

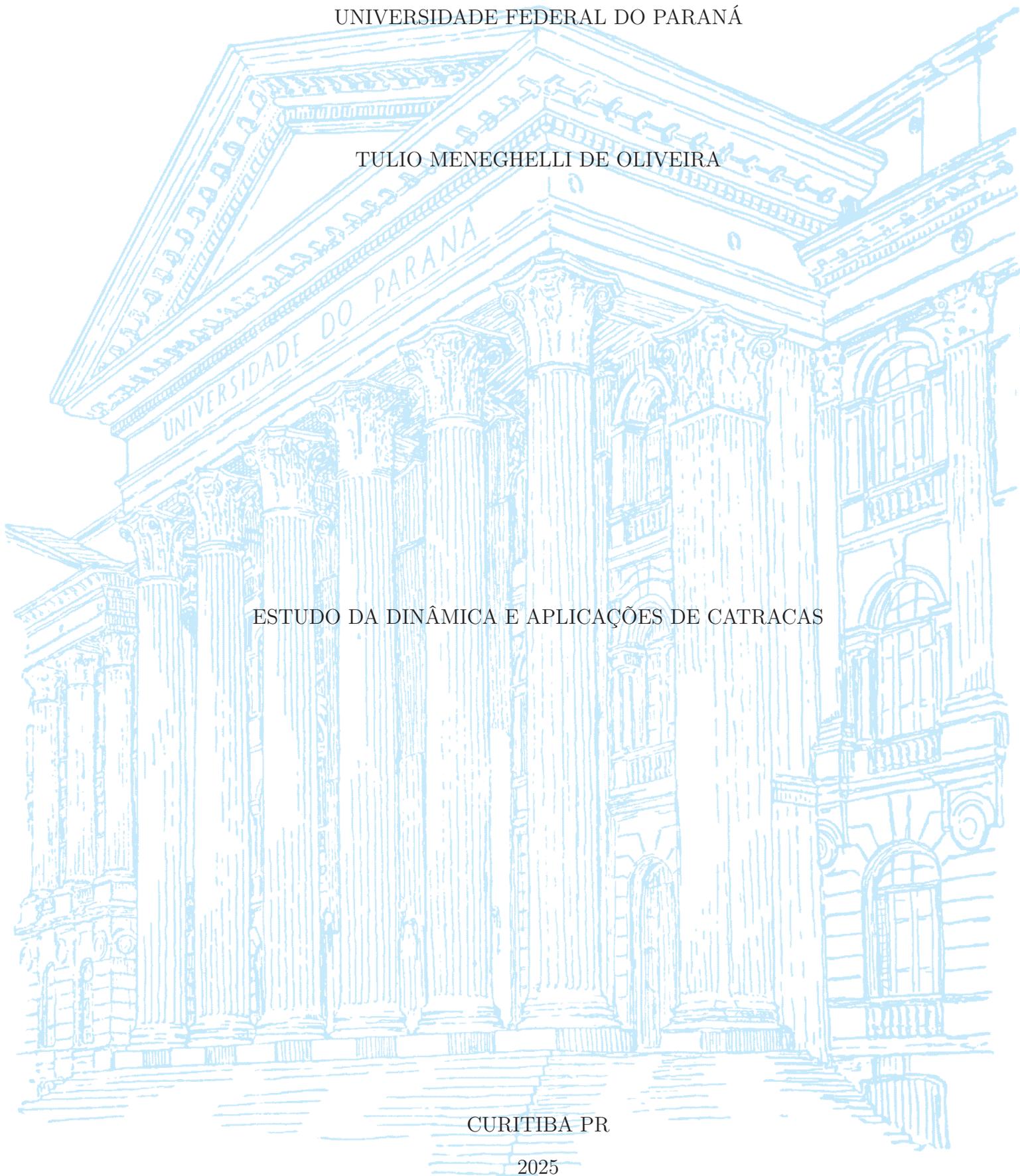
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

TULIO MENEGHELLI DE OLIVEIRA

ESTUDO DA DINÂMICA E APLICAÇÕES DE CATRACAS

CURITIBA PR

2025



TULIO MENEGHELLI DE OLIVEIRA

ESTUDO DA DINÂMICA E APLICAÇÕES DE CATRACAS

Tese apresentada como requisito parcial à obtenção do grau de Doutor em Física no Programa de Pós-Graduação em Física, Setor de Ciências Exatas, da Universidade Federal do Paraná.

Área de concentração: *Física Geral*.

Orientador: Prof. Dr. Marcus Werner Beims.

Coorientador: Prof. Dr. César Manchein.

CURITIBA PR

2025

DADOS INTERNACIONAIS DE CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO (CIP)  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ  
SISTEMA DE BIBLIOTECAS – BIBLIOTECA CIÊNCIA E TECNOLOGIA

Oliveira, Tulio Meneghelli de  
Estudo da dinâmica e aplicações de catracas. / Tulio Meneghelli de  
Oliveira. – Curitiba, 2025.  
1 recurso on-line : PDF.

Tese (Doutorado) - Universidade Federal do Paraná, Setor de Ciências  
Exatas, Programa de Pós-Graduação em Física.

