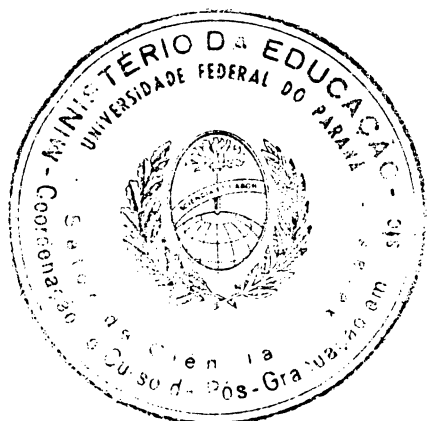
A

Felipe Barbedo Rizzato

A

Marcos Gomes Eleutério da Luz

A



Curitiba, 17 de fevereiro de 2004.

RESUMO

Nesse trabalho estudamos o transporte clássico de partículas em múltiplos poços de potenciais assimétricos através da integração numérica das equações de movimento. O problema considerado é descrito por um sistema que é composto por uma partícula sujeita a um potencial assimétrico e a uma força externa dependente do tempo, acoplado a N osciladores harmônicos independentes (representando o “meio”). As trocas de energia entre o sistema e osciladores (na ausência da força externa) também são discutidas. O estudo do transporte foi realizado para três casos distintos: (I) quando a massa da partícula é maior que a massa dos osciladores; (II) quando a massa dos osciladores é maior que a massa da partícula; e (III) quando a massa da partícula é muito maior que a massa dos osciladores. As trocas de energia foram verificadas para os casos (I) e (II). O transporte foi analisado como função do número de osciladores, da intensidade de interação entre partícula e osciladores, e da amplitude da força externa.

ABSTRACT

The classical transport of particles in multiple asymmetric well potentials is studied through numerical integration of equations of motion. The problem considered is described by a particle in an asymmetric potential coupled to N harmonic oscillators (representing the environment) and subjected to an external time dependent force. Energy exchange between system and environment is discussed for the case of no external force. Transport is analysed for three distinct cases: (I) particle mass greater than the oscillators masses; (II) oscillators masses greater than particle mass and (III) particle mass much greater than oscillators masses. Energy exchange is analysed for cases (I) and (II). The transport is studied as a function of number of oscillators, interaction intensity and intensity of the external force.

AGRADECIMENTOS

Ao prof. Dr. Marcus Werner Beims
(orientador)

Ao Grupo de Física Atômica e Molecular

Aos meus professores

Ao prof. Dr. Sérgio Roberto Lopes
(pelas sugestões)

Ao prof. Dr. Carlos Carvalho
(pelo suporte computacional)

Ao prof. Dr. José Arruda de Oliveira Freire
Ao prof. Dr. Wilson Marques Junior
(pelas sugestões propostas no exame de qualificação)

Ao prof. Dr. Felipe Barbedo Rizzato (UFRGS)
Ao prof. Dr. Marcos Gomes Eleutério da Luz
(pelas sugestões propostas na defesa da dissertação)

Aos colegas da Pós-Graduação

Ao CNPq
(financiamento da pesquisa)

Jiusandro Kühn
(pelas longas discussões teóricas)

À minha filha Caroline

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	6
2	ASPECTOS TEÓRICOS	11
2.1	MOVIMENTO BROWNIANO	11
2.2	DERIVAÇÃO EXPLÍCITA DA EQUAÇÃO DE LANGEVIN	15
3	MODELO	22
3.1	EQUAÇÕES DE MOVIMENTO	22
3.2	TRANSPORTE NA AUSÊNCIA DO “MEIO”	27
4	SIMULAÇÕES NUMÉRICAS	32
4.1	TRATAMENTO NUMÉRICO	32
4.2	FLUXO DE ENERGIA ($F_{ext} = 0$)	35
4.2.1	FLUXO DE ENERGIA MÉDIA (I) CASO: $m_j = 0,1$	37
4.2.2	FLUXO DE ENERGIA MÉDIA (II) CASO: $m_j = 10$	40
4.3	TRANSPORTE DE PARTÍCULAS ($F_{ext} \neq 0$)	43
4.3.1	DINÂMICA DA PARTÍCULA (I) CASO: $m_j = 0,1$	43
4.3.2	DINÂMICA DA PARTÍCULA (II) CASO: $m_j = 10$	46
4.3.3	DINÂMICA DA PARTÍCULA (III) CASO: $m_j = 0,01$	49
5	CONSIDERAÇÕES FINAIS	51
A	VALOR MÉDIO E FUNÇÃO CORRELAÇÃO	54
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	58

1

INTRODUÇÃO

O transporte de partículas é um fenômeno que ocorre freqüentemente na natureza e está presente em diversas áreas de pesquisa como a Física, Química e Biologia. Alguns exemplos são: o transporte de elétrons em metais e polímeros [1]; o fluxo de partículas em fluidos e o transporte de partículas em sistemas biofísicos [2]. Embora o fenômeno de transporte seja comum na natureza, sua descrição teórica é em geral um problema difícil. Normalmente as partículas não são livres para se moverem, mas estão sujeitas a interações com o “meio”¹ através de forças ou gradientes de potenciais de várias origens. O mais comum e conhecido fenômeno de transporte resulta em geral da ação de forças ou gradientes macroscópicos externos. Recentes e interessantes estudos teóricos e experimentais têm entretanto mostrado que sistemas dissipativos fora do equilíbrio podem induzir movimento macroscópico através de efeitos puramente microscópicos [2–6]. O primeiro sistema desta natureza foi proposto por Feynman em seu *Lectures* [7]. Ele idealizou um motor capaz de gerar movimento macroscópico a partir de forças de origem puramente microscópicas, através de um dispositivo constituído por uma catraca modelada por uma roda com dentes assimétricos, isto é, uma das faces de cada dente é ortogonal a circunferência da roda, enquanto que a outra face tem um ângulo de inclinação menor que $\pi/2$. Uma lingüeta faz com que a catraca gire em um sentido mais facilmente que no sentido oposto. Essa catraca é conectada a uma hélice através de uma haste, veja Fig. 1.1. Considera-se que todos os elementos deste dispositivo estão perfeitamente isolados e que a catraca e a hélice estão separadas por duas caixas isoladas que contêm gases a temperaturas T_1 e T_2 , respectivamente. Admite-se que o dispositivo é reduzido a escalas microscópicas, de modo que as flutuações do “meio” ou banho térmico tornam-se importantes para o funcionamento do motor, pois as partículas Brownianas com-

¹A palavra no inglês é environment, traduzimos como “meio”. As aspas nesta palavra serão utilizadas ao longo do texto para evitar interpretações errôneas.

pondo o gás golpeiam a hélice, fornecendo energia para a catraca mover-se para um próximo dente. Feynman mostrou que o movimento direcionado da catraca é obtido apenas quando as temperaturas T_1 e T_2 forem diferentes, demonstrando assim que o movimento direcionado não pode ser extraído de um sistema isotérmico, apesar da assimetria da catraca. Entretanto um gradiente térmico no domínio Browniano pode gerar movimento direcionado da catraca e pode ser usado para produzir trabalho.

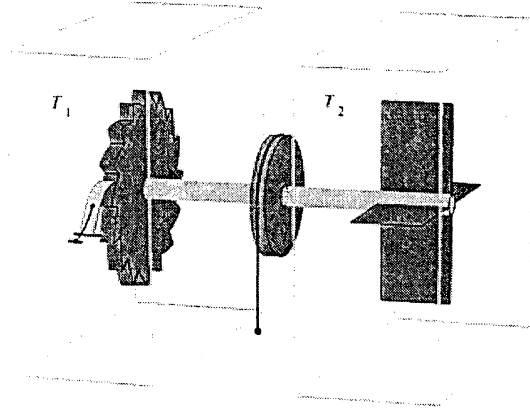


Figura 1.1: Mecanismo descrito por Feynman. Figura extraída da referência [8].

Na prática grandes gradientes térmicos são praticamente impossíveis para pequenas distâncias. No entanto, recentes trabalhos têm apontado o uso de outras fontes de energia, em vez de gradientes térmicos, para mover um motor microscópico. Se a energia é fornecida por flutuações externas [2, 3] ou por reações químicas fora do equilíbrio [9], o movimento Browniano pode ser influenciado se o “meio” for anisotrópico, mesmo que o sistema seja isotérmico. Deste modo, o movimento direcionado é possível na ausência de uma força gravitacional, campos elétricos macroscópicos ou gradientes térmicos. Um dispositivo baseado no movimento Browniano induzido pode ser caracterizado por uma partícula movendo-se sob a ação de um potencial periódico assimétrico que é produzido por um conjunto de eletrodos (Fig. 1.2(a)-A). Quando uma diferença de potencial é aplicada, a partícula é sujeita a um potencial assimétrico tipo “dente de serra” (Fig. 1.2(a)-B). O campo elétrico médio na direção x é zero, de modo que não há nenhuma força macroscópica resultante. Uma flutuação externa pode ser produzida através da modulação na diferença de potencial aplicada, deste modo, a partícula é transportada pela combinação da difusão e do movimento induzido pelo campo elétrico dependente do tempo. O trabalho experimental realizado por Rousselet, Salome, Ajdari e Prost [10] mostrou que o movimento unidirecional de partículas pode ser induzido através da modulação na amplitude de um potencial assimétrico que é produzido por um dispositivo como ilustra a (Fig. 1.2(a)). O potencial assimétrico V_{on} é aplicado periodicamente por um período τ_{on} , e desligado por um período τ_{off} . No final do

período “ligado” (τ_{on}), as partículas estão concentradas em torno do mínimo do potencial assimétrico V_{on} (Fig. 1.2(b)-C). Durante o período seguinte, “desligado” (τ_{off}), as partículas difundem-se livremente de modo que a concentração de partículas, no fim deste período τ_{off} , seja um conjunto de curvas Gaussianas centradas em torno do mesmo ponto inicial (mínimo do potencial) (Fig. 1.2(b)-D). Quando o potencial é novamente “ligado” será induzido sobre as partículas um movimento em direção ao mínimo do potencial assimétrico. A cada ciclo “liga-desliga” do campo elétrico, resultará um movimento líquido de partículas da esquerda para a direita. A (Fig. 1.3) mostra uma foto da estrutura microscópica do experimento.

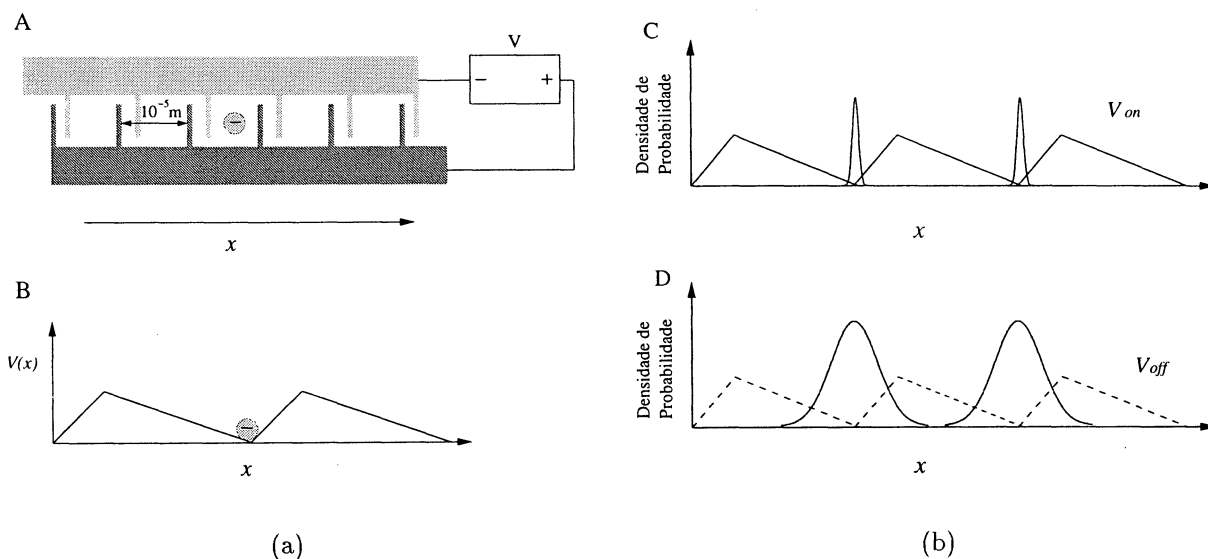


Figura 1.2: Movimento induzido de partículas Brownianas.



Figura 1.3: Pequenas partículas difundindo-se durante um ciclo τ_{off} (“desligado”) do campo elétrico. Escala da barra 10 μm . Figura extraída da referência [11].

Teoricamente, o movimento direcionado de partículas interagentes com um “meio” é modelado classicamente por partículas movendo-se em potenciais periódicos assimétricos sob a ação de ruídos térmicos e externos. Tais sistemas são chamados de catracas² Brownianas, inicialmente propostas por M. O. Magnasco [3] que modelou uma catraca através de um potencial periódico assimétrico $V(x)$ (veja Fig. 1.4). A dinâmica da partícula Browniana sujeita a este potencial e acoplada a um banho térmico pode ser obtida da solução da equação de Langevin, expressa por

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

onde α é uma constante (com unidades de massa/tempo), x é a variável representando a posição da partícula, $f(x) \equiv -\partial V(x)/\partial x$ é o campo de força devido ao potencial $V(x)$, e $\zeta(t)$ é o ruído térmico Gaussiano que obedece a propriedade $\langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle = 2\alpha k_B T \delta(t - t')$. $F(t)$ é a força externa dependente do tempo de origem determinística ou estocástica, com média temporal zero, que é responsável pelo movimento da partícula.

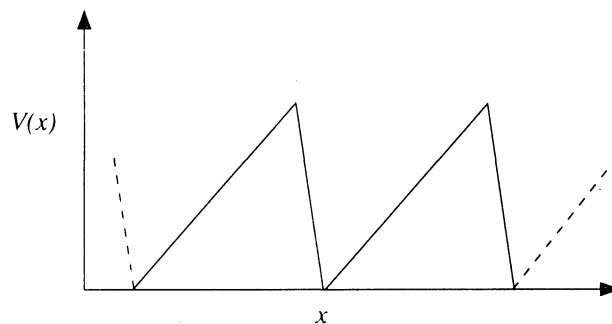


Figura 1.4: Potencial periódico assimétrico.

O interesse em estudar catracas Brownianas originou-se da biofísica molecular onde mecanismos deste tipo têm sido propostos para explicar os motores moleculares [12–14] (proteínas celulares capazes de converter energia química em força e movimento mecânico), responsáveis por exemplo: pelo transporte de íons, prótons e pela contração muscular.

Após o trabalho inicial de Magnasco, vários estudos teóricos (baseados na equação de Langevin) examinaram em mais detalhes as catracas Brownianas sob diferentes aspectos: dependência da corrente³ com a forma do potencial assimétrico ou com a forma do espectro de potências do ruído térmico [15]; dependência da corrente com o tipo da força externa, sua amplitude e frequência [16]; condição de máxima eficiência da corrente e o surgimento de correntes reversas [17–21]. Essencialmente foi mostrado que a corrente total depende da

²No inglês: ratchet, e é adequadamente traduzida neste contexto como catraca.

³Por corrente entendemos o transporte da partícula através dos múltiplos poços do potencial assimétrico (Fig. 1.4) numa direção, por exemplo, sentido positivo do eixo- x .

intensidade e da frequência da força externa dependente do tempo, bem como da escolha do particular potencial assimétrico. Recentes trabalhos experimentais apontam possíveis aplicações tecnológicas [8, 22, 23] tais como a indução de grandes potenciais elétricos, a redução de ruídos em dispositivos supercondutores, e a possibilidade do emprego de um novo dispositivo para separação de partículas. Catracas quânticas também foram analisadas teoricamente [24] e têm sido usadas para estudar efeitos de campos de lasers sobre o transporte eletrônico através de cadeias moleculares [25].

A proposta deste trabalho consiste em verificar numericamente o efeito de transporte a partir das equações de movimento de um sistema acoplado com um “meio”. O sistema é composto por uma partícula sob a ação de um potencial periódico assimétrico e de uma força externa dependente do tempo. Este sistema interage com um “meio” composto por osciladores harmônicos independentes. Diferentemente da descrição teórica proposta pela equação de Langevin, utilizamos um conjunto de equações diferenciais acopladas para estudar o transporte direcionado de partículas. Esta descrição, embora aparentemente mais complexa e limitada quanto a discussão analítica dos resultados possibilita um maior controle sobre os diversos parâmetros envolvidos bem como uma detalhada análise do efeito de um “meio” finito, ou seja, um número finito de osciladores harmônicos. O conceito usual de banho térmico não é mais utilizado e os osciladores harmônicos do “meio” fazem parte integrante da dinâmica do sistema, podendo ter sua dinâmica substancialmente alterada. Sob esta perspectiva, torna-se importante analisar o transporte de partículas como função de diferentes situações físicas. Neste trabalho, investigamos o efeito de transporte como função: do número de osciladores que compõe o “meio”, da intensidade da interação entre sistema e osciladores e da amplitude da força externa dependente do tempo. Essa investigação é realizada para três situações distintas: (I) quando a massa da partícula é maior que a massa de cada oscilador que compõe o “meio”; (II) quando a massa dos osciladores é maior que a massa da partícula; e (III) quando a massa da partícula é muito maior que a massa dos osciladores. Além do efeito de transporte, também investigamos numericamente a troca de energia entre sistema e “meio” na ausência da força externa para os casos (I) e (II).

Dado que a maioria dos trabalhos sobre movimento Browniano e catracas Brownianas foram realizados usando a equação de Langevin, no capítulo 2, uma revisão teórica sobre o movimento Browniano e a derivação explícita da equação de Langevin serão discutidos. No capítulo 3 as equações de movimento usadas neste trabalho serão derivadas, e também será feita uma discussão sobre o transporte de partículas na ausência do “meio”. Os resultados numéricos para o transporte em função das diferentes situações mencionadas acima, bem como as trocas de energia entre sistema e osciladores serão discutidos no capítulo 4. Uma conclusão geral sobre os resultados será apresentada no capítulo 5.

2

ASPECTOS TEÓRICOS

Esse capítulo é dedicado a apresentação de aspectos relacionados a teoria envolvida com a proposta deste trabalho. Será discutido o movimento Browniano e a equação de Langevin é derivada, pois constituem a base teórica na qual é estruturada a literatura referente ao efeito de transporte direcionado de partículas.