Orientador: Prof. Dr. Marcus Werner Beims  
Coorientador: Prof. Dr. César Manchein.

1. Grafeno. 2. Lyapunov, diagrama de. 3. Transporte. I. Universidade  
Federal do Paraná. II. Programa de Pós-Graduação em Física. III. Beims,  
Marcus Werner. IV. Manchein, César. V. Título.

Bibliotecária: Roseny Rivelini Morciani CRB-9/1585

## TERMO DE APROVAÇÃO

Os membros da Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação FÍSICA da Universidade Federal do Paraná foram convocados para realizar a arguição da tese de Doutorado de **TULIO MENEGHELLI DE OLIVEIRA**, intitulada: "**Estudo da dinâmica e aplicações de catracas**", sob orientação do Prof. Dr. MARCUS WERNER BEIMS, que após terem inquirido o aluno e realizada a avaliação do trabalho, são de parecer pela sua APROVAÇÃO no rito de defesa.

A outorga do título de doutor está sujeita à homologação pelo colegiado, ao atendimento de todas as indicações e correções solicitadas pela banca e ao pleno atendimento das demandas regimentais do Programa de Pós-Graduação.

CURITIBA, 13 de Março de 2025.

Assinatura Eletrônica

13/03/2025 17:17:47.0

MARCUS WERNER BEIMS

Presidente da Banca Examinadora

Assinatura Eletrônica

23/05/2025 16:01:02.0

RENE ORLANDO MEDRANO TORRICOS

Avaliador Externo (UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO)

Assinatura Eletrônica

13/03/2025 17:58:17.0

EDSON DENIS LEONEL

Avaliador Externo (UNIVERSIDADE EST. PAULISTA JÚLIO DE MESQUITA FILHO)

Assinatura Eletrônica

14/03/2025 11:40:22.0

THIAGO DE LIMA PRADO

Avaliador Interno (UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ)

Assinatura Eletrônica

17/03/2025 08:33:04.0

CESAR MANCHEIN

Coorientador(a) (UNIVERSIDADE DO ESTADO DE SANTA CATARINA)

*Dedico esta tese de doutorado aos  
meus pais, Vilmar e Maria.*

## AGRADECIMENTOS

À minha família, por todo incentivo, especialmente à minha mãe, que em vida sempre se orgulhou de seus filhos e nunca mediu esforços para ajudá-los a alcançarem seus objetivos, ao meu pai Vilmar e à minha irmã Anna Paula, pela motivação e pelo apoio em todos os momentos.

À minha companheira e amiga, Luana, por todo apoio, paciência, amor e companheirismo.

Ao meu orientador, professor Marcus Werner Beims, pela orientação, paciência, discussões e pelo tempo disponibilizado.

Ao meu coorientador, César Manchein, por todos os anos de orientação, desde a iniciação científica na graduação, pelos ensinamentos, discussões e pela amizade.

Aos meus amigos, pelas conversas, parceria e por todos os momentos compartilhados.

À UFPR e ao PPGF, pela estrutura e pelos recursos disponibilizados.

Ao professor Carlos de Carvalho pelo suporte computacional.

Ao CNPq, pelo apoio financeiro.

## RESUMO

Esta tese explora o fenômeno do transporte dirigido em sistemas não lineares, com ênfase na geração de correntes de catraca em duas aplicações distintas, uma delas no contexto da dinâmica e do transporte de partículas em fluxos de fluídos e outra no contexto do transporte de portadores de carga, num dispositivo construído com base numa folha de grafeno. No primeiro cenário, utilizamos um método denominado *bailout embedding* para modelar e estudar o movimento de partículas em fluxos de fluído através de um sistema de catraca determinística. A descrição da dinâmica se dá por um mapeamento quadridimensional, governado por parâmetros como a viscosidade do fluído, as densidades do fluído e da partícula e a intensidade do forçamento periódico, inerente ao sistema de catraca original. No segundo cenário, utilizamos um sistema de equações diferenciais formado por equações de Langevin acopladas, para investigar a dinâmica e o transporte de partículas num chip de grafeno. Em ambos os casos, a quantidade física de interesse é a relacionada ao transporte de partículas, conhecida como corrente de catraca (CC), ou corrente de catraca com características relativísticas (CCR) no caso do chip de grafeno, pela natureza da difusão das partículas no material. Nossas descobertas reafirmam a relação entre valores de CC (ou CCR) eficientes e estruturas bem definidas (ou estruturas isperiódicas estáveis - EIEs) no espaço de parâmetros. Fenômenos como inversão de corrente em função da variação de parâmetros ou do tempo e a ativação ou destruição de corrente induzidas pela temperatura (no caso do chip de grafeno) também foram observados. A compreensão destes fenômenos e propriedades oferecem uma variedade de possibilidades para aplicações e controle dos sistemas investigados.

Palavras-chave: Efeito catraca. Corrente de catraca. Transporte. *Bailout embedding*. Diagramas de Lyapunov. Grafeno.

## ABSTRACT

This thesis explores the phenomenon of directed transport in nonlinear systems, focusing on the generation of ratchet currents in two distinct applications: one in the context of particle dynamics and transport in fluid flows, and the other in the context of charge carrier transport in a device built using a graphene sheet. In the first scenario, we employed a method called bailout embedding to model and study the particle movement in fluid flows through a deterministic ratchet system. The dynamics are described by a four-dimensional mapping governed by parameters such as fluid viscosity, the densities of the fluid and the particle, and the intensity of the periodic forcing inherent to the original ratchet system. In the second scenario, we utilized a system of differential equations composed of coupled Langevin equations to investigate the dynamics and transport of particles in a graphene chip. In both cases, the physical quantity of interest is related to particle transport, known as the ratchet current (RC), or relativistic-like ratchet current (RRC) in the case of the graphene chip, due to the nature of particle diffusion in the material. Our findings reaffirm the relationship between efficient RC (or RRC) values and well-defined structures (or isoperiodic stable structures – ISSs) in parameter space. Phenomena such as current inversion as a function of parameter variation or time, and the activation or suppression of currents induced by temperature (in the case of the graphene chip) were also observed. Understanding these phenomena and properties offers a variety of possibilities for applications and control of the investigated systems.

Keywords: Ratchet effect. Ratchet current. Transport. Bailout embedding. Lyapunov diagrams. Graphene.

## LISTA DE FIGURAS

2.1	Ilustração do método de obtenção do <i>mapa de Poincaré</i> . O mapa é definido a partir das perfurações descendentes da superfície $S$ pela curva de solução $C$ de uma equação diferencial, de forma que $G(A) = B$ , e assim por diante. Ilustração retirada da referência [1]. . . . .	17
2.2	Trajectoria de um oscilador harmônico amortecido. No Painel (a) está o gráfico de posição ( $x$ ) por tempo ( $t$ ), em (b) o gráfico de velocidade ( $v$ ) por tempo ( $t$ ) e, em (c), está o espaço de fase ( $x, v$ ) do sistema. As linhas em vermelho nos Painéis (a) e (b) são os valores para a função exponencial, responsável pelo amortecimento e delimitação da oscilação.. . . .	19
2.3	Ilustração dos tipos de atratores encontrados em sistemas dinâmicos. Figura feita com base na referência [2]. . . . .	21
2.4	Esquematização do dispositivo de catraca que Feynman propôs. Ao lado direito, uma caixa preenchida com um gás que se encontra a uma temperatura $T_1$ comporta as paletas responsáveis por gerar movimento. Ao lado esquerdo há outra caixa, cujo gás que a preenche está a temperatura $T_2$ e onde se encontra a catraca e a lingueta que permitem ou proíbem o movimento, a depender da direção. A catraca e as paletas são conectadas por um eixo, responsável por transmitir o movimento de uma caixa para outra. No centro do eixo e fora das delimitações das duas caixas, está uma polia com uma pulga (objeto com massa) suspensa. Figura retirada de [3].. . . .	24
2.5	Esquematização de um dispositivo que transporta matéria sem aplicação de uma força líquida. Um potencial assimétrico, com formato de dentes de serra pode aprisionar um conjunto de partículas. Este potencial pode ser acionado e desligado, aprisionando e libertando as partículas. Figura retirada de [4]. . . . .	25
3.1	Espaço de parâmetros de $\alpha \times \gamma$ para o valor da taxa de contração ou dilatação, representada pelo gradiente de cores. . . . .	33

3.2	O Painel (a) ilustra o espaço de parâmetros de $\alpha \times \gamma$ para o MEL, representado pelo gradiente de cores, e a área branca indica a região de divergência. No Painel (b), as curvas representam a separatriz de divergência para diferentes valores do parâmetro $K$ . No Painel (a), cores em laranja e vermelho indicam comportamento caótico, a cor preta indica quase-periodicidade e tons em azul indicam periodicidade. . . . .	34
3.3	Dinâmica do espaço de fase $(x_n, p_n)$ para o mapa de catraca acoplado (3.9) para $K = 1,5$ , $\alpha = 0,4$ e diferentes valores de $\gamma$ . Os valores das variáveis estão restritos ao intervalo $(x_n, p_n) \in [0, 2\pi], [-\pi, \pi]$ . . . . .	35
3.4	Diagrama de Lyapunov ilustrando o valor do MEL usando o gradiente de cores posicionado à direita. Estes diagramas são mapeados no espaço de parâmetro $K \times \gamma \in [0, 0, 1, 2] \times [0, 0, 0, 5]$ no regime aerossol ( $\alpha = 0,4$ ). Através do MEL, podemos discernir os tipos de dinâmica, distinguindo os comportamentos entre periódico (azul), quase-periódico (preto) e caótico (vermelho). O Painel (a) destaca estruturas periódicas reconhecidas como línguas de Arnold, enquanto o Painel (b) proporciona uma visão detalhada da sua organização. No Painel (b), uma linha verde clara marca os pontos utilizados para o cálculo de um diagrama de bifurcação, ilustrado na Figura 3.5. . . . .	36
3.5	O diagrama de bifurcação $\gamma \times p_n$ é gerado para linha reta destacada no Painel 3.4(b), que representa uma magnificação do espaço de parâmetros apresentado no Painel 3.4(a) (refere-se à caixa em verde). Números em azul e vermelho são utilizados para expressar o período correspondente das línguas de Arnold, alinhadas com o valor de $\gamma$ indicado pelas respectivas linhas verticais coloridas. . . . .	37
3.6	Diagrama esquemático mostrando a sequência de $p_n$ observada na Figura 3.5 e destacada pelas linhas verticais, indicando a regra de organização das línguas de Arnold. . . . .	37
3.7	O efeito do tempo transiente nos valores da CC, denotada como $J$ , é plotado ao longo do espaço de parâmetros de $K \times \alpha$ para $n = 10^5$ depois de $n_{\text{transiente}} = 10$ iterações transientes. O tempo de iteração descartado para cada um dos Painéis é: $n_{\text{transiente}} = 10^4$ para (a), $n_{\text{transiente}} = 10^5$ para (b), $n_{\text{transiente}} = 10^6$ para (c) e $n_{\text{transiente}} = 10^7$ para (d). O círculo na cor ciano no Painel 3.7(a), para os valores de parâmetros $K = 12,56$ , $\alpha = 0,87$ , é utilizado para calcular o valor da CC ao longo do tempo, na Figura 3.8, e garantir a existência da reversão de corrente. . . . .	39