2.1 MOVIMENTO BROWNIANO

Uma partícula imersa num líquido está sujeita a colisões aleatórias com as moléculas do fluido. O movimento irregular resultante, ou movimento Browniano, veja Fig.2.1, foi descoberto em 1827 pelo botânico inglês Robert Brown que caracterizou este tipo de movimento através de observações de grãos de pólen imersos num fluido. Uma explicação teórica para este tipo de movimento foi dada por Einstein em 1905, mostrando que o movimento irregular observado ocorre devido às flutuações térmicas intrínsecas resultantes da interação da pequena partícula com o “banho térmico”, ou seja, das colisões aleatórias da partícula com as moléculas do fluido. Independentemente de Einstein, Langevin sugeriu que as forças sobre a partícula, devido às moléculas do fluido, podem ser divididas em duas componentes: (i) uma força oscilante que muda de direção e amplitude freqüentemente quando comparada com qualquer outra escala de tempo do sistema, cuja média temporal é zero; (ii) uma força viscosa de amortecimento que diminui o movimento induzido pela força oscilante. Considerando o caso unidimensional, a equação de movimento será [26]

$$m \frac{dv}{dt} = -\alpha v + f(t), \quad (2.1)$$

onde $v = dx/dt$ é a velocidade e x a posição da partícula Browniana de massa m . O primeiro termo do lado direito da equação (2.1) é a força viscosa, que consideramos proporcional a

sua velocidade sendo α uma constante. $f(t)$ é a força aleatória que possui as seguintes propriedades:

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

assumindo que a força devida às moléculas é nula, em média e

$$\langle f(t)f(t') \rangle = B\delta(t - t'), \quad (2.3)$$

considerando que os consecutivos impactos sejam independentes. A equação (2.1), descrita acima, é denominada de *equação de Langevin*. Note que a equação de Langevin (1.1) apresentada no capítulo 1 é uma equação de primeira ordem em x , e a partícula Browniana não é livre mas sujeita a um potencial $V(x)$ e a uma força externa $F(t)$, por esta razão ela é diferente da equação aqui apresentada.



Fig. 2.1: Caminho irregular descrito por uma partícula imersa num líquido.

Na seqüência apresentamos alguns resultados analíticos associados à equação (2.1). Estes resultados são bem conhecidos na literatura [26,27].

Por conveniência escrevemos a equação (2.1) na forma

$$\frac{dv}{dt} = -\gamma v + \zeta(t), \quad (2.4)$$

onde $\gamma = \alpha/m$ e $\zeta(t) = f(t)/m$ é uma variável estocástica dependente do tempo e que possui as propriedades:

$$\langle \zeta(t) \rangle = 0, \quad (2.5)$$

$$\langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle = \Gamma\delta(t - t'), \quad (2.6)$$

sendo $\Gamma = B/m^2$.

A solução para a equação (2.4) é expressa por [26]

$$v = v_0 e^{-\gamma t} + e^{-\gamma t} \int_0^t e^{\gamma t'} \zeta(t') dt', \quad (2.7)$$

onde $v_0 = v(t=0)$. Usando as propriedades (2.5) e (2.6) para $\zeta(t)$ podemos calcular a média e a variância, ou dispersão, da velocidade. Sendo a velocidade média expressa por

$$\langle v \rangle = v_0 e^{-\gamma t}, \quad (2.8)$$

e a variância dada por [27]

$$\langle (v - \langle v \rangle)^2 \rangle = \langle v^2 \rangle - \langle v \rangle^2,$$

temos,

$$\langle v^2 \rangle - \langle v \rangle^2 = \frac{\Gamma}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}). \quad (2.9)$$

Para tempos longos $t \rightarrow \infty$, chamado regime estacionário, temos $\langle v \rangle = 0$ e a velocidade quadrática média expressa por

$$\langle v^2 \rangle = \frac{\Gamma}{2\gamma}. \quad (2.10)$$

A partir da teoria cinética dos gases sabemos que

$$\frac{1}{2} m \langle v^2 \rangle = \frac{1}{2} k_B T, \quad (2.11)$$

então

$$\Gamma = \frac{2\gamma k_B T}{m}, \quad (2.12)$$

como $\Gamma = B/m^2$ e $\gamma = \alpha/m$ temos

$$B = 2\alpha k_B T, \quad (2.13)$$

onde k_B é a constante de Boltzmann. Voltando a equação (2.3), expressamos a função de correlação para a força aleatória $f(t)$ como

$$\langle f(t)f(t') \rangle = 2\alpha k_B T \delta(t - t'). \quad (2.14)$$

Lembrando que $v = dx/dt$, obtemos a seguinte expressão para a função posição

$$x = x_0 + \int_0^t v(t') dt', \quad (2.15)$$

sendo $x_0 = x(t=0)$. Usando a equação (2.7) encontramos [26]

$$x = x_0 + \frac{v_0}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{1}{\gamma} \int_0^t \zeta(t'') (1 - e^{\gamma(t''-t)}) dt''. \quad (2.16)$$

Tendo em vista a condição (2.5), o deslocamento médio da partícula é

$$\langle x \rangle = x_0 + \frac{v_0}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}). \quad (2.17)$$

O desvio quadrático médio é obtido usando as equações (2.16) e (2.17) e expresso na forma

$$\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{\Gamma}{\gamma^2} \left[t - \frac{2}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{1}{2\gamma} (1 - e^{-2\gamma t}) \right]. \quad (2.18)$$

Para tempos longos $t \rightarrow \infty$, obtemos

$$\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{\Gamma}{\gamma^2} t = Dt, \quad (2.19)$$

onde $D = 2k_B T / \alpha$ é o coeficiente de difusão.

Apresentamos também as distribuições de probabilidade no regime estacionário para a velocidade da partícula Browniana [26]

$$\rho(v) = \sqrt{\frac{m}{2\pi k_B T}} e^{-mv^2/2k_B T}, \quad (2.20)$$

onde $v_0 = 0$. Essa é a distribuição de Maxwell para o caso unidimensional. A distribuição de posições é dada por

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi Dt}} e^{-x^2/2Dt}, \quad (2.21)$$

considerando $x_0 = 0$. Veja abaixo a Fig. 2.2 que ilustra a distribuição de probabilidade para um conjunto de trajetórias da partícula Browniana.

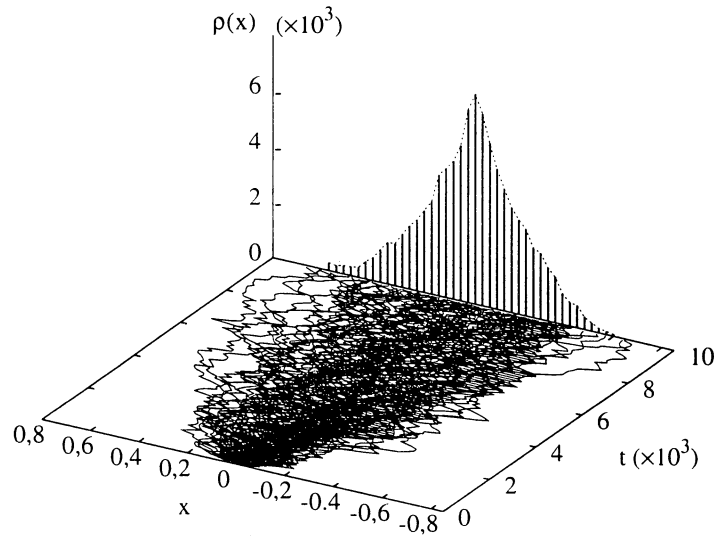


Fig. 2.2: 100 trajetórias representando a dinâmica da partícula Browniana, sendo $\rho(x)$ a densidade de probabilidade não normalizada, em $t=1000$.

2.2 DERIVAÇÃO EXPLÍCITA DA EQUAÇÃO DE LANGEVIN

A derivação explícita de equações de movimento para sistemas interagentes com o “meio” estabelecem condições de validade das equações que muitas vezes são usadas para descrever sistemas complicados. Um grande número de situações na natureza podem ser descritas adequadamente por um sistema interagindo com um “meio” cujo número de graus de liberdade é elevado. A *equação de Langevin* tem sido usada para modelar vários sistemas dessa natureza.

Esta seção é dedicada a uma completa derivação da *equação de Langevin* a partir de uma Hamiltoniana clássica. Trataremos um modelo unidimensional para descrever um sistema interagindo com um “meio” (ou banho térmico) o qual é composto por um grande número (N) de osciladores harmônicos não interagentes, veja Fig. 2.3.

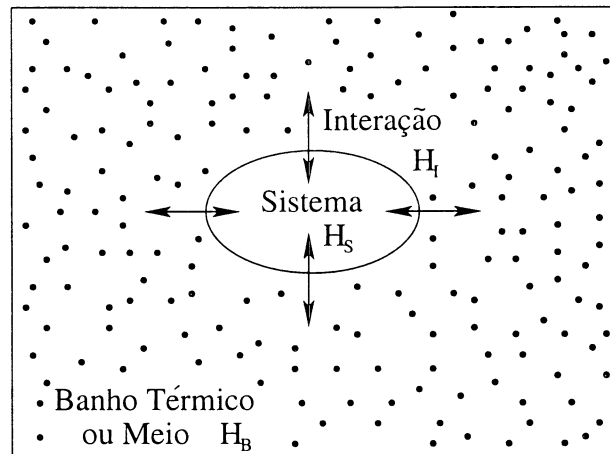


Fig. 2.3: Ilustração para um sistema interagente com um banho térmico.

A Hamiltoniana total é expressa por [28]

$$H = H_S(Q, P) + H_B(\mathbf{q}, \mathbf{p}) + H_I(Q, \mathbf{q}), \quad (2.22)$$

onde

$$H_S(Q, P) = \frac{P^2}{2M} + \mathcal{V}(Q), \quad (2.23)$$

é a Hamiltoniana do sistema na ausência do “meio”, e (Q, P) representam respectivamente a coordenada e o momento conjugado do sistema. A Hamiltoniana do banho térmico é expressa por

$$H_B(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \sum_{j=1}^N \left(\frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{m_j \omega_j^2}{2} q_j^2 \right), \quad (2.24)$$

os q_j e p_j representam a coordenada e momento conjugado do j -ésimo oscilador de frequência ω_j e massa m_j que constitui o banho térmico. A interação entre sistema e “meio” é expressa através da Hamiltoniana

$$H_I(Q, \mathbf{q}) = -\lambda Q \Gamma(\mathbf{q}), \quad (2.25)$$

onde \mathbf{q} representa as coordenadas dos osciladores $\{q_j\}$. O acoplamento do sistema com o banho é linear na coordenada do sistema e de forma mais geral nas coordenadas do banho via uma função analítica $\Gamma(\mathbf{q})$. O parâmetro de acoplamento λ mede a magnitude da interação entre sistema e banho térmico.

As equações de Hamilton [29] para o movimento nas variáveis do sistema são

$$\dot{Q} = \frac{\partial H}{\partial P} = \frac{\partial H_S}{\partial P} = \frac{P}{M}, \quad (2.26)$$

$$\dot{P} = -\frac{\partial H}{\partial Q} = -\frac{\partial \mathcal{V}(Q)}{\partial Q} + \lambda \Gamma(\mathbf{q}). \quad (2.27)$$

Com o objetivo de eliminar as coordenadas do banho nas equações (2.26) e (2.27), consideramos as equações do j -ésimo oscilador harmônico

$$\dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j} = \frac{\partial H_B}{\partial p_j} = \frac{p_j}{m_j}, \quad (2.28)$$

$$\dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j} = -m_j \omega_j^2 q_j + \lambda Q \Gamma_j(\mathbf{q}), \quad (2.29)$$

onde

$$\Gamma_j(\mathbf{q}) \equiv \frac{\partial \Gamma(\mathbf{q})}{\partial q_j}. \quad (2.30)$$

Resolvendo o conjunto de equações diferenciais (2.28) e (2.29) obteremos os $q_j(t)$ para substituir em (2.27). Como $p_j = m_j \dot{q}_j$, reescrevemos o conjunto de equações (2.28) e (2.29) através de uma única equação diferencial dada por

$$m_j \ddot{q}_j = -m_j \omega_j^2 q_j + \lambda Q \Gamma_j(\mathbf{q}). \quad (2.31)$$

Para resolver a equação não homogênea (2.31) utilizaremos o método da variação de parâmetros [30]. A equação homogênea correspondente a equação (2.31) é expressa por

$$\ddot{q}_j + \omega_j^2 q_j = 0, \quad (2.32)$$

cuja solução geral é

$$q_j(t) = c_1 \cos \omega_j t + c_2 \sin \omega_j t. \quad (2.33)$$

Para obter a solução da equação (2.31) devemos substituir as constantes c_1 e c_2 da equação (2.33) por funções $u_1(t)$ e $u_2(t)$, respectivamente. e depois determinar estas funções de modo que a expressão resultante

$$q_j = u_1(t) \cos \omega_j t + u_2(t) \sin \omega_j t, \quad (2.34)$$

seja uma solução da equação não-homogênea (2.31). Para determinar $u_1(t)$ e $u_2(t)$, precisamos substituir o q_j da equação (2.31) pelo q_j da equação (2.34). Para isso procedemos da seguinte forma:

Primeiro derivamos a equação (2.34) para obter

$$\dot{q}_j = \dot{u}_1(t) \cos \omega_j t - u_1(t) \omega_j \sin \omega_j t + \dot{u}_2(t) \sin \omega_j t + u_2(t) \omega_j \cos \omega_j t. \quad (2.35)$$

Impondo que a soma das parcelas que envolvem $\dot{u}_1(t)$ e $\dot{u}_2(t)$ na equação (2.35) seja nula [30]

$$\dot{u}_1(t) \cos \omega_j t + \dot{u}_2(t) \sin \omega_j t = 0, \quad (2.36)$$

ficamos com

$$\dot{q}_j = -u_1(t) \omega_j \sin \omega_j t + u_2(t) \omega_j \cos \omega_j t. \quad (2.37)$$

Derivando novamente, obtemos

$$\ddot{q}_j = -\dot{u}_1(t) \omega_j \sin \omega_j t - u_1(t) \omega_j^2 \cos \omega_j t + \dot{u}_2(t) \omega_j \cos \omega_j t - u_2(t) \omega_j^2 \sin \omega_j t. \quad (2.38)$$

Agora substituímos as equações (2.34) e (2.38) em (2.31). Após agruparmos os termos, obtemos

$$-\dot{u}_1(t) m_j \omega_j \sin \omega_j t + \dot{u}_2(t) m_j \omega_j \cos \omega_j t = \lambda Q \Gamma_j(\mathbf{q}). \quad (2.39)$$

Considerando as equações (2.36) e (2.39), temos assim um sistema de equações que podemos resolver para encontrar as expressões para $\dot{u}_1(t)$ e $\dot{u}_2(t)$. De (2.36) temos

$$\dot{u}_1(t) = -\frac{\dot{u}_2(t) \sin \omega_j t}{\cos \omega_j t}. \quad (2.40)$$

Substituindo (2.40) em (2.39), encontramos

$$\dot{u}_2(t) = \frac{\cos \omega_j t}{m_j \omega_j} \lambda Q \Gamma_j(\mathbf{q}). \quad (2.41)$$

Agora substituindo (2.41) em (2.36), obtemos

$$\dot{u}_1(t) = -\frac{\sin \omega_j t}{m_j \omega_j} \lambda Q \Gamma_j(\mathbf{q}). \quad (2.42)$$

Fazendo a integração das equações (2.41) e (2.42) em $d\tau$ com o intuito de encontrar $u_1(t)$ e $u_2(t)$, temos

$$u_1(t) = - \int_0^t d\tau \frac{\text{sen } \omega_j \tau}{m_j \omega_j} \lambda Q(\tau) \Gamma_j[\mathbf{q}(\tau)] + q_j(0), \quad (2.43)$$

$$u_2(t) = \int_0^t d\tau \frac{\text{cos } \omega_j \tau}{m_j \omega_j} \lambda Q(\tau) \Gamma_j[\mathbf{q}(\tau)] + \frac{p_j(0)}{m_j \omega_j}, \quad (2.44)$$

onde $q_j(0) = u_1(0)$ e $p_j(0)/m_j \omega_j = u_2(0)$ foram encontrados aplicando as condições de contorno $q_j(0)$ e $\dot{q}_j(0)$ em (2.34) e (2.37).

Substituindo (2.43) e (2.44) em (2.34) e agrupando os termos encontramos a solução geral para a equação diferencial não-homogênea (2.31),

$$q_j(t) = q_j(0) \text{cos } \omega_j t + \frac{p_j(0)}{m_j \omega_j} \text{sen } \omega_j t + \lambda \int_0^t d\tau \frac{\text{sen } \omega_j (t - \tau)}{m_j \omega_j} Q(\tau) \Gamma_j[\mathbf{q}(\tau)]. \quad (2.45)$$

Uma interpretação subsequente dos resultados requer que integremos a equação (2.45) por partes para obter

$$\begin{aligned} q_j(t) = & q_j(0) \text{cos } \omega_j t + \frac{p_j(0)}{m_j \omega_j} \text{sen } \omega_j t + \lambda D_j(\mathbf{q}; t, t) Q(t) \\ & - \lambda D_j(\mathbf{q}; t, 0) Q(0) - \lambda \int_0^t d\tau D_j(\mathbf{q}; t, \tau) \dot{Q}(\tau), \end{aligned} \quad (2.46)$$

onde

$$D_j(\mathbf{q}; t, \tau) \equiv \int^\tau d\tau' \frac{\text{sen } \omega_j (t - \tau')}{m_j \omega_j} \Gamma_j[\mathbf{q}(\tau')]. \quad (2.47)$$

A dependência de D_j e Γ_j em \mathbf{q} serve para lembrar que as equações (2.45) e (2.46) são em geral equações integrais relacionando $\mathbf{q}(t)$ com sua história anterior. Para utilizar esses resultados formalmente devemos transformar as expressões implícitas em expressões explícitas. Para uma interação bilinear entre sistema e banho, Γ_j é independente de \mathbf{q} e a equação (2.46) torna-se uma solução explícita.