3.8	Ilustração da reversão de corrente em função do tempo, para diferentes valores do parâmetro de dissipação $\gamma$ calculados no ponto indicado pelo círculo de cor ciano no Painel 3.7: $K = 12,56$ , $\alpha = 0,87$ . O cálculo da CC foi realizado para 900 condições iniciais, igualmente espacadas em $(x, p)$ , para um total de $10^{10}$ iterações no tempo. . . . .	40
3.9	A CC, denotada como J, é exibida no espaço de parâmetros de $K \times \gamma$ no Painel (a), enquanto o Painel (b) exibe o diagrama de bifurcação de $\gamma \times p$ . O diagrama de bifurcação foi gerado utilizando duas abordagens: uma incrementando $\gamma$ no sentido crescente, indo de 1,2 para 1,7 (indicado por pontos pretos), e a outra com um incremento negativo, indo de 1,7 para 1,2 (ilustrado na cor amarela). A linha azul no Painel (a) indica os pontos que foram utilizados para o cálculo do diagrama, com $K$ sendo mantido fixo em 2,922. . . . .	41
3.10	Corrente de catraca para o espaço de parâmetros de $K \times \gamma$ com diferentes valores de $\alpha$ . Para o Painel (a), $\alpha$ vale 0,20, em (b) $\alpha = 0,40$ , em (c) $\alpha = 0,60$ e em (d) $\alpha = 0,80$ . O cálculo computacional foi feito para uma grade de $500 \times 500$ , com 100 condições iniciais igualmente espaçadas em $(x, p)$ e tempo de iteração de $10^3$ depois de $10^7$ iteradas descartadas como transiente. . . . .	42
4.1	Esquematização da disposição dos átomos de carbono na rede que constitui o grafeno em (a). Átomos A e átomos B fazem parte de duas redes triangulares diferentes, que quando sobrepostas, formam o padrão de favo de mel característico do material. Em (b) está ilustrada a célula unitária no espaço recíproco, também chamada de zona de Brillouin. Os pontos simétricos $K$ e $K'$ são denominados pontos de Dirac. Figura retirada de [5] . . . . .	45
4.2	Representação gráfica dos orbitais $sp^2$ e $sp_z$ no grafeno. Figura retirada da referência [6]. . . . .	45
4.3	Ligações $\sigma$ ( $\sigma$ bond) e $\pi$ ( $\pi$ bond) no grafeno. Para formar a rede favo de mel, cada orbital $sp^2$ se sobrepõe ao orbital $sp^2$ de um átomo vizinho (pertencente a outra rede triangular) para criar uma ligação $\sigma$ , enquanto os orbitais $p_z$ remanescentes dão origem a uma ligação $\pi$ . Figura retirada da referência [6]. . . . .	46