Em um acoplamento bilinear entre sistema e banho térmico, temos

$$\Gamma(\mathbf{q}) = \sum_{j=1}^N \Gamma_j q_j, \quad (2.48)$$

onde Γ_j é uma constante. Logo,

$$\Gamma_j(\mathbf{q}) = \frac{\partial \Gamma(\mathbf{q})}{\partial q_j} = \Gamma_j.$$

Deste modo a equação (2.47) fica (escolhendo o limite inferior apropriadamente)

$$D_j(t - \tau) = \frac{\Gamma_j}{m_j \omega_j^2} \cos[\omega_j(t - \tau)]. \quad (2.49)$$

Neste caso a equação (2.46) torna-se

$$q_j(t) = \frac{\lambda \Gamma_j}{m_j \omega_j^2} Q(t) + \left[q_j(0) - \frac{\lambda \Gamma_j}{m_j \omega_j^2} Q(0) \right] \cos \omega_j t + \frac{p_j(0)}{m_j \omega_j} \sin \omega_j t - \frac{\lambda \Gamma_j}{m_j \omega_j^2} \int_0^t d\tau \cos[\omega_j(t - \tau)] \dot{Q}(\tau). \quad (2.50)$$

Aplicando essa solução explícita em (2.48) ficamos com

$$\Gamma(\mathbf{q}) = \sum_{j=1}^N \Gamma_j \left\{ \frac{\lambda \Gamma_j}{m_j \omega_j^2} Q(t) + \left[q_j(0) - \frac{\lambda \Gamma_j}{m_j \omega_j^2} Q(0) \right] \cos \omega_j t + \frac{p_j(0)}{m_j \omega_j} \sin \omega_j t - \frac{\lambda \Gamma_j}{m_j \omega_j^2} \int_0^t d\tau \cos[\omega_j(t - \tau)] \dot{Q}(\tau) \right\}. \quad (2.51)$$

Substituindo a expressão (2.51) em (2.27) para obtermos a equação do sistema

$$\dot{P}(t) = -\frac{\partial \mathcal{V}(Q)}{\partial Q} + \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{\lambda^2 \Gamma_j^2}{m_j \omega_j^2} Q(t) + \lambda \Gamma_j \left[q_j(0) - \frac{\lambda \Gamma_j}{m_j \omega_j^2} Q(0) \right] \cos \omega_j t + \lambda \Gamma_j \frac{p_j(0)}{m_j \omega_j} \sin \omega_j t - \frac{\lambda^2 \Gamma_j^2}{m_j \omega_j^2} \int_0^t d\tau \cos[\omega_j(t - \tau)] \dot{Q}(\tau) \right\}. \quad (2.52)$$

Podemos escrever

$$\dot{P}(t) + \frac{\partial H_S^{(m)}}{\partial Q} = - \int_0^t d\tau K(t - \tau) \dot{Q}(\tau) + f(t), \quad (2.53)$$

onde a memória dissipativa é representada por

$$K(t - \tau) = \sum_{j=1}^N \frac{\lambda^2 \Gamma_j^2}{m_j \omega_j^2} \cos \omega_j(t - \tau), \quad (2.54)$$

e a força flutuante dada por

$$f(t) = \sum_{j=1}^N \lambda \Gamma_j \left\{ \left[q_j(0) - \frac{\lambda \Gamma_j}{m_j \omega_j^2} Q(0) \right] \cos \omega_j t + \frac{p_j(0)}{m_j \omega_j} \sin \omega_j t \right\}. \quad (2.55)$$

Introduzimos a “Hamiltoniana do sistema modificada”

$$H_S^{(m)}(Q, P) \equiv \frac{P^2}{2M} + \mathcal{V}(Q) - \lambda^2 \sum_{j=1}^N \frac{\Gamma_j^2}{2m_j \omega_j^2} Q^2(t). \quad (2.56)$$

A equação integro-diferencial (2.53), chamada de *equação de Langevin generalizada*, descreve o movimento de uma partícula Browniana. O lado direito mostra a força líquida

exercida sobre a partícula devida às outras partículas, ou seja, ao banho térmico. O primeiro termo representa a força dissipativa apresentando efeito de memória, dependente da história passada do movimento da partícula Browniana. O segundo termo representa a força flutuante dependente do estado inicial do banho de osciladores. A integração desta equação de movimento não é factível, já que não há maneira de achar as posições e velocidades de todas as partículas do banho, pois o estado dinâmico inicial do sistema é inacessível. Deste modo, o sistema haverá de comportar-se, no nível estritamente microscópico, de forma diferente para cada novo experimento, já que não temos controle sobre o estado dinâmico inicial. Assim, não possuindo uma especificação precisa do estado inicial do sistema, precisamos recorrer à introdução de hipóteses adicionais de carácter não mecânico, na forma de hipóteses estatísticas sobre o comportamento da força flutuante $f(t)$, que então passa a ser referida como força estocástica ou “ruído” térmico.

Para uma interpretação estocástica da força flutuante $f(t)$, consideramos que em $t = 0$ o banho está em equilíbrio na presença do sistema. Assumimos que $q_j(0)$ e $p_j(0)$ são distribuídos de acordo com a distribuição canônica [27]

$$P[\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0)] = Z^{-1} e^{-\beta H_B^{(m)}}, \quad (2.57)$$

onde $\beta = 1/k_B T$, Z é função de partição canônica e $H_B^{(m)}$ é a “Hamiltoniana do banho modificada”

$$H_B^{(m)} = \sum_{j=1}^N \left[\frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{m_j \omega_j^2}{2} \left(q_j - \lambda \frac{\Gamma_j Q}{m_j \omega_j^2} \right)^2 \right]. \quad (2.58)$$

Considerando a distribuição (2.57) calculamos [veja o apêndice A] o valor médio e a função de correlação [31] para a força flutuante $f(t)$ onde obtemos

$$\langle f(t) \rangle = 0, \quad (2.59)$$

e

$$\langle f(t) f(\tau) \rangle = k_B T \sum_{j=1}^N \frac{\lambda^2 \Gamma_j^2}{m_j \omega_j^2} \cos \omega_j(t - \tau). \quad (2.60)$$

Comparando as equações (2.60) e (2.54) expressamos o teorema da Flutuação-Dissipação [31, 32] para a força $f(t)$, relacionando a intensidade da força flutuante com a temperatura do banho e com a força dissipativa,

$$\langle f(t) f(\tau) \rangle = k_B T K(t - \tau). \quad (2.61)$$

Esta é uma completa derivação da *equação de Langevin* não Markoviana, pois o termo dissipativo contém uma função memória $K(t - \tau)$. Esta função descreve a memória entre

sucessivos impactos da partícula Browniana com o banho térmico. Para uma escolha especial de frequências e constantes de acoplamento Γ_j [33, 34], podemos obter uma equação que é aproximadamente Markoviana. Supondo a existência de infinitos osciladores ($N \rightarrow \infty$) compondo o banho térmico, com uma distribuição de frequências tratada como um contínuo, além disso, considerando que o momento do sistema varia suficientemente pouco em relação a uma frequência típica do banho, então uma função delta de Dirac pode ser usada como uma aproximação para a equação (2.54).

$$K(t - \tau) \simeq \alpha \delta(t - \tau), \quad (2.62)$$

sendo α uma constante. Eliminando o efeito de memória obtemos uma aproximação Markoviana para a equação (2.53) dada por

$$\dot{P}(t) = -\frac{\partial \mathcal{V}(Q)}{\partial Q} - \alpha \dot{Q}(t) + f(t). \quad (2.63)$$

Lembrando que $P(t)/M = \dot{Q}(t)$, usando $\dot{Q}(t) = v$, considerando o primeiro termo do lado direito nulo e fazendo $f(t) = \zeta(t)$, recuperamos a *equação de Langevin* (2.4) para o movimento Browniano vista na seção anterior,

$$\frac{dv}{dt} = -\gamma v + \zeta(t), \quad (2.64)$$

onde $dv/dt = \dot{v}$, $\gamma = \alpha/M$ é a constante de viscosidade e $\zeta(t)$ é a força estocástica dividida por M .

O precedente desenvolvimento mostrou como é possível obter a *equação de Langevin generalizada* (2.53) e também sua aproximação Markoviana a partir de uma Hamiltoniana clássica microscópica.

3

MODELO

Nesse capítulo apresentamos a descrição do modelo teórico usado para simular o efeito de transporte de uma partícula interagente com um “meio”. Diferentemente dos modelos usuais que utilizam a *equação de Langevin* para descrever tais sistemas, propomos nesse capítulo uma descrição através de um conjunto de equações diferenciais acopladas.

3.1 EQUAÇÕES DE MOVIMENTO

As equações de movimento são obtidas a partir de uma Hamiltoniana clássica que descreve um sistema interagente com um “meio” composto por N osciladores harmônicos independentes. Tratamos o problema unidimensional que é descrito pela Hamiltoniana [16]

$$H = H_S + H_M + H_I, \quad (3.1)$$

onde

$$H_S = \frac{P^2}{2M} + \mathcal{V}(X), \quad (3.2)$$

é a Hamiltoniana do sistema isolado, onde X , P e M são, respectivamente, coordenada, momento linear e massa da partícula. $\mathcal{V}(X)$ é o potencial periódico assimétrico [18] expresso por

$$\mathcal{V}(X) = \mathcal{V}_1 - \mathcal{V}_0 \operatorname{sen} 2\pi \frac{(X - X_0)}{L} - \frac{\mathcal{V}_0}{4} \operatorname{sen} 4\pi \frac{(X - X_0)}{L}, \quad (3.3)$$

com período L , amplitude \mathcal{V}_0 e constante arbitrária \mathcal{V}_1 . O potencial é deslocado por um valor X_0 de forma que o mínimo localiza-se na origem.

A Hamiltoniana

$$H_M = \frac{1}{2} \sum_j^N \left(\frac{p_j^2}{m_j} + m_j \omega_j^2 x_j^2 \right), \quad (3.4)$$

descreve o “meio”, constituído por N osciladores harmônicos independentes. Os x_j e p_j representam a coordenada e momento linear do j -ésimo oscilador de frequência ω_j e massa m_j . Temos ainda

$$H_I = - \sum_j^N \left(\lambda \Gamma_j x_j X - \frac{\lambda^2 \Gamma_j^2}{2m_j \omega_j^2} X^2 \right), \quad (3.5)$$

que é a Hamiltoniana de interação entre sistema e “meio”. O primeiro termo representa o acoplamento bilinear (linear em ambas coordenadas X e x_j) entre sistema e “meio”, o segundo termo é introduzido a fim de compensar efeitos de renormalização de frequência induzidos pelo primeiro termo [32]. Os parâmetros λ e Γ_j fornecem a amplitude da interação. Por conveniência, reescrevemos a Hamiltoniana (3.1) na forma

$$H = \frac{P^2}{2M} + \sum_j^N \frac{p_j^2}{2m_j} + \mathcal{V}_{ef}(X, \mathbf{x}), \quad (3.6)$$

onde

$$\mathcal{V}_{ef}(X, \mathbf{x}) = \mathcal{V}(X) + \frac{1}{2} \sum_j^N m_j \omega_j^2 \left(x_j - \frac{\lambda \Gamma_j}{m_j \omega_j^2} X \right)^2 \quad (3.7)$$

é o potencial efetivo do sistema composto e o vetor \mathbf{x} representa as coordenadas do banho $\{x_j\}$. Considerando a Hamiltoniana (3.6) as equações de Hamilton para o sistema são

$$\dot{X} = \frac{\partial H}{\partial P} = \frac{P}{M}, \quad (3.8)$$

$$\dot{P} = - \frac{\partial H}{\partial X} = - \frac{\partial \mathcal{V}_{ef}(X, \mathbf{x})}{\partial X}, \quad (3.9)$$

e para o “meio” são

$$\dot{x}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j} = \frac{p_j}{m_j}, \quad (3.10)$$

$$\dot{p}_j = - \frac{\partial H}{\partial x_j} = - \frac{\partial \mathcal{V}_{ef}(X, \mathbf{x})}{\partial x_j}. \quad (3.11)$$

As equações acima (3.8 - 3.11) compõem um sistema conservativo que não exhibe o transporte da partícula. Considerando a discussão apresentada no capítulo 1, Magnasco sugere a presença de uma força externa dependente do tempo para governar o movimento direcionado da partícula através dos múltiplos poços do potencial assimétrico. Fazendo a correspondência entre a descrição apresentada neste capítulo e a descrição proposta por Magnasco (ver capítulo 1), devemos acrescentamos ao sistema isolado uma força externa dependente do tempo, que expressamos por

$$F_{ext}(t) = F_0 \cos \omega_E t, \quad (3.12)$$

com média zero, amplitude F_0 e frequência ω_E . Obtemos assim as equações para o sistema

$$\dot{X} = \frac{P}{M}, \quad (3.13)$$

$$\dot{P} = -\frac{d\mathcal{V}(X)}{dX} + \sum_j^N \left(\lambda \Gamma_j x_j - \frac{\lambda^2 \Gamma_j^2}{m_j \omega_j^2} X \right) + F_0 \cos \omega_E t, \quad (3.14)$$

e para o “meio”

$$\dot{x}_j = \frac{p_j}{m_j}, \quad (3.15)$$

$$\dot{p}_j = -m_j \omega_j^2 x_j + \lambda \Gamma_j X. \quad (3.16)$$

Por conveniência, definimos as variáveis adimensionais [18]

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

A frequência ω_0 é expressa através de

$$\omega_0^2 = \frac{4\pi^2 \mathcal{V}_0 \delta}{ML^2}, \quad (3.17)$$

onde δ é definido por

$$\delta = \sin 2\pi |X'_0| + \sin 4\pi |X'_0|.$$

A frequência ω_0 é a frequência do movimento da partícula em torno do mínimo do potencial periódico assimétrico, equação (3.3).

Reescrevendo as equações de movimento (3.13 - 3.16) em termos das variáveis adimensionais, já omitindo o índice *linha* das variáveis, temos

$$\dot{X} = V, \quad (3.18)$$

$$\dot{V} = -\frac{d\mathcal{V}(X)}{dX} + \sum_{j=1}^N \gamma_j x_j - X \sum_{j=1}^N \frac{\gamma_j^2}{m_j \omega_j^2} + F \cos \omega t, \quad (3.19)$$

$$\dot{x}_j = v_j . \quad (3.20)$$

$$\dot{v}_j = -\omega_j^2 x_j + \frac{\gamma_j}{m_j} X , \quad (3.21)$$

onde o potencial adimensional (potencial (3.3) dividido por $ML^2\omega_0^2$), mostrado na Fig. 3.1, é dado por

$$\mathcal{V}(X) = \mathcal{C} - \frac{1}{4\pi^2\delta} \left[\text{sen } 2\pi(X - X_0) + \frac{1}{4} \text{sen } 4\pi(X - X_0) \right] . \quad (3.22)$$

Para que $\mathcal{V}(0) = 0$ devemos ter $\mathcal{C} = -\frac{1}{4\pi^2\delta} \left[\text{sen } 2\pi X_0 + \frac{1}{4} \text{sen } 4\pi X_0 \right]$. 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 consideramos $L = 1$. Com isso temos $\delta \simeq 1,6$, e $\mathcal{C} \simeq 0,0173$. Os mínimos deste potencial estão localizados em

$$X_{min} = n \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \dots),$$

e os máximos localizados em

$$X_{max} = -0,38 + n \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \dots).$$

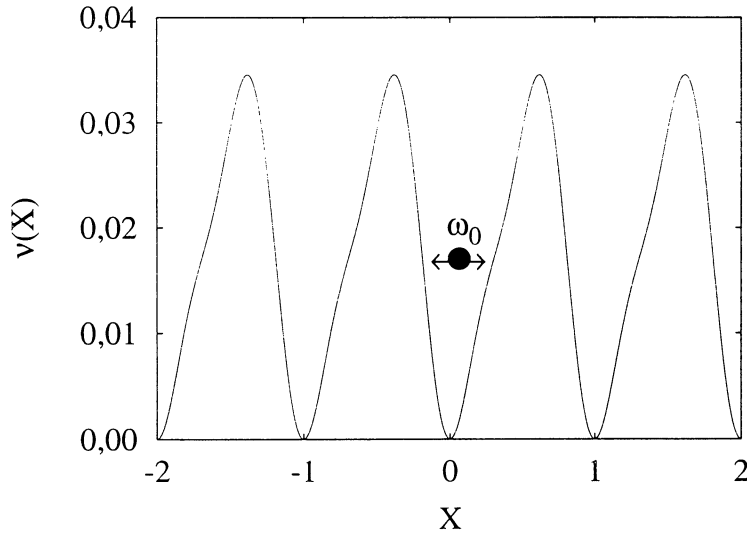


Fig. 3.1: O potencial assimétrico $\mathcal{V}(X)$, ilustrando a frequência ω_0 da partícula em torno do mínimo do potencial. A derivada segunda do potencial adimensional em $X_{min} = n$ é igual a 1.

Uma situação física capaz de ilustrar uma partícula movendo-se sob a ação de um potencial assimétrico $\mathcal{V}(X)$, e uma força externa dependente do tempo $F_{ext}(t)$, e ainda interagindo com um “meio”, pode ser idealizada através da Fig. 3.2. O potencial assimétrico, neste caso, é descrito por uma superfície assimétrica e a força externa dependente do tempo pode ser, por exemplo, um campo elétrico oscilatório. O “meio” seria descrito por um gás envolvendo toda superfície e interagindo com a partícula. O movimento direcionado da partícula ocorre devido à ação conjunta da assimétrica espacial da superfície mais a força externa dependente do tempo. A partícula fica movimentando-se de um lado à outro, devido o campo oscilatório, mas com o passar do tempo um movimento líquido (por exemplo, para direita) poderá ser observado.

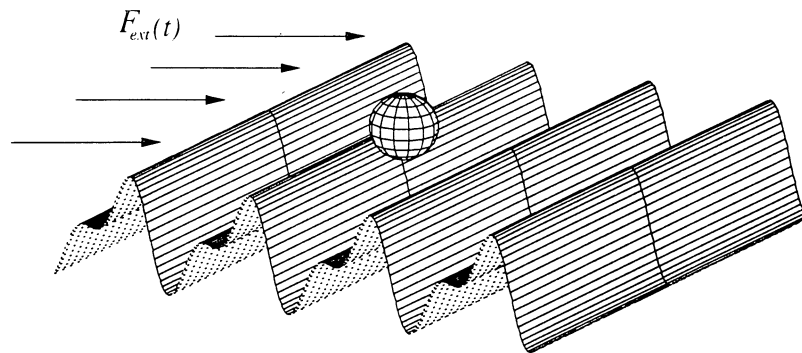


Fig. 3.2: Ilustração mostrando uma partícula movendo-se sob ação de um campo externo (dependente do tempo) através de uma superfície assimétrica.

A dinâmica da partícula do sistema, descrita pelas equações (3.18 - 3.21) é bastante complexa devido ao acoplamento com os osciladores do “meio”. O potencial efetivo que atua sobre a partícula tem uma forma bastante particular que depende do número de osciladores como também dos valores das condições iniciais de cada oscilador. Os resultados numéricos que exibem essa dinâmica serão apresentados no próximo capítulo. Na seção seguinte apresentamos alguns exemplos da dinâmica da partícula para o caso mais simples, onde eliminamos o acoplamento com os osciladores.

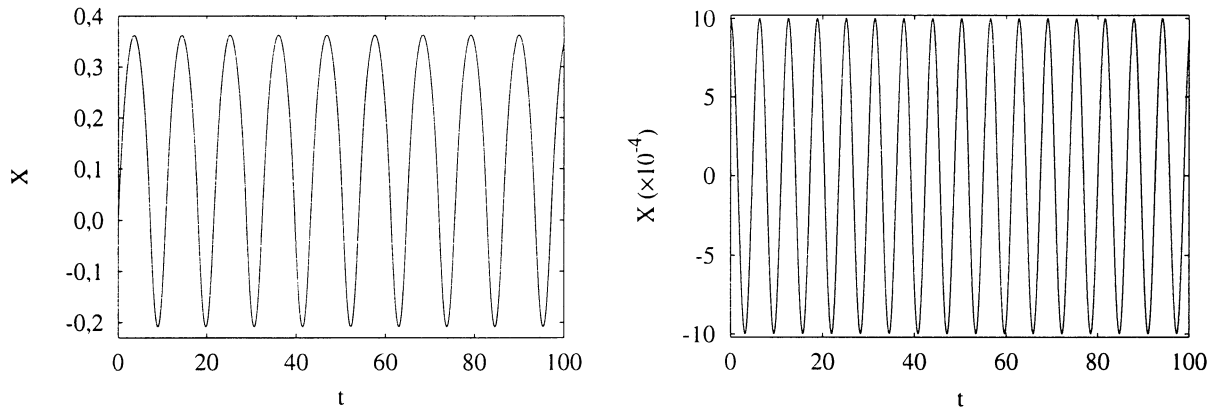
3.2 TRANSPORTE NA AUSÊNCIA DO “MEIO”

Quando tomamos $\gamma_j = 0$, na equação (3.19), eliminamos o acoplamento entre o sistema e os osciladores do “meio”. A dinâmica do sistema é então governada pelas equações

$$\dot{X} = V, \quad (3.23)$$

$$\dot{V} = \frac{1}{4\pi\delta} (2 \cos 2\pi(X - X_0) + \cos 4\pi(X - X_0)) + F \cos \omega t. \quad (3.24)$$

Considerando o caso para o qual $F = 0$, o problema é reduzido a sua forma mais simples. Quando a energia total da partícula é menor do que o valor máximo da energia potencial, sua trajetória fica restrita às oscilações periódicas em torno do valor mínimo do potencial assimétrico, veja Fig. 3.3 e observe que para uma amplitude menor de oscilação (Fig. 3.3 (b)) o período do movimento é 2π .