4.4	Estrutura eletrônica de bandas do grafeno, calculada pelo modelo tight-binding para toda a primeira zona de Brillouin. Em (a) está o gráfico de dispersão de energia do grafeno: as bandas de valência e condução são simétricas em torno de $E = 0$ , e se tocam nos pontos simétricos da zona de brillouin (pontos $K$ e $K'$ ). Em (b) é projetado um mapa de calor da banda de condução, os pontos simétricos aparecem em azul escuro. Figura retirada da referência [6]. . . . .	47
4.5	(a) Representação esquemática de um chip de grafeno de uma camada. Átomos de carbono são destacados por pontos vermelhos, organizados em uma rede tipo favo de mel. Eletrodos são posicionados sobre a monocamada de grafeno, organizados em pares igualmente espaçados, compostos por um eletrodo positivo (azul) e outro negativo (verde). O espaçamento entre cada elemento do par e entre dois pares é diferente, garantindo a assimetria do potencial gerado na direção $x$ . O potencial elétrico gerado pelos eletrodos é ilustrado em (b), para $V_0 = 1,0$ e $V_1 = 0,25$ na Equação (4.6). . . . .	49
4.6	Ilustração da CCR $\bar{J}_x$ em função da temperatura $T$ para o modelo de chip de grafeno 4.3. Em (a) e (b) a CCR é ilustrada para diferentes valores dos parâmetros $\omega_y$ e $A$ , respectivamente. Junto à CCR, em pontos verdes nos Painéis (c) e (d), são apresentadas as velocidades $\dot{x}_i$ de cada uma das 81 condições iniciais utilizadas no ensemble. Em (a), fixamos o parâmetro $A = 65$ e utilizamos três valores de $\omega_y = \{1,23, 2,00, 2,45\}$ , enquanto em (b) fixamos $\omega_y = 2,0$ e utilizamos $A = \{20,65,110\}$ . O Painel (c) apresenta a curva da CCR para $A = 65$ e $\omega_y = 2,45$ de (a), já o Painel (d) ilustra a curva da CCR de (b) para $A = 20$ e $\omega_y = 2,0$ . Em ambos os Painéis, as velocidades $\dot{x}_i$ estão representadas por pontos verdes. . . . .	51
4.7	A influência do parâmetro $A$ , amplitude do campo elétrico externo, nos valores da CCR $\bar{J}_x$ para diferentes valores da temperatura $T$ no chip de grafeno. No Painel (a), é apresentado o comportamento de $\bar{J}_x$ perante a variação de $A$ no intervalo $[0,100]$ , para os valores de $T = \{0,25, 0,50, 0,75, 1,00, 1,25, 1,50\}K$ . No Painel (b), o intervalo de $A$ é mantido o mesmo e para a temperatura, usamos os valores $T = \{1,75, 2,00, 4,00\}K$ . . . . .	53

- 4.8 Ilustração das trajetórias das coordenadas  $x_i(t)$  dos portadores de carga, representadas na cor verde, juntamente aos valores médios, em preto. As curvas são apresentadas para valores específicos dos parâmetros  $(A, \omega_y) = (12, 4, 0)$ , escolhidos em torno do pico de  $\bar{J}_x$  do Painel 4.7(a), para vários valores de temperatura no modelo do chip de grafeno, descrito pela Equação (4.3). Para cada um dos painéis, os valores de  $T$  são: (a)  $T = 0,25K$ , (b)  $T = 0,50K$ , (c)  $T = 1,0K$ , (d)  $T = 1,5K$ , (e)  $T = 2,0K$ , e (f)  $T = 4,0K$ . Os outros parâmetros são os mesmos da Figura 4.6. Nos Painéis (a), (b) e (f),  $\bar{J}_x \sim 0$ , enquanto nos Painéis (c), (d) e (e),  $\bar{J}_x > 0$  por conta da ativação da CCR pela temperatura  $T$ . . . . . 54
- 4.9 Valores da CCR,  $\bar{J}_x$  (na barra de cores), plotados em escala semi-logarítmica no espaço de parâmetros de  $k_B T / \Delta V \times \omega_y$  para o modelo do chip de grafeno modelado pela Equação (4.3). Os valores de parâmetros utilizados nas simulações se encontram nos seguintes intervalos:  $k_B T / \Delta V \in [10^{-4}, 10^0]$  e  $\omega_y \in [0, 4, 5]$ . Cada Painel corresponde a um valor de  $A$  diferente:  $A = 20$  em (a),  $A = 65$  em (b) e  $A = 110$  em (c). Nos Painéis (b) e (c), as listras que são relacionadas ao fenômeno de reversão de CCR são mais evidentes. . . . . 55
- 4.10 A CCR,  $\bar{J}_x$ , é apresentada em cores no do espaço de parâmetros de  $A \times \omega_y$  para o modelo do chip de grafeno da Equação (4.3). Os valores utilizados para os parâmetros, nas simulações, são os seguintes:  $A \in [5, 180]$  e  $\omega_y \in [0, 4, 5]$ , para as diferentes temperaturas  $T = 1,0 \times 10^{-14}K$  para (a),  $T = 1,0 \times 10^{-3}K$  para (b),  $T = 1,0 \times 10^{-1}$  para (c),  $T = 0,3K$  para (d),  $T = 0,5K$  para (e),  $T = 1,0K$  para (f),  $T = 2,0K$  para (g), e  $T = 4,0K$  para (h).. . . . . 56
- 4.11 Magnificação da região delimitada pela caixa nas cores ciano (a) acima e branco (b) abaixo do Painel 4.10(b), para  $T = 10^{-3}K$ . No Painel (a) identificamos sequências de estruturas organizadas com CC positiva e negativa, que são suprimidas quando  $T = 0,1K$ , como visto no Painel 4.10(c). As estruturas observadas no Painel (b) passam a ser menos bem definidas conforme a temperatura aumenta, e passam a ser indistinguíveis a partir de  $T = 0,5K$ , no Painel 4.10(e). . . . . 57