(a) Parametros: $X_i = 0$; $V_i = 0,2$ e $F = 0$.

(b) Parametros: $X_i = 1 \times 10^{-3}$; $V_i = 0$ e $F = 0$.

Fig. 3.3: Movimento oscilatório da partícula em torno do valor mínimo do potencial assimétrico, onde (a) e (b) exibem diferentes amplitudes de oscilação.

A Fig. 3.4 mostra, simultaneamente, o potencial assimétrico (plano $\mathcal{V}(X) \times X$ em $t = 0$) e o movimento oscilatório da partícula em torno do mínimo do potencial, correspondente a Fig. 3.3 (a) (plano $X \times t$ em $\mathcal{V}(X) = 0$).

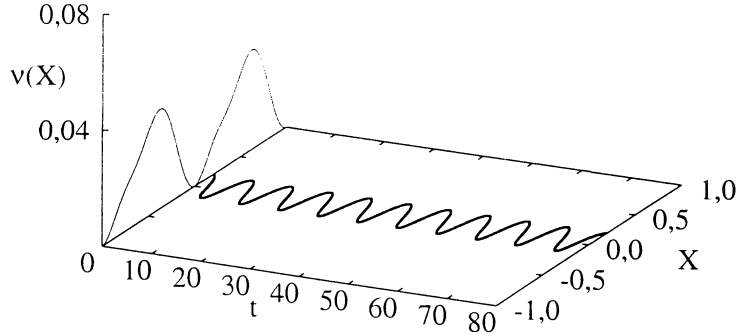


Fig. 3.4: Potencial assimétrico (3.22) \times oscilações da partícula em torno do valor mínimo do potencial assimétrico.

Quando $F \neq 0$ a partícula é então governada pela força externa, oscilando de acordo com a frequência ω através dos múltiplos poços do potencial assimétrico, um movimento direcionado então pode ser obtido. No entanto, a dinâmica desse movimento direcionado não depende somente da frequência e amplitude da força externa mas também das condições iniciais da partícula, ou seja, de sua velocidade e posição iniciais. Dependendo destes valores podemos ter um movimento direcionado para direita ou para esquerda, ou ainda não ter nenhum movimento direcionado, ou seja, a partícula pode ficar oscilando em torno de um determinado ponto ao longo do tempo. Com objetivo de ilustrar essas diferentes situações, integramos numericamente as equações (3.23) e (3.24) usando o algoritmo de Runge-Kutta quarta ordem [35]. Na Fig. 3.5 podemos observar, simultaneamente, o potencial assimétrico (plano $\mathcal{V}(X) \times X$ em $t = 0$) e duas trajetórias mostrando o movimento direcionado da partícula através dos múltiplos poços do potencial assimétrico (plano $X \times t$ em $\mathcal{V}(X) = 0$). A Fig. 3.6 mostra a dependência da trajetória para diferentes valores da velocidade e posição inicial da partícula, onde representamos respectivamente por V_i e X_i (o sub índice i indica que estamos nos referindo às condições iniciais). A partícula está localizada inicialmente em $X_i = 0,0$, onde o potencial é nulo e a velocidade inicial determina a orientação do movimento. Se por exemplo, $V_i = 0,0$ inicialmente (veja Fig. 3.6 (a)), a força externa induz uma oscilação da partícula (com frequência ω e período de movimento igual a $2\pi/\omega$) entre $X = 0$ e $X \simeq 50$ o que corresponde a uma oscilação sobre aproximadamente 50 poços do potencial assimétrico da Fig. 3.1. Neste caso, a partícula não demonstra nenhuma direção preferencial.

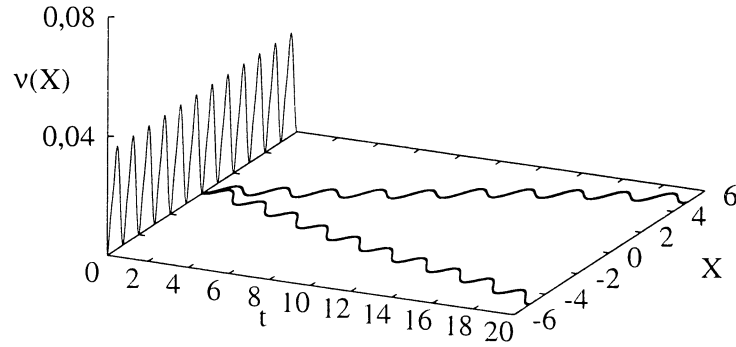


Fig. 3.5: Potencial assimétrico (3.22) \times trajetória da partícula através dos múltiplos poços do potencial assimétrico.

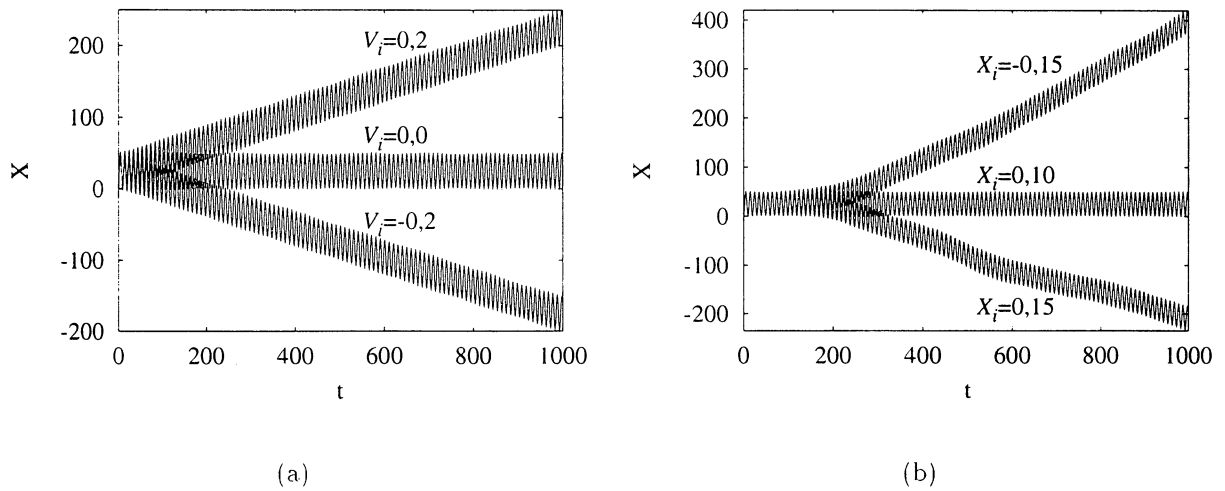


Fig. 3.6: (a) posição inicial $X_i = 0,0$ e (b) velocidade inicial $V_i = 0,0$. Em ambos os casos foram mantidos fixos os valores $F = 10$ e $\omega = 0,63$, com período das oscilações $\simeq 10$.

Para uma condição inicial $V_i = +0,2$, observamos na Fig. 3.6(a) que a partícula ainda oscila sobre aproximadamente 50 poços do potencial assimétrico entretanto, apresenta um movimento preferencial no sentido positivo do eixo- x . ou seja, para a direita. O pequeno “empurrão” inicial para a direita foi suficiente para que se observe o efeito do potencial assimétrico sobre o movimento, criando assim um transporte da partícula para a direita. Um transporte para a esquerda pode ser obtido quando $V_i = -0,2$ (ver Fig. 3.6(a)). Na Fig. 3.6(b) observamos o mesmo efeito, entretanto, agora com $V_i = 0,0$ e para três diferentes localizações da partícula no potencial assimétrico: $X_i = 0,15$, à direita do mínimo $X = 0,0$

e portanto recebe um “empurrão” para a esquerda; $X_i = -0,15$, à esquerda do mínimo, (“empurrão” para a direita): $X_i = 0,10$ próximo ao mínimo. Chamamos atenção para o fato que em $X_i = 0,10$ não observamos transporte no tempo calculado. Neste caso, ainda estamos muito próximos do mínimo e o “empurrão” para a esquerda ainda não é suficiente para produzir transporte.

A dependência da trajetória para diferentes valores da amplitude e frequência da força externa é mostrada na Fig. 3.7. onde fixamos o valor para velocidade inicial em $V_i = 0,0$ e a posição inicial em $X_i = 0,2$. Na Fig. 3.7(a) observamos que um direcionamento da trajetória é associado ao valor da amplitude da força externa. Neste caso a posição inicial da partícula é $X_i = 0,2$, num ponto à direita do mínimo $X = 0,0$, e portanto a partícula recebe um “empurrão” para a esquerda. Quando $F = 4$ a partícula tem um movimento preferencial para a esquerda (ver Fig. 3.7(a)), conforme esperado devido ao “empurrão” inicial. Entretanto, para intensidades maiores, $F = 10$ e $F = 15$, transporte para a direita ou ausência de transporte são observados, respectivamente.

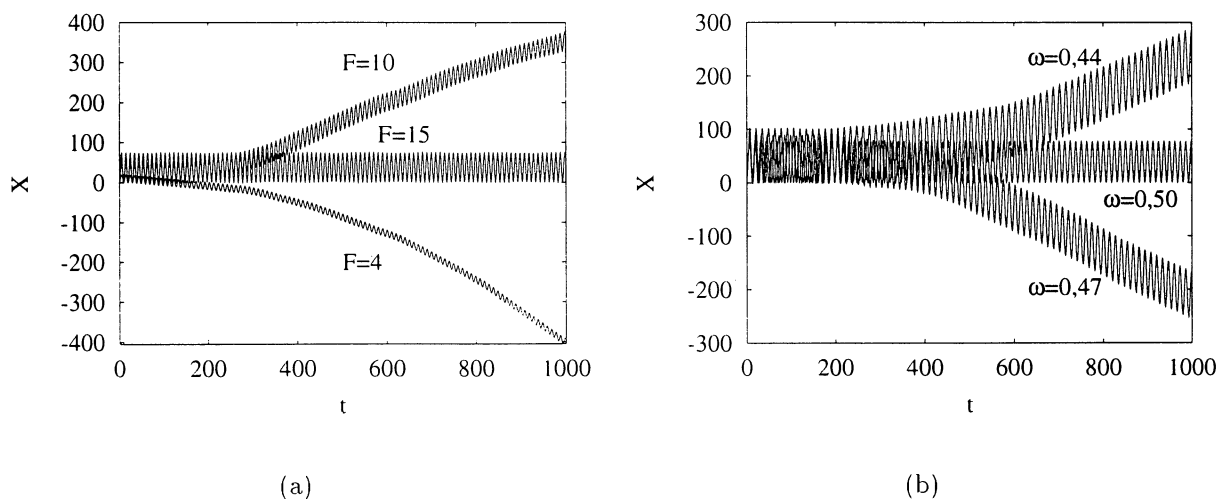


Fig. 3.7: (a) Frequência da força externa $\omega = 0,63$ e posição inicial $X_i = 0,2$; (b) a amplitude da força externa é fixa com valor $F = 10$ e a posição inicial é $X_i = 0,2$.

É interessante perceber que a amplitude do movimento em X cresce com o aumento da amplitude da força externa F . Veja que para $F = 4$ a partícula oscila sobre aproximadamente 20 mínimos do potencial. Para $F = 10$ as oscilações da partícula ocorrem sobre aproximadamente 50 mínimos do potencial, enquanto que para $F = 15$ as oscilações ocorrem sobre 80 mínimos do potencial assimétrico. Um efeito semelhante, ao apresentado na Fig. 3.7(a), pode ser observado na Fig. 3.7(b), onde a dependência temporal da posição da partícula é observada para diferentes valores da frequência da força externa. Quando $\omega = 0,44$ ($0,47$) observamos transporte para a direita (esquerda) e quando $\omega = 0,50$ não ocorre transporte.

Esta figura também exibe uma pequena variação na amplitude das oscilações em X para as diferentes frequências, embora seja pouco perceptível na escala apresentada, a amplitude das oscilações diminui com o aumento da frequência.

Através destes exemplos podemos ter uma idéia do quanto é complexa a dependência da dinâmica da partícula em relação as diversas variáveis do problema, mesmo para o caso em que o acoplamento com os osciladores do “meio” é omitido.

4

SIMULAÇÕES NUMÉRICAS

Esse capítulo reúne os resultados numéricos obtidos para o efeito de transporte, e de troca de energia do sistema com os osciladores, que inicialmente foram propostos. Também apresentamos uma breve discussão dos resultados.

4.1 TRATAMENTO NUMÉRICO

O procedimento usado para obtenção dos resultados consiste na integração numérica das equações de movimento (3.18 - 3.21), apresentadas no capítulo anterior. Precisamente integramos numericamente um conjunto de $2N + 2$ equações, expressas por

$$\begin{aligned}\dot{X} &= V , \\ \dot{V} &= -\frac{d\mathcal{V}(X)}{dX} + \sum_{j=1}^N \gamma_j x_j - X \sum_{j=1}^N \frac{\gamma_j^2}{m_j \omega_j^2} + F \cos \omega t , \\ \dot{x}_j &= v_j , \\ \dot{v}_j &= -\omega_j^2 x_j + \frac{\gamma_j}{m_j} X .\end{aligned}\tag{4.1}$$

$(j = 1, 2, 3, \dots, N)$

Utilizamos o algoritmo Runge-Kutta quarta ordem [35] com passo fixo $\Delta t = 10^{-3}$. As equações de movimento a serem integradas, além de serem numerosas devido ao número de osciladores do “meio”, contém vários parâmetros (adimensionais) que devem assumir um valor numérico: $2N + 2$ condições iniciais, N frequências ω_j , N massas m_j , N acoplamentos γ_j , e os valores para amplitude, F , e frequência, ω , da força externa. O grande número de graus de liberdade nos parâmetros torna o sistema analisado ainda mais complexo.

Os valores para frequência ω_j , posição inicial $x_j^{(i)}$ e velocidade inicial $v_j^{(i)}$ dos osciladores são dados através de duas diferentes distribuições [35]. Uma distribuição do tipo Debye [36] (com frequência de corte $\omega_c \simeq 0,76$), mostrada na Fig. 4.1 (a) foi usada para as frequências dos osciladores, já para posição usamos uma distribuição aproximadamente constante como mostra a Fig. 4.1 (b), sendo a distribuição de velocidade análoga à distribuição de posição. Os valores para posição inicial e velocidade inicial da partícula do sistema, são dados por $X_i = 0,0$ e $V_i = 0,2$, respectivamente (exceto para subseção 4.3.3).

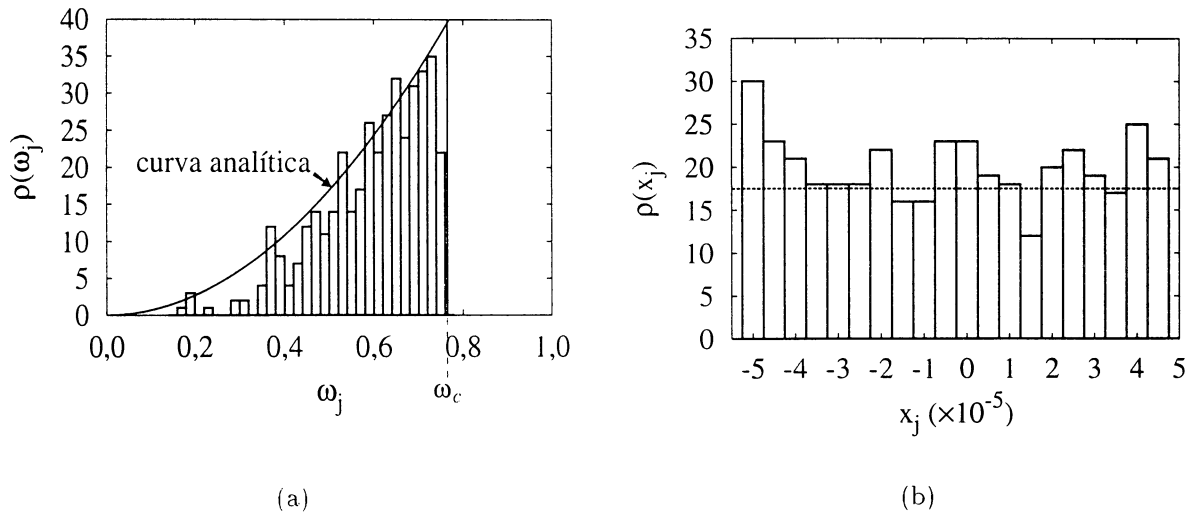


Fig. 4.1: (a) Densidade de frequência \times frequência. (b) Densidade de posição inicial \times posição inicial.

Para os demais parâmetros foram atribuídos diferentes valores para as diferentes situações analisadas. As simulações numéricas foram realizadas para inúmeras combinações destes parâmetros, tentando estudar ao máximo a dinâmica no “espaço de parâmetros”. Diferentes comportamentos foram obtidos com a variação desses parâmetros. Neste trabalho, somente algumas destas combinações serão apresentadas.

O estudo numérico das equações de movimento foi realizado para três casos distintos:

(I) Quando a massa da partícula (do sistema) é maior que a massa dos osciladores,

$$m_j = 0,1.$$

(II) Quando a massa dos osciladores for maior que a massa da partícula,

$$m_j = 10.$$

(III) Quando a massa da partícula é muito maior que a massa dos osciladores,

$$m_j = 0,01,$$

onde m_j é a razão entre a massa dos osciladores e a massa da partícula (do sistema). Para esses três casos foi verificado o efeito de transporte, onde estudamos o comportamento dinâmico da partícula através de sua posição média $\langle X(t) \rangle$. Esta média é calculada sobre 100 trajetórias diferentes (50 trajetórias para o caso (III)), onde para cada uma delas foi inicializada uma nova distribuição para frequência ω_j , posição inicial $x_j^{(i)}$ e velocidade inicial $v_j^{(i)}$ dos osciladores. Em cada instante de tempo fixo, chamado t_k , obtemos um valor para a posição média que é denotado por X_k e expresso por

$$X_k = \frac{1}{100} \sum_{i=1}^{100} X_i(t_k). \quad (4.2)$$

Além do efeito de transporte estudamos também o efeito de troca de energia entre sistema e osciladores, onde é observada a dissipação de energia do sistema, na situação onde é nula a força externa (3.12), $F_{ext} = 0$, e o sistema total é conservativo. Este estudo foi realizado para diferentes números N de osciladores do “meio”. Observamos como variam no tempo as energias: do sistema E_S , dos osciladores E_O e a energia de interação E_I , enquanto a energia total E_T permanece constante. Foram calculados os valores médios para as energias $\langle E(t) \rangle$, de forma análoga a média obtida para a posição,

$$E_k = \frac{1}{100} \sum_{i=1}^{100} E_i(t_k). \quad (4.3)$$

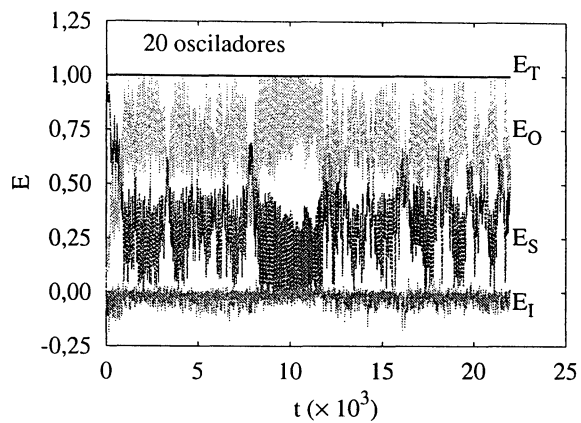
Esse estudo das trocas de energia, foi realizado para os casos (I) e (II).

4.2 FLUXO DE ENERGIA ($F_{ext} = 0$)

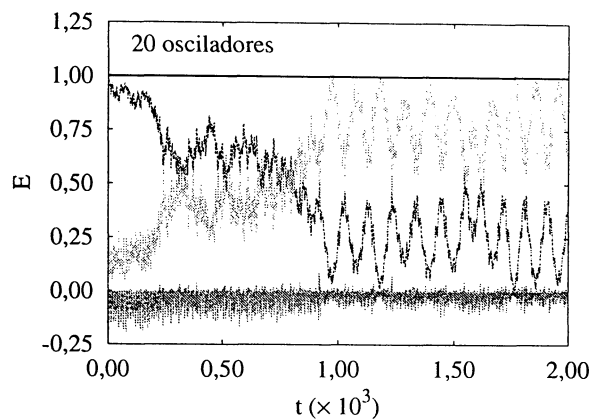
Nesta seção apresentamos os resultados referentes ao processo de troca e dissipação de energia do sistema através da interação com os osciladores que compõem o “meio”. Com o objetivo de entender o processo dissipativo, inicialmente mostramos uma figura referente a uma única trajetória, Fig. 4.2, visto que a análise do processo dissipativo como função do número de osciladores é realizada através de um cálculo médio sobre 100 trajetórias (4.3), e será apresentada logo na seqüência.

Na Fig. 4.2(a) é mostrada a evolução temporal da energia do sistema E_S , dos osciladores E_O e da interação E_I , enquanto a energia total E_T permanece constante. As equações (3.1), (3.2), (3.4) e (3.5) referem-se respectivamente às energias total, do sistema, dos osciladores e interação. Consideramos os valores adimensionais para as energias, onde dividimos todos os valores pela energia total, deste modo a energia total é igual a unidade e as energias do sistema, dos osciladores e da interação são frações da unidade. Utilizamos os parâmetros adimensionais $\gamma_j = 2,5 \times 10^{-2}$ para a intensidade do acoplamento entre sistema e osciladores, $m_j = 0,1$ para a razão entre a massa dos osciladores e a massa da partícula, e $N = 20$ osciladores. No instante inicial $t = 0$ a interação é nula, $E_I = 0$, e o sistema possui uma energia aproximadamente igual a energia total $E_S \simeq E_T$, enquanto a energia dos osciladores possui um valor $E_O \simeq 0$. A Fig. 4.2(b) repete os resultados da Fig. 4.2(a) para uma escala de tempo bem menor. Logo após o instante inicial podemos observar uma diminuição na energia do sistema e conseqüentemente um acréscimo na energia dos osciladores, ficando visível o efeito de dissipação da energia do sistema para o “meio”. Nos instantes de tempo posteriores observamos uma contínua flutuação nas energias, ainda mostrando que em média a energia dos osciladores é maior que a energia do sistema. É interessante observar que neste caso o sistema e o “meio” trocam energia constantemente, e a energia de interação oscila menos, servindo apenas de mediadora.

A Fig. 4.3(a) mostra uma ampliação para a evolução temporal da energia do sistema E_S , mostrada na Fig. 4.2, e a Fig. 4.3(b) ilustra, para o mesmo intervalo de tempo, a dinâmica da posição da partícula em torno do valor mínimo do potencial. Podemos perceber o efeito das constantes oscilações do valor da energia do sistema através da variação na amplitude de oscilação da partícula, quando a energia do sistema diminui, a amplitude de oscilação da partícula também diminui, ou seja, quanto menor o valor da energia do sistema, menos a partícula se afasta do ponto de equilíbrio $X = 0,0$.

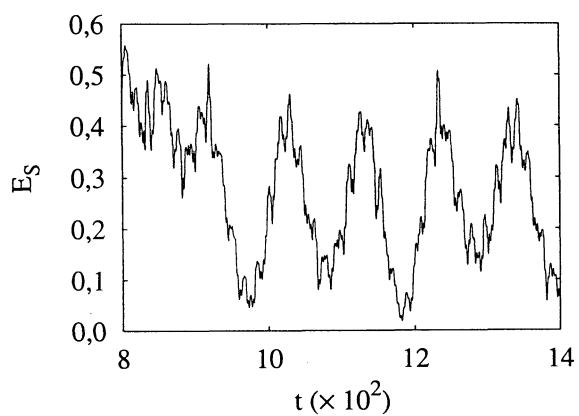


(a)

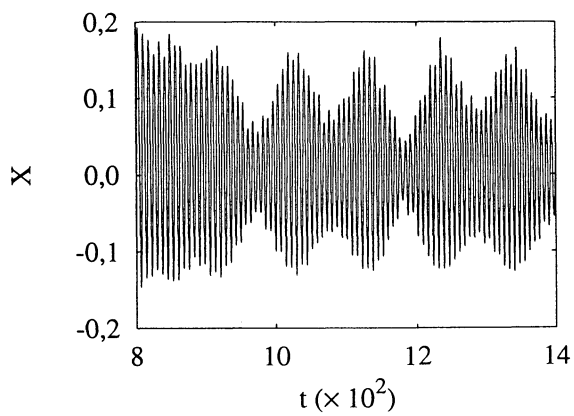


(b)

Fig. 4.2: Evolução temporal das energias: sistema E_S , osciladores E_O , interação E_I e total E_T .



(a)



(b)

Fig. 4.3: (a) Flutuações na energia do sistema E_S . (b) Oscilações da partícula em torno do valor mínimo do potencial assimétrico.

4.2.1 FLUXO DE ENERGIA MÉDIA (I) CASO: $m_j = 0,1$

Apresentamos na Fig. 4.4 a evolução temporal da energia média (4.3): do sistema $\langle E_S \rangle$, dos osciladores $\langle E_O \rangle$, da interação $\langle E_I \rangle$ e total $\langle E_T \rangle$, como função do número de osciladores que compõem o “meio”. Os valores para as energias apresentados nas escalas da figura são adimensionais, pois dividimos todos os valores pela energia total, deste modo a energia total é igual a unidade e as energias do sistema, dos osciladores e da interação são frações da unidade. Devido a escolha das condições iniciais, no instante inicial $t = 0$, a energia de interação é nula, $E_I = 0$. para cada uma das situações (a) - (f) apresentadas na Fig. 4.4. A energia dos osciladores é muito baixa inicialmente $E_O \simeq 0$, enquanto que o sistema possui a maior fração da energia total: $E_S \simeq E_T$. Através das várias situações apresentadas em (a) - (f) na Fig.4.4, onde cada uma refere-se a um número diferente de osciladores interagindo com o sistema, podemos perceber que para 15 ou 20 osciladores a potência dissipada pelo sistema, ou seja, a taxa com que o sistema transfere energia para os osciladores, é consideravelmente menor quando comparada aos casos correspondentes a um número maior de osciladores interagindo com o sistema (60, 100, 140 e 180 osciladores). Essencialmente podemos concluir que um aumento no número de osciladores conduz a um efeito dissipativo mais pronunciado para um intervalo de tempo pequeno a contar do início da interação em $t = 0$. Este caso (I), é onde o “meio” mais se assemelha a um banho térmico, pois a massa do sistema é grande comparada com a massa dos osciladores. Importante chamar a atenção para o fato de que quando o número de osciladores aumenta, a intensidade da interação também aumenta. Isto pode ser observado na equação de movimento (3.19), onde aumentar a soma sobre j , tem o mesmo efeito que aumentar a intensidade do acoplamento γ_j . A Fig. 4.5 também mostra o efeito de dissipação de energia do sistema, mas agora para o caso *normalizado*¹, ou seja, o aumento no número de osciladores não conduz a um aumento efetivo (linear) na intensidade do acoplamento entre sistema e osciladores. Mesmo para este caso, quando observamos as várias situações em (a) - (f) que correspondem a diferentes números de osciladores interagindo com o sistema, chegamos a mesma conclusão da análise realizada para a Fig. 4.4, isto é, aumentando o número de osciladores que interagem com o sistema, a dissipação aumenta.

¹Nas equações de movimento (3.18) - (3.21) onde aparecem os somatórios sobre o números de osciladores tomamos: $\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N$.

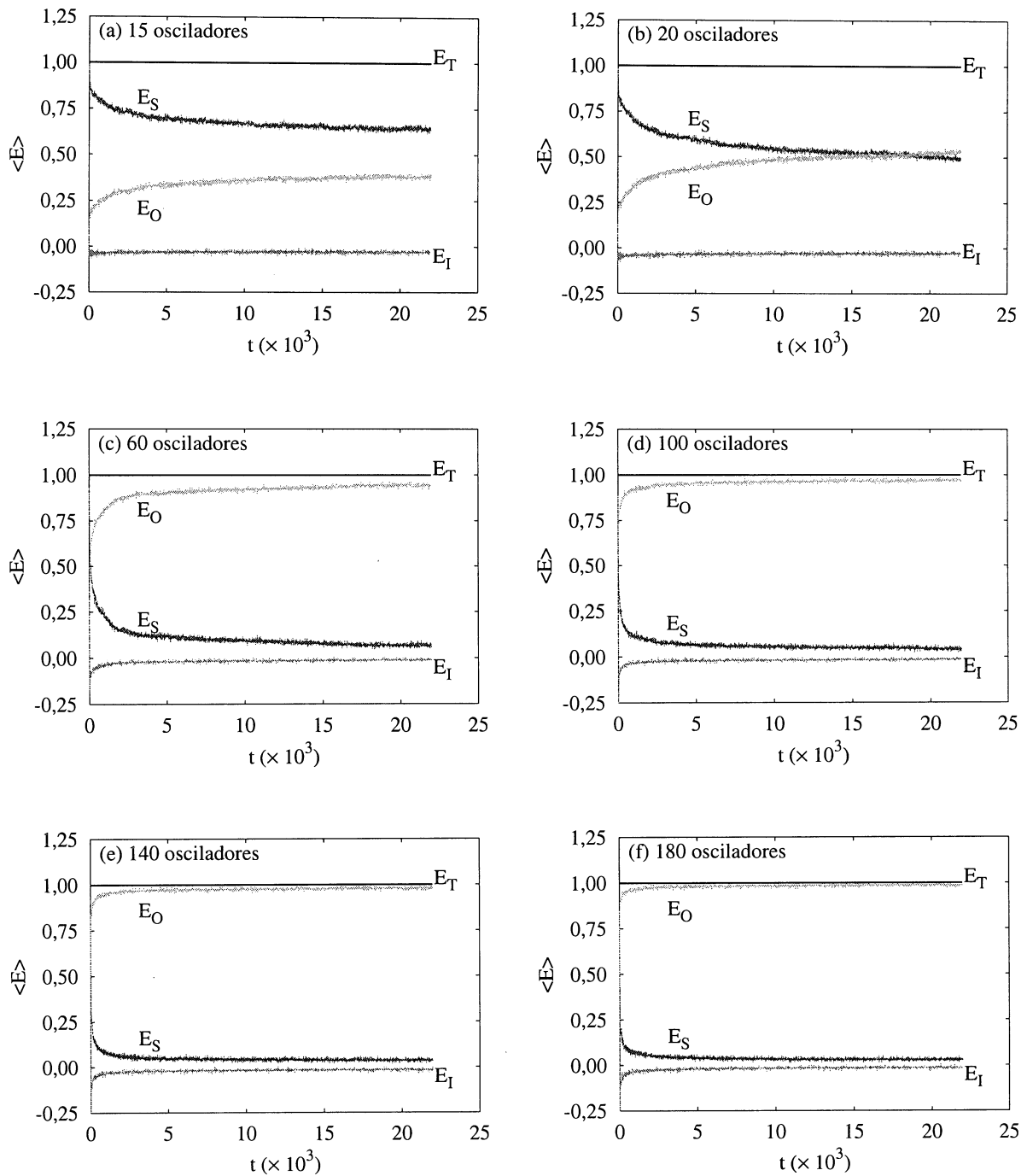


Fig. 4.4: Evolução temporal para a energia média do sistema E_S , dos osciladores E_O , de interação E_I e total E_T , como função do número de osciladores. Para os seguintes parâmetros $\gamma_j = 2,5 \times 10^{-2}$ e $m_j = 0,1$.

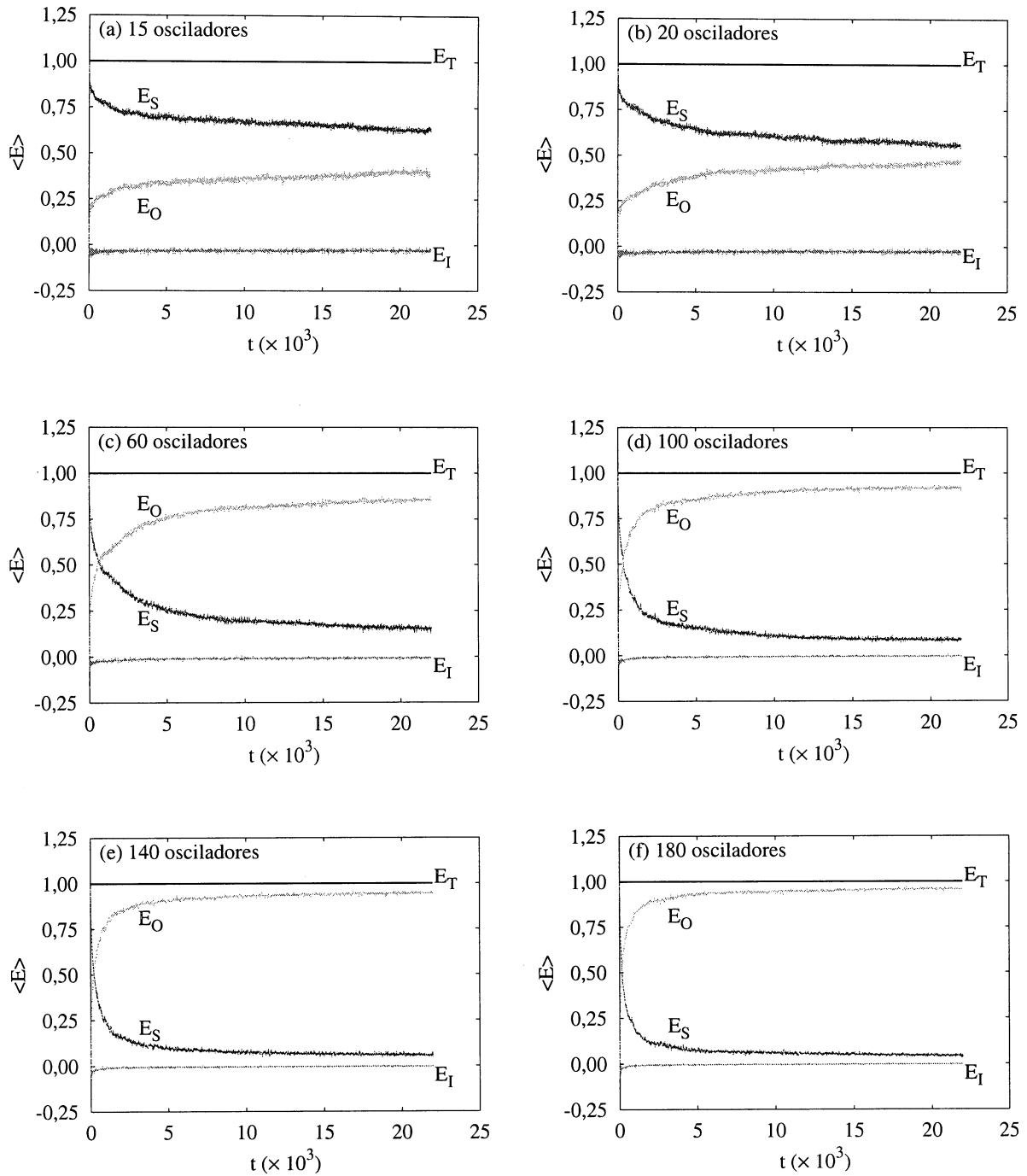


Fig. 4.5: Evolução temporal para a energia média do sistema E_S , dos osciladores E_O , de interação E_I e total E_T , como função do número de osciladores. Para o caso *normalizado*, com parâmetros $\gamma_j = 1 \times 10^{-1}$ e $m_j = 0, 1$.

4.2.2 FLUXO DE ENERGIA MÉDIA (II) CASO: $m_j = 10$

A Fig. 4.6, assim como a Fig. 4.4, mostra a evolução temporal da energia média do sistema $\langle E_S \rangle$, dos osciladores $\langle E_O \rangle$, da interação $\langle E_I \rangle$ e total $\langle E_T \rangle$, como função do número de osciladores que compõem o “meio”. A principal diferença no entanto, é dada pelos diferentes valores fixados para a massa da partícula e a massa dos osciladores. Neste caso o “meio” tem uma massa maior que a massa da partícula. Como no caso anterior, devido a escolha das condições iniciais, no instante inicial $t = 0$ a interação é nula, $E_I = 0$, para as diferentes situações (a) - (f) apresentadas na Fig. 4.6. A energia dos osciladores é muito baixa em $t = 0$, $E_O \simeq 0$, enquanto a energia do sistema é muito próxima da energia total, $E_S \simeq E_T$. Quando observamos a Fig. 4.6, podemos constatar que nas situações (a) - (c) que correspondem respectivamente a 15, 20 e 60 osciladores interagindo com o “meio”, o aumento no número de osciladores resulta numa maior potência dissipada pelo sistema, semelhante ao caso (I) anteriormente analisado na Fig. 4.4, onde um aumento do número de osciladores conduz a um efeito dissipativo mais pronunciado. No entanto, quando consideramos as situações (d) - (f) que correspondem respectivamente a 100, 140 e 180 osciladores, percebemos uma grande mudança em relação ao comportamento dissipativo do sistema, ou seja, nessa situação o aumento do número de osciladores conduz a um decréscimo progressivo da potência dissipada pelo sistema, deste modo podemos constatar que o efeito dissipativo não é linear, como função do número de osciladores. Podemos perceber esse efeito também para o caso *normalizado* que é apresentado na figura Fig. 4.7, embora o efeito seja mais perceptível para um intervalo de tempo menor a partir do início da interação em $t = 0$. Também é importante observar que na Fig. 4.6 a energia de interação aumenta consideravelmente (logo após o início da interação) quando o número de osciladores é maior, significando que parte da energia total está mais concentrada nas interações, isto pode ser atribuído ao aumento da intensidade do acoplamento entre sistema e osciladores, visto que para o caso *normalizado* apresentado na Fig. 4.7 não observamos esse mesmo aumento na energia de interação, quando o número de osciladores é maior.