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b> . . . . .	<b>13</b>
<b>2</b>	<b>FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA</b> . . . . .	<b>16</b>
2.1	SISTEMAS DINÂMICOS. . . . .	16
2.1.1	Sistemas Dinâmicos Dissipativos e Atratores . . . . .	19
2.1.2	Caos e expoente de Lyapunov . . . . .	21
2.2	CATRACAS DETERMINÍSTICAS . . . . .	23
<b>3</b>	<b>O EFEITO DO <i>BAILOUT EMBEDDING</i> NUM SISTEMA DE CATRACA</b> . . . . .	<b>28</b>
3.1	<i>BAILOUT EMBEDDING</i> . . . . .	29
3.2	RESULTADOS NUMÉRICOS . . . . .	32
3.2.1	A dinâmica do espaço de fase. . . . .	34
3.2.2	Diagramas de Lyapunov. . . . .	35
3.2.3	Efeitos de transiente e reversão de corrente de catraca . . . . .	38
3.2.4	Multiestabilidade e a influência de $\alpha$ no espaço de parâmetros . . . . .	39
3.3	CONCLUSÕES PARCIAIS. . . . .	42
<b>4</b>	<b>O EFEITO CATRACA NUM CHIP DE GRAFENO.</b> . . . . .	<b>44</b>
4.1	O GRAFENO E SUAS PROPRIEDADES . . . . .	44
4.2	O CHIP DE GRAFENO . . . . .	46
4.3	RESULTADOS NUMÉRICOS . . . . .	50
4.3.1	Ativação e destruição da CCR pela temperatura. . . . .	52
4.3.2	CCR no espaço de parâmetros $T \times \omega_y$ . . . . .	55
4.3.3	CCR no espaço de parâmetros $A \times \omega_y$ . . . . .	56
4.4	CONCLUSÕES PARCIAIS. . . . .	58
<b>5</b>	<b>CONSIDERAÇÕES FINAIS</b> . . . . .	<b>60</b>
	<b>REFERÊNCIAS</b> . . . . .	<b>62</b>
	<b>APÊNDICE A – DEDUÇÃO DO MAPA DE CATRACA CLÁSSICA.</b> . . . . .	<b>69</b>
	<b>APÊNDICE B – DESCRIÇÃO DOS PORTADORES DE CARGA NO CHIP DE GRAFENO.</b> . . . . .	<b>72</b>

## 1 INTRODUÇÃO

Sistemas conhecidos como catracas são sistemas capazes de produzir transporte direcionado de matéria sem qualquer tipo de força direcionadora. Do conhecimento comum, a catraca (como por exemplo a de uma estação de metrô) pode ser um dispositivo que permite o fluxo de pessoas ou objetos em uma direção, impedindo sua passagem no sentido contrário. De fato, o movimento direcionado criado por sistemas de catraca provém da permissão ou preferência do movimento em um único sentido. Caso uma força com média nula no espaço e no tempo seja aplicada, a liquidez de movimento é na direção em que se pode girar a catraca. O sentido preferencial surge a partir de assimetrias espaciais (barreiras físicas ou potenciais), junto a outras duas condições: ausência de equilíbrio térmico e dissipação de energia (veja a Seção 2.2).

Richard Feynman foi o responsável por introduzir o conceito de catraca no âmbito da física, ao propor um sistema que supostamente violaria a segunda lei da termodinâmica. No volume 1 da série de livros intitulada *The Feynman Lectures on Physics* [3], Feynman descreve e estuda um sistema denominado *Ratchet and pawl* e levanta argumentos e justifica por que o dispositivo não pode funcionar em movimento perpétuo (veja a seção 2.2). Estudos desenvolvidos por outros pesquisadores adaptaram modelos de catraca a diferentes contextos interdisciplinares, como na química [7] e, principalmente, em sistemas biológicos [8, 9, 10, 11].

O progresso no campo de estudo de motores brownianos nos leva ao domínio de transporte intracelular, mais especificamente da bioquímica de motores moleculares, que contribuiu expressivamente com a evolução do conhecimento dos princípios do efeito catraca ao final do século XX. Neste contexto, os conceitos conhecidos hoje foram desenvolvidos ao longo de diversos estudos, iniciando com a pesquisa de Huxley em contração muscular no ano de 1957 [12]. Outros pesquisadores deram continuação à pesquisa ao fim da década de 1980 [13] e na década de 1990 [14, 15, 16, 17]. Estes trabalhos abordaram diferentes modelagens de motores moleculares e seus mecanismos de funcionamento a partir da conversão de energia química ou térmica em movimento, por meio de mecanismos de catraca acionados por flutuações térmicas.

Alguns experimentos com grandes contribuições no avanço dos estudos de transporte direcionado foram desenvolvidos durante a segunda metade do século XX. O efeito catraca na forma de retificação de corrente foi proposto através de um dispositivo de interferência quântica, formado por um supercondutor de corrente contínua (DC-SQUID)<sup>1</sup>. Na presença de um campo magnético e corrente alternada não direcionadora, foi experi-

---

<sup>1</sup>O DC-SQUID é um dispositivo supercondutor que possui grande sensibilidade. É capaz de medir campos magnéticos extremamente fracos [18].

mentalmente observado e teoricamente interpretado por volta de 1967 [19, 20]. Ao longo da década de 70, diversos trabalhos tiveram como enfoque o transporte direcionado induzido por forças motrizes imparciais e periódicas no tempo, em estruturas espacialmente periódicas e assimétricas [21]. Um trabalho experimental inovador envolve os efeitos fotovoltaico e fotorrefrativo em materiais não centrossimétricos<sup>2</sup>, desenvolvido em 1974 [23]. A estrutura teórica foi elaborada alguns anos depois pelos pesquisadores Belinicher, Sturman e outros colaboradores, e é apresentada em seus trabalhos [24, 25]. Eles identificaram que a quebra do equilíbrio térmico e da simetria espacial são dois dos principais ingredientes para a ocorrência do efeito catraca em sistemas periódicos. A dissipação também está presente nos sistemas citados nos trabalhos acima e configura a quebra de simetria temporal no sistema, sendo a terceira condição para que o efeito catraca se manifeste (veja a Seção 2.2).

O transporte de partículas em sistemas não lineares é um tema de grande relevância, vista a variedade de sistema nos quais o efeito catraca é observado, com implicações que abrangem desde fenômenos fundamentais da física e bioquímica até aplicações tecnológicas avançadas. Em particular, o efeito catraca tem sido estudado como um mecanismo capaz de gerar movimento direcional sem a necessidade de forças externas líquidas, explorando apenas a quebra de simetrias espaço-temporais. A complexidade inerente desses sistemas aumenta ao considerar cenários que envolvem dinâmicas relativísticas ou de fluidos.

Nesta tese são abordados dois cenários distintos de transporte dirigido em sistemas não lineares, cada um com seu próprio enfoque e relevância. No primeiro cenário, exploramos o transporte em fluidos a partir de sistemas conservativos utilizando o método de *bailout embedding*. Essa abordagem permite romper indiretamente a simetria temporal em sistemas descritos por mapeamentos conservativos. Buscamos compreender se este é suficiente para gerar correntes de catraca efetivas e se estes valores estão associados a estruturas isoperiódicas estáveis (EIEs)<sup>3</sup> no espaço de parâmetros, como já evidenciado na literatura [26, 27, 28]. No segundo cenário, investigamos um fenômeno de transporte com características análogas às observadas no âmbito da relatividade, em um modelo de chip de grafeno. Este material, com propriedades de condutividade térmica e elétrica, oferece uma plataforma ideal para a exploração de fenômenos de nanotransporte. Portadores de carga que se movem ao longo de uma rede como a do grafeno se comportam como se fossem férmions de Dirac sem massa. Pretendemos ampliar as investigações do dispositivo proposto na referência [29], onde os autores investigam o sistema sobre diferentes perspectivas e relatam a existência de correntes de catraca ao calcular o transporte de portadores de carga num modelo matemático proposto pelos mesmos. As equações utilizadas nas simulações numéricas não carregam características que definem exatamente o material onde

---

<sup>2</sup>São materiais cuja estrutura não é simétrica em relação ao centro. Materiais deste tipo podem apresentar propriedades como ferroeletricidade e comportamentos óticos não lineares de segunda ordem, que geram efeitos incomuns como resultado do processo de interação entre a luz e o material [22].

<sup>3</sup>EIEs são estruturas regulares no espaço de parâmetros cujos pontos possuem o mesmo valor de período.

os portadores de carga se movem. O sistema de equações é obtido a partir de equações iguais às de Dirac, que surgem por conta da estrutura do grafeno que é composta por duas subredes diferentes. Existem outros poucos materiais bidimensionais (ou quase) que possuem uma estrutura similar à do grafeno (com duas subredes) e que poderiam ter o movimento de seus portadores de carga descritos por equações de Dirac ou similares. Como exemplo, temos o Germaneno, um material construído por uma camada de átomos de germânio, organizado numa rede tipo favo de mel, mas que não é totalmente plano [30]. Por mais que existam outros materiais semelhantes, ao longo desta tese trataremos nosso modelo como se fosse um chip de grafeno.

Esta tese está organizada da seguinte forma: No Capítulo 2, serão apresentados os fundamentos de sistemas dinâmicos e de sistemas de catracas. Nas seções pertencentes a este capítulo são discutidos e explicados detalhadamente conceitos gerais, assim como alguns pontos específicos necessários para a compreensão do trabalho. Primeiro, serão definidos os sistemas dinâmicos e suas classificações de acordo com a forma com que o tempo é representado no sistema. Discutiremos as propriedades de conservação (ou não) de energia destes sistemas, como isto influencia na sua dinâmica e uma das consequências da dissipação: a existência de atratores e de um comportamento assintótico. Abordaremos a definição de caos e uma quantidade que possibilita quantificá-lo, conhecida como *expoente de Lyapunov*, assim como o método de cálculo de tal indicador.