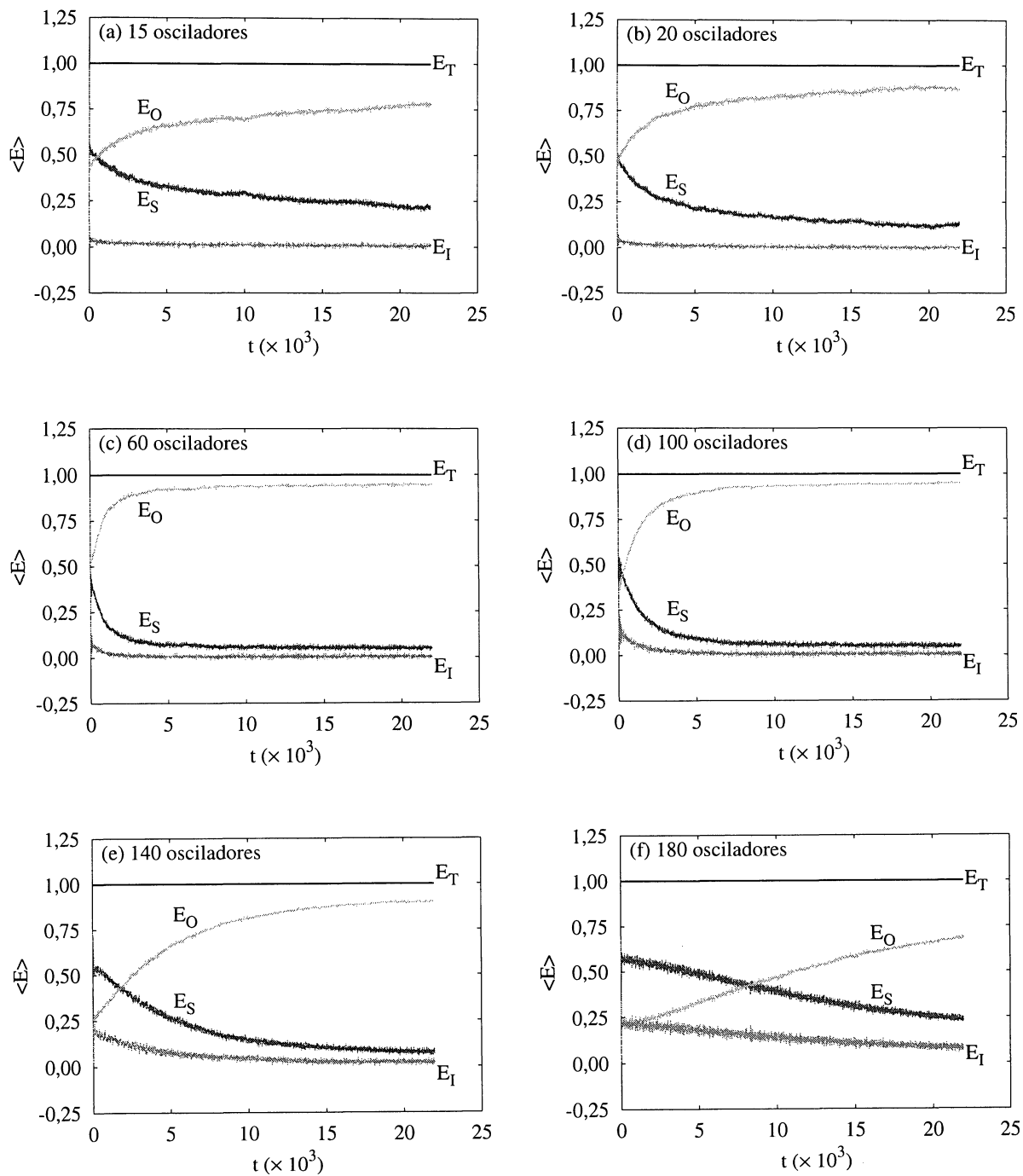


Fig. 4.6: Evolução temporal para a energia média do sistema E_S , dos osciladores E_O , de interação E_I e total E_T , como função do número de osciladores. Para os seguintes parâmetros $\gamma_j = 1 \times 10^{-1}$ e $m_j = 10$.

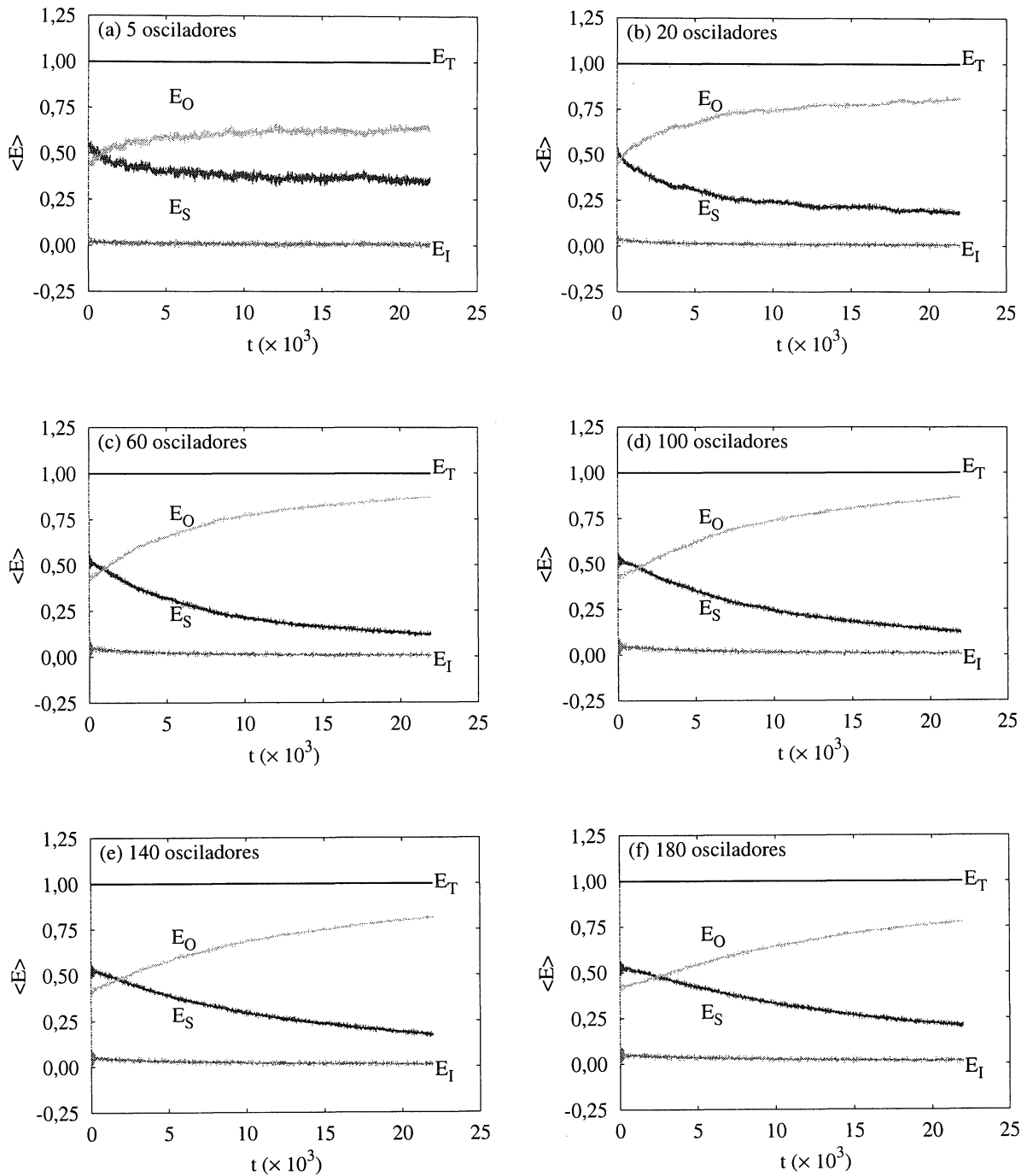


Fig. 4.7: Evolução temporal para a energia média do sistema E_S , dos osciladores E_O , de interação E_I e total E_T , como função do número de osciladores. Para o caso *normalizado*, com parâmetros $\gamma_j = 4 \times 10^{-1}$ e $m_j = 10$.

4.3 TRANSPORTE DE PARTÍCULAS ($F_{ext} \neq 0$)

Nesta seção apresentamos os resultados numéricos referentes ao processo de transporte direcionado da partícula através de múltiplos poços do potencial assimétrico, para as diferentes situações propostas inicialmente, onde a força externa é diferente de zero. Na subseção 4.3.1 mostramos os resultados referentes ao caso (I), com valor $m_j = 0,1$ para a razão entre a massa dos osciladores que compõem o “meio” e a massa da partícula. Para o caso (II), com valor $m_j = 10$, apresentamos a situação em que a massa dos osciladores é maior que a massa da partícula, sendo os resultados exibidos na subseção 4.3.2. O caso (III), onde a massa da partícula é muito maior que a massa dos osciladores, com valor $m_j = 0,01$, os resultados serão apresentados na subseção 4.3.3.

4.3.1 DINÂMICA DA PARTÍCULA (I) CASO: $m_j = 0,1$

Iniciaremos esta subseção apresentando os resultados referentes ao comportamento dinâmico temporal da posição média da partícula $\langle X(t) \rangle$ em função do número de osciladores que constituem o “meio”. Na Fig. 4.8 podemos observar três diferentes trajetórias (médias) da partícula ilustrando o acoplamento do sistema para 60, 100 e 140 osciladores.

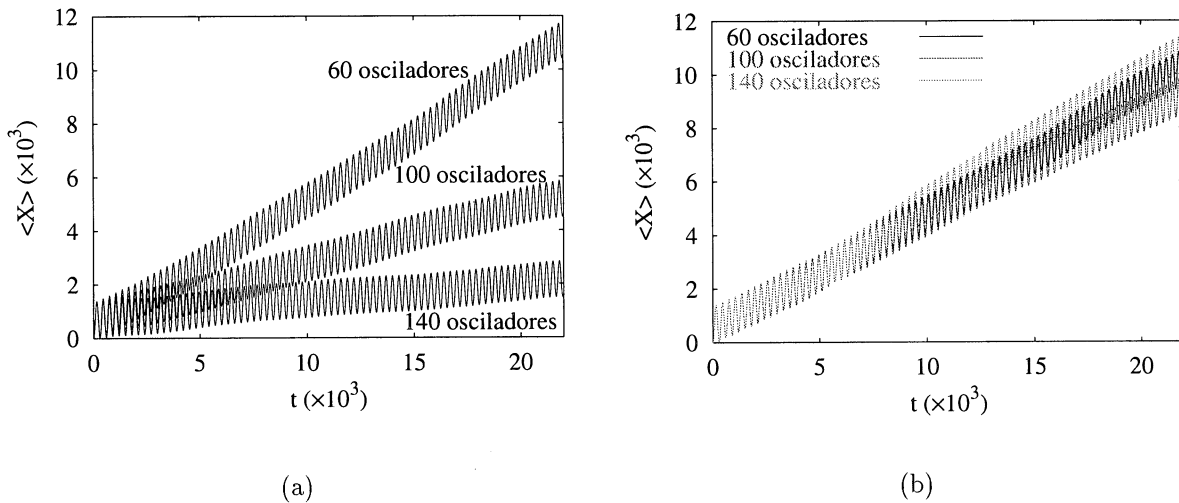


Fig. 4.8: Posição média da partícula \times tempo. (a) Caso *não normalizado*, (b) caso *normalizado*. Utilizando os seguintes parâmetros: $\gamma_j = 1 \times 10^{-3}$, $F = 3 \times 10^{-1}$ e $\omega = 2 \times 10^{-2}$.

Analisando a Fig. 4.8(a) podemos ver claramente que o aumento do número de osciladores, prejudica o transporte, ou seja, ocorre uma redução na *eficiência*². Para explicar este efeito, é

²Por eficiência entendemos o deslocamento líquido da partícula no intervalo de tempo mostrado nas figuras.

importante lembrar que o transporte direcionado de partículas em múltiplos poços de potenciais ocorre devido a assimetria espacial (dada pelo potencial assimétrico $\mathcal{V}(X)$) mais a força externa F_{ext} . Na equação (3.19) podemos verificar que aumentando o número de osciladores, ou equivalentemente aumentando a amplitude do acoplamento γ_j , o termo referente a força devido ao potencial assimétrico torna-se menos expressivo, ou seja, o efeito da assimetria espacial é reduzido e o transporte torna-se menos eficiente. Podemos também constatar esse efeito quando observamos a Fig. 4.8 (b) que mostra o comportamento dinâmico da partícula (em função do número de osciladores) para o caso *normalizado* (sendo os parâmetros correspondentes ao da Fig. 4.8 (a)), ficando evidente que o aumento do número de osciladores do “meio” não prejudica o transporte da partícula. Isto demonstra que o efeito visto na Fig. 4.8 (a) é devido ao aumento da intensidade do acoplamento.

O comportamento descrito acima, entretanto, não é geral. A situação pode ser totalmente inversa quando aumentamos consideravelmente a intensidade do acoplamento. Isto pode ser visto na Fig. 4.9 (a) para um valor $\gamma_j = 2,5 \times 10^{-2}$. Neste caso, o aumento do número de osciladores aumenta a *eficiência* do transporte, embora quando comparado com a Fig. 4.8 (a) a *eficiência* ainda é menor.

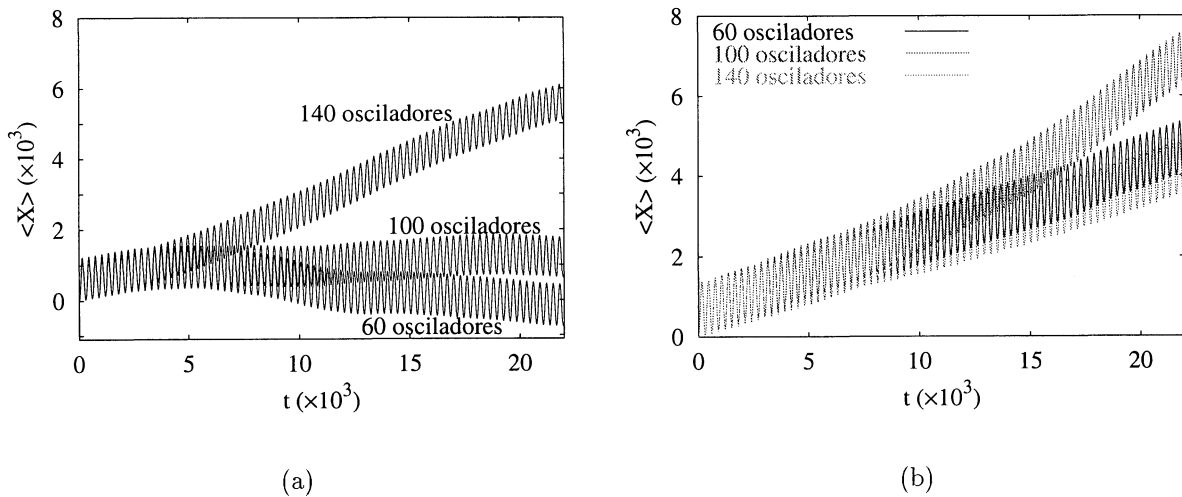
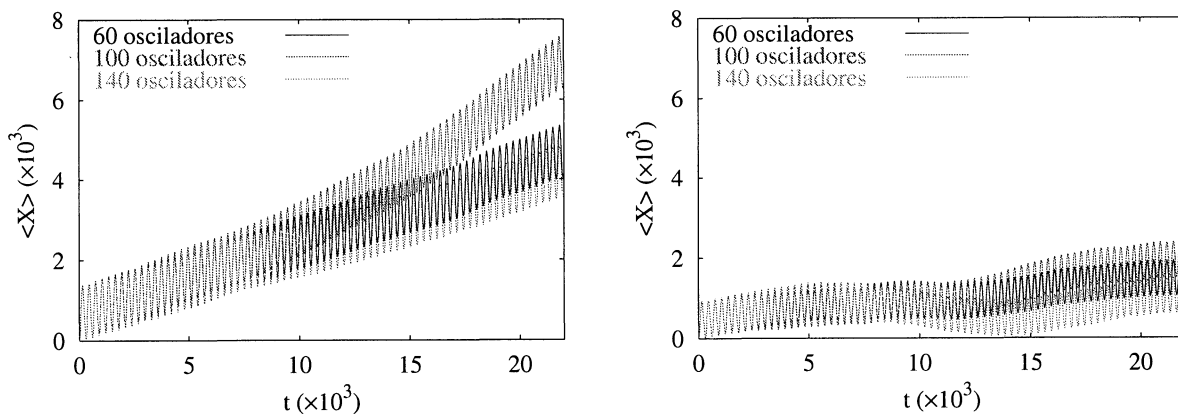


Fig. 4.9: Posição média da partícula \times tempo. (a) Caso *não normalizado*, (b) caso *normalizado*. Utilizando os seguintes parâmetros: $\gamma_j = 2,5 \times 10^{-2}$, $F = 3 \times 10^{-1}$ e $\omega = 2 \times 10^{-2}$.

Uma análise mais detalhada da dinâmica dos osciladores do “meio” mostra que as suas oscilações não ocorrem mais em torno do ponto $x_0 = 0$ (como se espera num banho térmico ideal), mas deslocam-se em média para a esquerda ou direita. Quanto maior a intensidade do acoplamento, maior esse deslocamento (variando $\gamma_j = 1 \times 10^{-3} \rightarrow \gamma_j = 5 \times 10^{-2}$, o deslocamento varia: $\sim 5 \times 10^{-1} \rightarrow 5 \times 10^2$ três ordens de grandeza). Isto significa que a partícula do sistema recebe uma força “extra” direcionada (devido à interação (3.5) com

os osciladores). Essa força será tão mais intensa quanto maior for o número de osciladores. Temos portanto um efeito conjunto da assimetria do potencial com a força “extra” devido aos osciladores, que pode gerar uma mudança na direção do transporte da partícula. Quando analisamos o caso *normalizado* correspondente, Fig. 4.9 (b), podemos perceber que apenas o aumento no número de osciladores (não mais associado a um aumento na interação) não afeta substancialmente o transporte, para este caso. No entanto, uma comparação entre as Fig. 4.8 (b) e Fig. 4.9 (b) fica ainda visível uma redução na *eficiência* do transporte, pois o acoplamento é maior. Na Fig. 4.10 mostramos o efeito da intensidade da força externa sobre o transporte da partícula para diferentes números de osciladores, tratando apenas o caso *normalizado*. Podemos observar que diminuindo a intensidade da força externa o transporte também diminui. Este efeito é independente do número de osciladores. Na Fig. 4.11 (a) também observamos este mesmo efeito (para 60 osciladores), onde também é exibida uma trajetória para $F = 0$, e nenhum movimento direcionado da partícula é observado, pois ela fica apenas oscilando em torno do mínimo do potencial assimétrico (essas oscilações não podem ser observadas na escala da figura). A Fig. 4.11 (b) mostra o efeito da intensidade do acoplamento sobre o transporte da partícula, onde diferentes valores para γ_j correspondem a diferentes trajetórias, mostrando que o aumento da intensidade do acoplamento reduz a *eficiência* do transporte, como já havíamos comentado anteriormente.

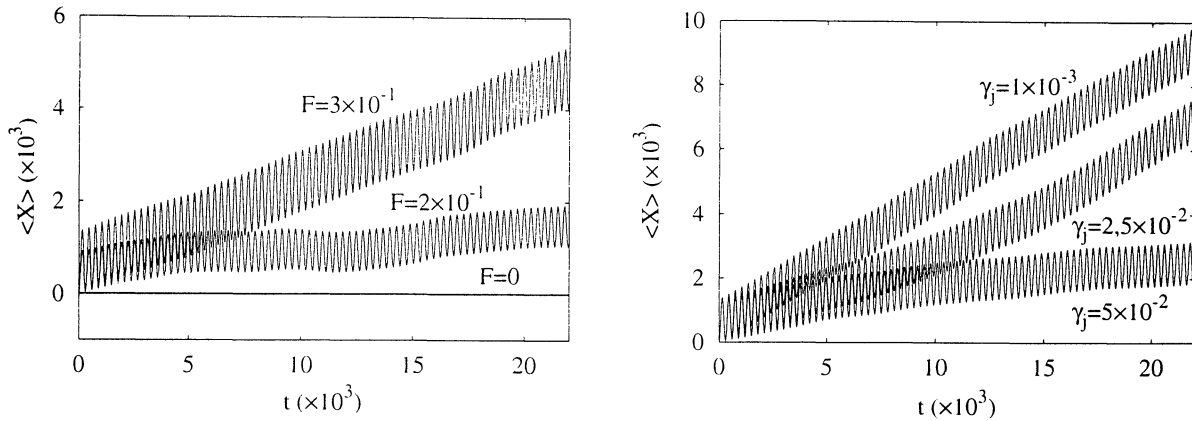


(a) Utilizando os parâmetros: $\gamma_j = 2,5 \times 10^{-2}$, $F = 3 \times 10^{-1}$ e $\omega = 2 \times 10^{-2}$.

(b) Utilizando os parâmetros: $\gamma_j = 2,5 \times 10^{-2}$, $F = 2 \times 10^{-1}$ e $\omega = 2 \times 10^{-2}$.

Fig. 4.10: Posição média da partícula \times tempo, para o caso *normalizado*.

É interessante observar que o aumento da amplitude da força externa, F , além de favorecer um aumento na *eficiência* do transporte da partícula, também conduz à um aumento da amplitude das oscilações de $\langle X \rangle$, ou seja, a partícula oscila sobre um número maior de poços do potencial assimétrico.



(a) Utilizando os parâmetros: $\gamma_j = 2,5 \times 10^{-2}$ e $\omega = 2 \times 10^{-2}$.

(b) Utilizando os parâmetros: $F = 3 \times 10^{-1}$ e $\omega = 2 \times 10^{-2}$.

Fig. 4.11: Posição média da partícula \times tempo, para o caso *normalizado*: (a) 60 osciladores e (b) 100 osciladores.

4.3.2 DINÂMICA DA PARTÍCULA (II) CASO: $m_j = 10$

Nesta subseção apresentamos os resultados para o caso em que a massa da partícula é menor que a massa dos osciladores que compõem o “meio”. Para esta situação o “meio” não representa, nem aproximadamente, um banho térmico. As partículas “massivas” dos osciladores influenciam consideravelmente o sistema.

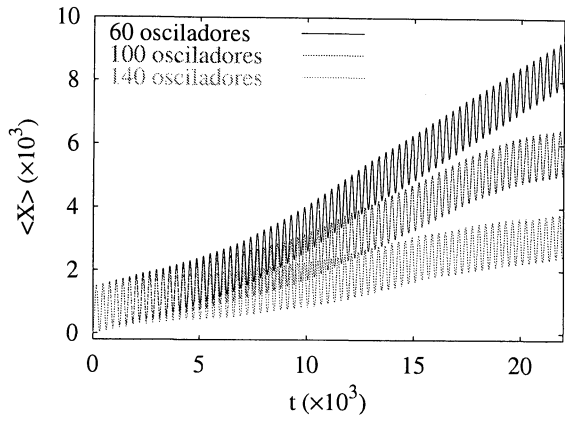
Na Fig. 4.12:(a), (b), (c) e (d) são mostrados os resultados referentes ao comportamento dinâmico temporal da posição média da partícula $\langle X(t) \rangle$, em função do número de osciladores que constituem o “meio”. Na Fig. 4.12(a) podemos observar os diferentes casos (*não normalizados*) para diferentes números de osciladores, observamos que o aumento do número de osciladores implica numa redução no transporte, como já era esperado, pois o acoplamento também aumenta com um maior número de osciladores. A Fig. 4.12(b) mostra o caso *normalizado*, onde podemos perceber que em média o transporte não é prejudicado. Entretanto nota-se que o caso para 100 osciladores apresenta um comportamento um pouco diferente. Isto demonstra que, contrário ao que foi concluído no caso (I), para este caso a intensidade do acoplamento não é o único efeito responsável pelo transporte.

Para a Fig.4.12(c) e (d) onde a amplitude do acoplamento é maior $\gamma_j = 1 \times 10^{-1}$, e a intensidade da força externa menor, $F = 2 \times 10^{-1}$. Podemos perceber (de forma geral) que para o caso *não normalizado* apresentado na Fig.4.12(c), uma significativa redução no transporte (quando comparada ao caso anterior, Fig. 4.12(a)). A explicação para este fato pode ser dada quando consideramos três pontos importantes: a intensidade do acoplamento

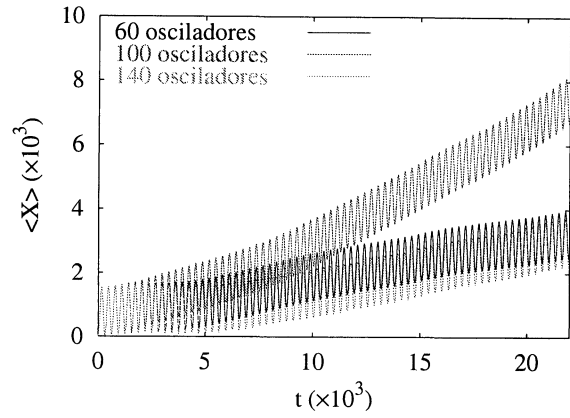
é muito alta, a intensidade da força externa é menor, e também a massa dos osciladores é grande. Em consequência disto os osciladores têm uma grande influência sobre a trajetória da partícula, que depende também das condições iniciais de cada oscilador. Deste modo, o número de osciladores que compõem o “meio” pode contribuir de forma diferente na *eficiência* do transporte da partícula. Analisando o caso *normalizado*, mostrado na Fig.4.12 (d), observamos um progressivo decréscimo na *eficiência* do transporte a medida que o número de osciladores aumenta (não aumentando o acoplamento), e ainda podemos observar diferentes direções para a trajetória média da partícula (referente a 60 e 100 osciladores).

A Fig.4.12 (e) e (f), mostra respectivamente como a trajetória média da partícula muda em relação a diferentes intensidades do acoplamento γ_j , e diferentes intensidades da força externa F . Na Fig.4.12 (e) fica claro que um maior acoplamento torna o transporte menos eficiente, o que está de acordo com o que já comentamos anteriormente. Podemos ainda observar que a amplitude das oscilações de $\langle X \rangle$ diminui com o aumento do acoplamento γ_j , no entanto, quando fazemos uma comparação com a Fig.4.11 (b) não observamos este efeito, pois neste caso a interação é *normalizada*. A Fig. 4.12 (f) apresenta diferentes trajetórias para diferentes valores da amplitude da força externa. Observamos que para uma força externa nula, $F = 0$, não ocorre o transporte da partícula (como é esperado), a partícula fica apenas oscilando em torno do mínimo do potencial assimétrico. Essas oscilações, entretanto não podem ser observadas na escala desta figura. Para $F = 1,5 \times 10^{-1}$ a amplitude de oscilação da partícula mostra que ela está oscilando sobre aproximadamente 900 mínimos do potencial assimétrico e com o passar do tempo deslocando-se para a esquerda, e para $F = 4 \times 10^{-1}$ a amplitude de oscilação aumenta, agora a partícula oscila sobre 2000 mínimos do potencial e movimenta-se para a direita com o passar do tempo. A origem do movimento para esquerda ou para direita pode ser explicada quando levamos em conta a discussão feita no capítulo 3, onde o movimento para a direita é esperado pois a velocidade inicial (positiva) da partícula ($V_i = 0,2$) favorece o movimento para direita; agora um movimento para a esquerda (quando $F = 1,5 \times 10^{-1}$), pode ter origem no fato que uma menor intensidade da força externa pode deslocar a partícula até um ponto (no potencial assimétrico) em que a força efetiva favoreça, neste caso, em média um movimento para a esquerda.

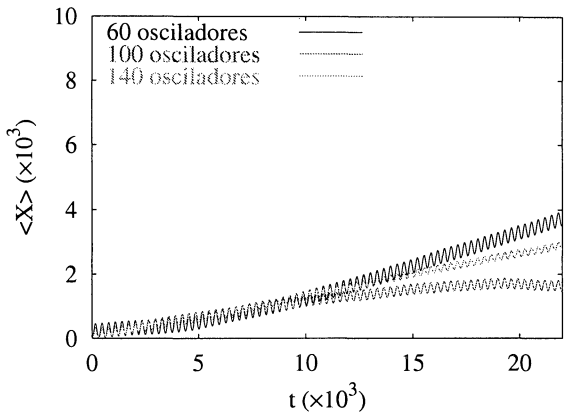
Uma comparação entre os casos (I) e (II) nos possibilita concluir, de forma geral, que para o caso (II) onde a massa da partícula (transportada) é menor que a massa dos osciladores que compõem o “meio”, a *eficiência* do transporte além de depender da força externa e da amplitude da interação, apresenta também dependência em relação ao número de osciladores. Das observações feitas, acreditamos que o “meio” bastante “massivo” é o principal responsável pela alteração descrita.



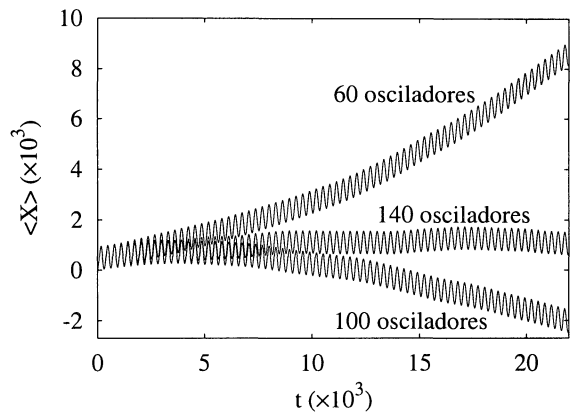
(a) Caso *não normalizado* para $\gamma_j = 2 \times 10^{-3}$ e $F = 3 \times 10^{-1}$.



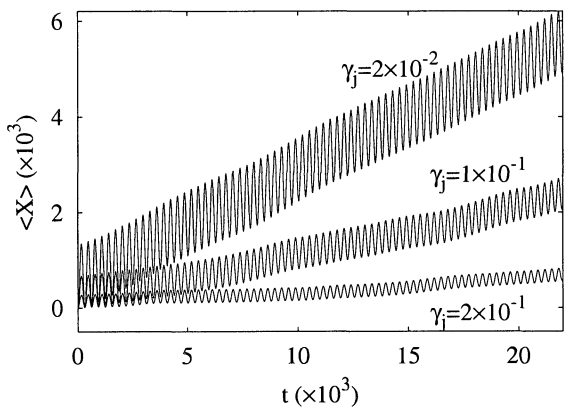
(b) Caso *normalizado* para $\gamma_j = 2 \times 10^{-3}$ e $F = 3 \times 10^{-1}$.



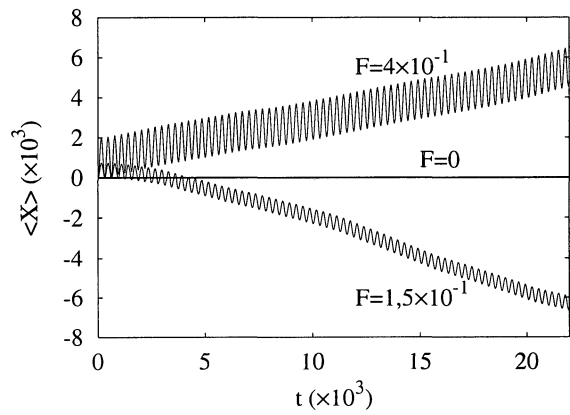
(c) Caso *não normalizado* para $\gamma_j = 1 \times 10^{-1}$ e $F = 2 \times 10^{-1}$.



(d) Caso *normalizado* para $\gamma_j = 1 \times 10^{-1}$ e $F = 2 \times 10^{-1}$.



(e) Caso *não normalizado*, $F = 3 \times 10^{-1}$ para 60 osciladores.

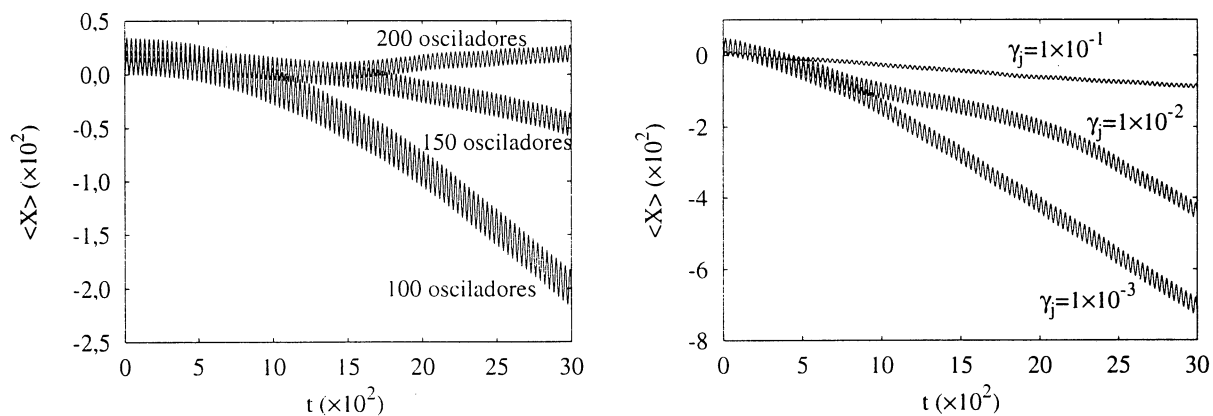


(f) Caso *não normalizado*, $\gamma_j = 2 \times 10^{-3}$ para 60 osciladores.

Fig. 4.12: Posição média da partícula \times tempo, para frequência da força externa $\omega = 2 \times 10^{-2}$.

4.3.3 DINÂMICA DA PARTÍCULA (III) CASO: $m_j = 0,01$

Os resultados apresentados nesta subseção [37] referem-se ao caso em que a massa da partícula é muito maior que a massa dos osciladores. Portanto, para este caso, o “meio” torna-se mais parecido com a descrição de um banho térmico. Os valores atribuídos às condições iniciais do sistema foram $X_i = 0,1$ para a posição inicial da partícula e $V_i = 0,0$ para a velocidade inicial da partícula. A distribuição de frequências ω_j para os osciladores do “meio” é semelhante à utilizada nos casos anteriores, ou seja, uma distribuição do tipo Debye mostrada na Fig. 4.1 (a) com frequência de corte $\omega_c \simeq 3,8$. A distribuição para posição inicial $x_j^{(i)}$ e velocidade inicial $v_j^{(i)}$ dos osciladores permaneceu a mesma apresentada na Fig. 4.1 (b). Na Fig. 4.13 (a)-(b) é mostrado, respectivamente, a dependência do transporte em função do número de osciladores, e da intensidade do acoplamento γ_j entre a partícula e o “meio”. Podemos ver que na Fig. 4.13(a) o transporte é menos eficiente quando um maior número de osciladores interage com o sistema. No entanto, na Fig. 4.13 (b) também observamos uma redução no transporte, mas para uma maior intensidade do acoplamento entre sistema e osciladores. Verificamos, como no caso (I), que muitos osciladores interagindo com o sistema apresentam um efeito sobre o transporte que é equivalente a situação em que o acoplamento é maior.



(a) Utilizando os parâmetros: $\gamma_j = 1 \times 10^{-1}$, $F = 3$ e $\omega = 2 \times 10^{-1}$.

(b) Utilizando os parâmetros: $\omega = 2 \times 10^{-1}$, $F = 1$, e 100 osciladores.

Fig. 4.13: Posição média da partícula \times tempo, (a) como função do número de osciladores, (b) como função da intensidade do acoplamento entre sistema e “meio”.

A Fig. 4.14 ilustra o efeito de transporte para diferentes valores da amplitude da força externa. Observamos que para $F = 0$ não ocorre transporte, como era esperado, a partícula apenas oscila em torno do mínimo do potencial assimétrico (essas oscilações não

podem ser observadas nesta escala). Para os demais valores, $F = 1$ e $F = 3$, o transporte é direcionado para a esquerda e a amplitude de oscilação da força externa mostra que a partícula oscila sobre 10 mínimos do potencial assimétrico para $F = 1$, e sobre 40 mínimos do potencial assimétrico para $F = 3$. Uma maior *eficiência* no transporte é obtida quando a intensidade da força externa aumenta. Estes resultados estão de acordo com a discussão feita na subseção 4.3.1 para o caso (I).

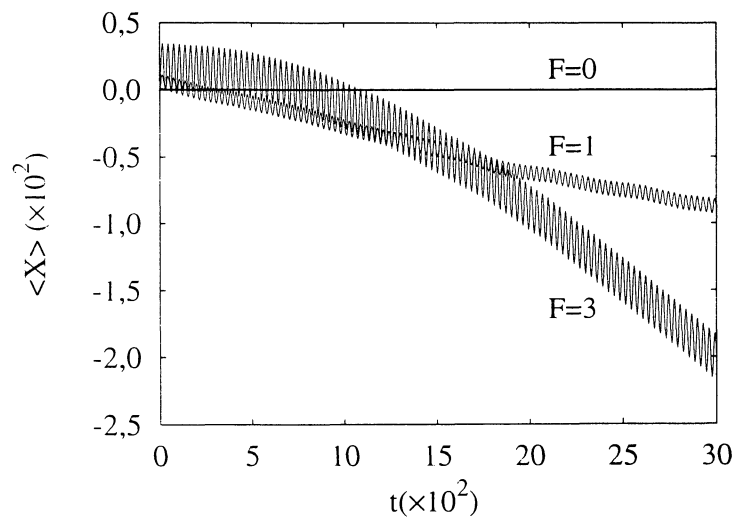


Fig. 4.14: Posição média da partícula \times tempo, como função da força externa. Utilizando os parâmetros: $\gamma_j = 1 \times 10^{-1}$, $\omega = 2 \times 10^{-1}$ e 100 osciladores.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

RESUMO

Apresentamos neste trabalho um estudo numérico das equações de movimento que descrevem um sistema acoplado a um “meio”, onde foi verificado o transporte de partículas através de múltiplos poços de potenciais assimétricos para diferentes situações físicas. Lembrando que o sistema é constituído por uma partícula sujeita a um potencial periódico assimétrico e a uma força externa dependente do tempo; e o “meio” sendo composto por N osciladores harmônicos independentes, onde a interação entre sistema e osciladores é dada através de um potencial do tipo bilinear. Discutimos as trocas de energia entre o sistema e o “meio” (quando a força externa é nula) em função do número de osciladores, neste caso verificamos a dissipação de energia do sistema. O efeito do transporte da partícula sobre múltiplos poços do potencial assimétrico foi caracterizado através de uma trajetória média mostrando a posição da partícula em relação ao tempo. Essa trajetória média foi obtida a partir de 100 trajetórias, onde para cada uma delas foi feita uma nova inicialização das condições iniciais dos osciladores (posição e velocidade) e também uma nova inicialização para as frequências (ω_j). O estudo do efeito do transporte foi realizado para três diferentes casos: (I) quando a massa da partícula do sistema é maior que a massa dos osciladores, com valor $m_j = 0.1$ para a razão entre a massa dos osciladores e a massa da partícula; (II) quando a massa dos osciladores é maior que a massa da partícula, $m_j = 10$; e (III) quando a massa da partícula é muito maior que a massa dos osciladores que compõem o “meio”, com valor $m_j = 0.01$. As trocas de energia foram analisadas nos casos (I) e (II). A *eficiência* do transporte foi estudada em função do número N de osciladores que compõem o “meio”, da intensidade da interação entre sistema e osciladores, e como função da amplitude da força externa.

CONCLUSÃO

Os resultados referente ao estudo das trocas de energia e dissipação do sistema, para os dois casos analisados (I) e (II), mostraram que

Caso (I): para um maior número de osciladores interagindo com o sistema, o processo dissipativo torna-se mais intenso.

Caso (II): o processo dissipativo do sistema não é linear, dependendo do número de osciladores de forma não monotônica.

Os resultados obtidos no estudo do transporte da partícula, para os diferentes casos (I), (II), e (III), onde as diferentes situações físicas foram analisadas, nos mostraram que para os casos (I) e (III) a dependência da *eficiência* no transporte, em relação a intensidade do acoplamento e em relação a amplitude da força externa, mostra, respectivamente, que a *eficiência* é reduzida a medida que a intensidade da interação aumenta, e a *eficiência* aumenta para maiores amplitudes da força externa. No entanto, para o caso (II), a *eficiência* do transporte não depende apenas da intensidade do acoplamento e da amplitude da força externa, mas depende também do número de osciladores que compõem o “meio”. Neste caso, a massa da partícula é menor que a massa dos osciladores, portanto o “meio” têm maior influência sobre a trajetória da partícula.

TRABALHOS FUTUROS

A realização deste trabalho teve como objetivo principal estudar o transporte de partículas em potenciais assimétricos através da integração numérica de todas as equações diferenciais acopladas simultaneamente, onde algumas situações foram analisadas. No entanto, outros aspectos podem ser pesquisados, usando este modelo, dando assim continuidade a esse trabalho. Podemos citar aqui algumas sugestões:

- Analisar as trocas de energia entre sistema e “meio” de forma semelhante a que foi apresentada na seção 4.2 (capítulo 4), mas considerando a força externa diferente de zero ($F_{ext} \neq 0$).
- Reproduzir os resultados apresentados neste trabalho (referente as seções 4.2 e 4.3, do capítulo 4) com objetivo de fazer um estudo comparativo, mas considerando:

- Diferentes distribuições para as frequências ω_j dos osciladores, como por exemplo: distribuições Gaussianas e Poissons;
 - Diferentes formas para o potencial assimétrico, ou seja, diferentes graus de assimetria do potencial;
 - Uma força externa ($F_{e,rt}$) estocástica, como também um outro tipo para o potencial de interação entre sistema e “meio”.
- Fazer uma análise com o tratamento de Langevin para o mesmo sistema físico analisado neste trabalho (mesmo potencial assimétrico $\mathcal{V}(X)$, mesma distribuição para as frequências ω_j , mesmas massas m_j , mesmas condições iniciais, etc), e comparar com os resultados aqui obtidos;
 - Verificar a possibilidade de introduzir o conceito de “memória”, no modelo estudado, a fim de obter uma conexão com a *equação de Langevin generalizada* apresentada na seção 2.2 (capítulo 2).

APÊNDICE A

VALOR MÉDIO E FUNÇÃO CORRELAÇÃO

Vamos primeiramente calcular a função partição canônica Z , dada pela expressão [27]

$$Z = \int e^{-\beta H(\mathbf{q}, \mathbf{p})} d\mathbf{q} d\mathbf{p}. \quad (\text{A.1})$$

Podemos escrever a hamiltoniana (2.58) como

$$H_B^{(m)} = \sum_{j=1}^N h_j, \quad (\text{A.2})$$

onde

$$h_j = \frac{p_j^2}{2m_j} + \frac{m_j \omega_j^2}{2} q_j^2 - \lambda \Gamma_j Q q_j + \frac{\lambda^2 \Gamma_j^2 Q^2}{2m_j \omega_j^2}. \quad (\text{A.3})$$

Para este caso a função partição fica

$$\begin{aligned} Z = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta \sum_j h_j} dq_j dp_j &= \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta h_1} dq_1 dp_1 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta h_2} dq_2 dp_2 \\ &\times \dots \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta h_N} dq_N dp_N. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Cada uma das integrais do lado direito da equação acima pode ser dividida em duas novas integrais, uma para a variável q_j e outra para a variável p_j . O resultado é obtido calculando integrais do tipo [38]

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-(ax^2+bx+c)} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{(b^2-4ac)/4a}. \quad (\text{A.5})$$

Logo, a função partição canônica (A.4) é expressa por

$$Z = \left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^N \prod_{j=1}^N \frac{1}{\omega_j}. \quad (\text{A.6})$$

Considerando o resultado acima, a distribuição para os estados iniciais do banho (2.57), fica

$$P[\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0)] = C e^{-\beta H_B^{(m)}}, \quad (\text{A.7})$$

onde $C \equiv (\beta/2\pi)^N \prod_{j=1}^N \omega_j$ e $H_B^{(m)}$ é expresso por (A.2), sendo $q_j = q_j(0)$ e $p_j = p_j(0)$. Vamos agora calcular o valor médio e a função correlação para a força flutuante $f(t)$ usando as expressões [39]

$$\langle f(t) \rangle = \int f(t) P[\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0)] d\mathbf{q}(0) d\mathbf{p}(0), \quad (\text{A.8})$$

e

$$\langle f(t)f(\tau) \rangle = \int f(t)f(\tau) P[\mathbf{q}(0), \mathbf{p}(0)] d\mathbf{q}(0) d\mathbf{p}(0), \quad (\text{A.9})$$

lembrando que

$$f(t) = \sum_j^N \lambda \Gamma_j \left\{ \left[q_j(0) - \frac{\lambda \Gamma_j}{m_j \omega_j^2} Q(0) \right] \cos \omega_j t + \frac{p_j(0)}{m_j \omega_j} \text{sen } \omega_j t \right\}. \quad (\text{A.10})$$

Podemos representar

$$f(t) = \sum_{i=1}^N f_i, \quad (\text{A.11})$$

onde

$$f_i = \lambda \Gamma_i \cos \omega_i t q_i(0) + \frac{\lambda \Gamma_i}{m_i \omega_i} \text{sen } \omega_i t p_i(0) - \frac{\lambda^2 \Gamma_i^2}{m_i \omega_i^2} Q(0) \cos \omega_i t. \quad (\text{A.12})$$

Considerando as equações (A.7) e (A.11) a média (A.8) é expressa por

$$\langle f(t) \rangle = C \left[\int_{-\infty}^{+\infty} (f_1 + f_2 + \dots f_N) \prod_{j=1}^N e^{-\beta h_j} dq_j(0) dp_j(0) \right], \quad (\text{A.13})$$

ou ainda

$$\begin{aligned} \langle f(t) \rangle = C & \left[\int_{-\infty}^{+\infty} f_1 e^{-\beta h_1} dq_1(0) dp_1(0) \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta h_2} dq_2(0) dp_2(0) \right. \\ & \times \dots \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta h_N} dq_N(0) dp_N(0) + \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta h_1} dq_1(0) dp_1(0) \\ & \times \int_{-\infty}^{+\infty} f_2 e^{-\beta h_2} dq_2(0) dp_2(0) \dots \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta h_N} dq_N(0) dp_N(0) \\ & + \dots \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta h_1} dq_1(0) dp_1(0) \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta h_2} dq_2(0) dp_2(0) \\ & \left. \times \dots \int_{-\infty}^{+\infty} f_N e^{-\beta h_N} dq_N(0) dp_N(0) \right]. \quad (\text{A.14}) \end{aligned}$$

A primeira integral da equação acima é escrita na forma

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} f_1 e^{-\beta h_1} dq_1(0) dp_1(0) &= \lambda \Gamma_1 \cos \omega_1 t \int_{-\infty}^{+\infty} q_1(0) e^{-\beta h_1} dq_1(0) dp_1(0) \\ &+ \frac{\lambda \Gamma_1}{m_1 \omega_1} \text{sen } \omega_1 t \int_{-\infty}^{+\infty} p_1(0) e^{-\beta h_1} dq_1(0) dp_1(0) \\ &- \frac{\lambda^2 \Gamma_1^2}{m_1 \omega_1^2} Q(0) \cos \omega_1 t \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta h_1} dq_1(0) dp_1(0), \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

onde cada integral é separada em duas novas integrais, uma para variável q_1 e outra para a variável p_1 . Efetuando os cálculos obtemos

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_1 e^{-\beta h_1} dq_1(0) dp_1(0) = 0. \quad (\text{A.16})$$

De forma análoga, a resolução das demais integrais, tipo $\int_{-\infty}^{+\infty} f_k e^{-\beta h_k} dq_k(0) dp_k(0)$, são todas nulas. Portanto o valor médio (A.14) da força flutuante $F(t)$ é dado por

$$\langle f(t) \rangle = 0. \quad (\text{A.17})$$

Para calcular a função correlação (A.9) consideramos as equações (A.7), (A.11) e também a equação

$$f(\tau) = \sum_{k=1}^N g_k, \quad (\text{A.18})$$

onde

$$g_k = \lambda \Gamma_k \cos \omega_k \tau q_k(0) + \frac{\lambda \Gamma_k}{m_k \omega_k} \text{sen } \omega_k \tau p_k(0) - \frac{\lambda^2 \Gamma_k^2}{m_k \omega_k^2} Q(0) \cos \omega_k \tau. \quad (\text{A.19})$$

Assim a função correlação para $f(t)$ fica

$$\begin{aligned} \langle f(t) f(\tau) \rangle &= C \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \left(\sum_{i,k} f_i g_k \right) \prod_{j=1}^N e^{-\beta h_j} dq_j(0) dp_j(0) \right] \\ &= C \left[\int_{-\infty}^{+\infty} (f_1 + f_2 + \dots + f_N) (g_1 + g_2 + \dots + g_N) \prod_{j=1}^N e^{-\beta h_j} dq_j(0) dp_j(0) \right], \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

ou ainda

$$\begin{aligned} \langle f(t) f(\tau) \rangle &= C \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} (f_1 g_1 + f_1 g_2 + \dots + f_1 g_N) \prod_{j=1}^N e^{-\beta h_j} dq_j(0) dp_j(0) \right. \\ &+ \int_{-\infty}^{+\infty} (f_2 g_1 + f_2 g_2 + \dots + f_2 g_N) \prod_{j=1}^N e^{-\beta h_j} dq_j(0) dp_j(0) \\ &+ \dots + \int_{-\infty}^{+\infty} (f_N g_1 + f_N g_2 + \dots + f_N g_N) \prod_{j=1}^N e^{-\beta h_j} dq_j(0) dp_j(0) \left. \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_1 g_1 \prod_{j=1}^N e^{-\beta h_j} dq_j(0) dp_j(0) = \int_{-\infty}^{+\infty} f_1 g_1 e^{-\beta h_1} dq_1(0) dp_1(0) \times \prod_{j=2}^N \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta h_j} dq_j(0) dp_j(0), \quad (\text{A.22})$$

e

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_1 g_2 \prod_{j=1}^N e^{-\beta h_j} dq_j(0) dp_j(0) = \int_{-\infty}^{+\infty} f_1 e^{-\beta h_1} dq_1(0) dp_1(0) \times \int_{-\infty}^{+\infty} g_2 e^{-\beta h_2} dq_2(0) dp_2(0) \times \prod_{j=3}^N \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta h_j} dq_j(0) dp_j(0). \quad (\text{A.23})$$

E ainda, cada uma das integrais do lado direito das equações (A.22) e (A.23) pode ser escrita em termos de um produto de duas novas integrais para as variáveis q_j e p_j . Efetuando os cálculos obtemos as seguintes soluções

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_1 g_1 \prod_{j=1}^N e^{-\beta h_j} dq_j(0) dp_j(0) = \left(\frac{2\pi}{\beta} \right)^N \prod_{j=1}^N \frac{1}{\omega_j} \left[\frac{\lambda^2 \Gamma_1^2}{\beta m_1 \omega_1^2} \cos \omega_1(t - \tau) \right], \quad (\text{A.24})$$

e

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_1 g_2 \prod_{j=1}^N e^{-\beta h_j} dq_j(0) dp_j(0) = 0. \quad (\text{A.25})$$

Procedendo o cálculo de forma análoga para as demais integrais da equação (A.21), ficamos com

$$\langle f(t)f(\tau) \rangle = C \left\{ \left(\frac{2\pi}{\beta} \right)^N \prod_{j=1}^N \frac{1}{\omega_j} \left[\frac{\lambda^2 \Gamma_1^2}{\beta m_1 \omega_1^2} \cos \omega_1(t - \tau) + \frac{\lambda^2 \Gamma_2^2}{\beta m_2 \omega_2^2} \cos \omega_2(t - \tau) + \dots + \frac{\lambda^2 \Gamma_N^2}{\beta m_N \omega_N^2} \cos \omega_N(t - \tau) \right] \right\}, \quad (\text{A.26})$$

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 correlação da força flutuante $f(t)$

$$\langle f(t)f(\tau) \rangle = k_B T \sum_j \frac{\lambda^2 \Gamma_j^2}{m_j \omega_j^2} \cos \omega_j(t - \tau). \quad (\text{A.27})$$

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] S. Roth. *One-Dimensional Metals*. VCH, New York, 1995.
- [2] R. D. Astumian and M. Bier. Fluctuation driven ratchets: Molecular motors. *Physical Review Letters*, **72**(11):1766–1769, 1994.
- [3] M. O. Magnasco. Forced thermal ratchets. *Physical Review Letters*, **71**(10):1477–1481, 1993.
- [4] C. R. Doering, W. Horsthemke, and J. Riordan. Nonequilibrium fluctuation-induced transport. *Physical Review Letters*, **72**(19):2984–2987, 1994.
- [5] J. Prost, J. Chauwin, L. Peliti, and A. Ajdari. Asymmetric pumping of particles. *Physical Review Letters*, **72**(16):2652–2655, 1994.
- [6] L. P. Faucheux, L. S. Bourdieu, P. D. Kaplan, and A. J. Libchaber. Optical thermal ratchet. *Physical Review Letters*, **74**(9):1504–1507, 1995.
- [7] R. P. Feynman, R. B. Leighton, and M. Sands. *Lectures on Physics*, volume 1. Addison-Wesley, 1964.
- [8] A. Allison and D. Abbott. A MEMS brownian ratchet. *Microelectronics Journal*, **33**:235–243, 2001.
- [9] H. X. Zhou and Y. D. Chen. Chemically driven motility of brownian particles. *Physical Review Letters*, **77**(1):194–197, 1996.
- [10] J. Rousselet, L. Salome, A. Ajdari, and J. Prost. Directional motion of brownian particles induced by a periodic asymmetric potential. *Nature*, **370**:446–448, 1994.
- [11] S. Leibler. Moving forward noisily. *Nature*, **370**:412–413, 1994.
- [12] R. D. Astumian. Thermodynamics and kinetics of a brownian motor. *Science*, **276**:917–922, 1997.

- [13] R. Ait-Haddou, and W. Herzog. Force and motion generation of myosin motors: Muscle contraction. *Journal of Electromyography and Kinesiology*, **12**:435–445, 2002.
- [14] F. Jülicher, A. Ajdari, and J. Prost. Modeling molecular motors. *Reviews of Modern Physics*, **69**:1269–1281, 1997.
- [15] M. M. Millonas and M. I. Dykman. Transport and current reversal in stochastically driven ratchets. *Physics Letters A*, **185**:65–69, 1994.
- [16] L. Ibarra-Bracamontes and V. Romero-Rochín. Stochastic ratchets with colored thermal noise. *Physical Review E*, **56**(4):4048–4051, 1997.
- [17] B. Lindner, L. Schimansky-Geier, P. Reimann, P. Hänggi, and M. Nagoaka. Inertia ratchets: A numerical study versus theory. *Physical Review E*, **59**(2):1417–1424, 1999.
- [18] J. L. Mateos. Chaotic transport and current reversal in deterministic ratchets. *Physical Review Letters*, **84**(2):258–261, 2000.
- [19] T. Sintes and K. Sumithra. Isothermal ratchets: Numerical study of the efficiency of the energy transduction. *Computer Physics Communications*, **147**:646–649, 2002.
- [20] T. Sintes and K. Sumithra. Optimal efficiency condition and current reversal in forced underdamped ratchets. *Physica A*, **312**:86–98, 2002.
- [21] J. L. Mateos. Current reversal in chaotic ratchets: the battle of the attractors. *Physica A*, **325**:92–100, 2003.
- [22] C. S. Lee, B. Jankó, J. Derényi, and A. L. Barabasi. Reducing vortex density in superconductors using the ratchet effect. *Nature*, **400**:337–340, 1999.
- [23] C. Kettner, P. Reimann, P. Hänggi, and F. Müller. Drift ratchet. *Physical Review E*, **61**(1):312–323, 2000.
- [24] P. Reimann, M. Grifoni, and P. Hänggi. Quantum ratchets. *Physical Review Letters*, **79**(1):10–13, 1997.
- [25] J. Lehmann, S. Kohler, P. Hänggi, and A. Nitzan. Molecular wires acting as coherent quantum ratchets. *Physical Review Letters*, **88**(22):228305–1, 2002.
- [26] T. Tomé and M. J. Oliveira. *Dinâmica Estocástica e Irreversibilidade*. Edusp- Editora da Universidade de São Paulo, 2001.

- [27] S. R. Salinas. *Introdução à Física Estatística*. Edusp- Editora da Universidade de São Paulo, 1997.
- [28] E. Cortés, Bruce J. West, and K. Lindenberg. On the generalized Langevin equation: Classical and quantum mechanical. *Journal of Chemical Physics*, **82**(6):2708–2717, 1985.
- [29] H. Goldstein. *Classical Mechanics*. Addison-Wesley, 1950.
- [30] W. E. Boyce and R. C. Di Prima. *Equações Diferenciais Elementares e Problemas de Valores de contorno*. Guanabara Koogan S.A., 1994.
- [31] R. Luzzi. *Tópicos em Termodinâmica Estatística de Processos Dissipativos*. Editora da Unicamp, 2000.
- [32] U. Weiss. *Quantum Dissipative Systems*. World Scientific Publishing, 1993.
- [33] G. W. Ford, M. Kac, and P. Mazur. Statistical mechanics of assemblies of coupled oscillators. *Journal of Mathematical Physics*, **6**:504–515, 1965.
- [34] R. Zwanzig. Nonlinear generalized Langevin equations. *Journal of Statistical Physics*, **9**:215–220, 1973.
- [35] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery. *Numerical Recipes in Fortran: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 2nd edition, 1992. Web: <http://www.nr.com/>.
- [36] F. Reif. *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*. McGraw-Hill, 1965.
- [37] J. Rosa and M. W. Beims. Environment dependent transport in multiple asymmetric well potentials. *Arquivo para publicação. Physica A*, 2004.
- [38] M. R. Spiegel. *Mathematical Handbook of Formulas and Tables*. McGraw-Hill, 1968.
- [39] N. G. Van Kampen. *Stochastic Processes in Physics and Chemistry*. North-Holland, 1992.