No capítulo 3, discutiremos as características e particularidades do primeiro sistema abordado nesta tese, a catraca clássica conservativa submetida ao método *bailout embedding*, como também os resultados que obtivemos a partir de nossas investigações. Nossos resultados são provenientes de simulações numéricas, com códigos programados na linguagem Fortran. O objetivo neste capítulo é estudar uma catraca clássica sob influência de outro tipo de dissipação, que é atribuída ao sistema a partir do acoplamento que surge como consequência do método *bailout embedding*. Almejamos averiguar quais os efeitos desta dissipação indireta no sistema e se é possível encontrar regiões com valores ideais para a corrente de catraca, associados às EIEs.

No capítulo 4, serão exibidas algumas características do grafeno, a fim de fundamentar sua escolha para a construção do modelo de chip desenvolvido a partir de uma monocamada deste material. Posteriormente, serão discutidos os mecanismos de funcionamento do dispositivo, suas limitações e os resultados obtidos através das simulações numéricas realizadas. Um estudo primário do modelo, reportado na Referência [29], indica a existência de corrente de catraca no dispositivo. Expandiremos o intervalo investigado pelos autores, variando diferentes parâmetros do sistema em busca de uma maior variedade de comportamentos que envolvem o movimento ordenado não direcionado de partículas no chip. Nossos resultados são provenientes de simulações numéricas, com códigos programados na linguagem Fortran.

No capítulo 5 se encontram as considerações finais da tese.

## 2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Os conceitos apresentados neste capítulo (até a Seção 2.2) são explicados com base nos conteúdos das referências [1, 31, 32, 33]. Sempre que necessário, haverá uma citação explícita da referência.

### 2.1 SISTEMAS DINÂMICOS

Existem duas classes de sistemas dinâmicos que são definidas a partir da forma como o tempo aparece nas equações: para tempo discreto temos a representação por mapas e para tempo contínuo a representação por equações diferenciais. Sistemas dinâmicos cujo tempo é contínuo também são conhecidos como fluxos e podem ser escritos em uma forma geral, considerando que o sistema seja autônomo, por

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{F}(\mathbf{x}), \quad (2.1)$$

onde o ponto em  $\dot{\mathbf{x}}$  denota uma derivada temporal,  $\dot{\mathbf{x}} \equiv d\mathbf{x}/dt$ . Os componentes do vetor  $\mathbf{x}$  são as variáveis do sistema e representam grandezas físicas que mudam ao longo do tempo, como por exemplo posição e velocidade. As componentes do vetor  $\mathbf{F}$  são funções determinadas pelo modelo estudado. Sistemas conhecidos como mapas possuem como principal característica a variação temporal discreta. Suas equações são relações de recursão que utilizam um estado  $n$  para definir um estado futuro  $n + 1$  [31, 33]. Considerando o sistema autônomo, podemos definir um mapa em forma geral pela expressão:

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{M}(\mathbf{x}_n), \quad (2.2)$$

sendo os componentes do vetor  $\mathbf{M}$  as funções que regem a evolução temporal e os componentes do vetor  $\mathbf{x}_{n+1}$  e  $\mathbf{x}_n$  as variáveis no passo de iteração  $n + 1$  e  $n$ . Tanto em sistemas contínuos como em sistemas discretos, o espaço formado pelas variáveis do sistema é conhecido como *espaço de fase*, onde cada ponto deste espaço representa um estado do sistema físico.

Mapas podem ser obtidos a partir de equações diferenciais, com o objetivo de simplificar a análise de trajetórias contínuas. Este método foi desenvolvido por Henri Poincaré e consiste na redução da dimensão de um sistema  $k$ -dimensional para um com dimensão  $(k - 1)$ . Para tal, uma hipersuperfície é definida e analisam-se as interseções entre a trajetória do sistema e a hipersuperfície estabelecida, considerando o sentido de perfuração. Na Figura 2.1, é definida uma superfície  $S$  num espaço tridimensional, e a trajetória  $C$  (solução de uma equação diferencial) percorre o espaço. No instante em que a

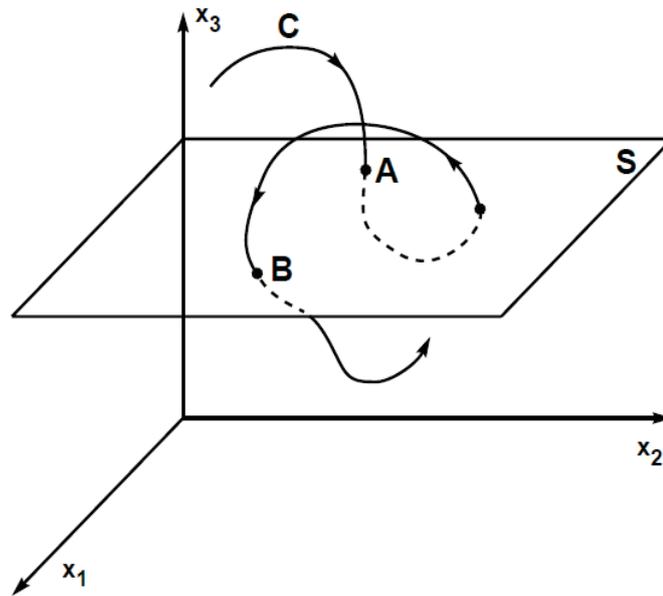


Figura 2.1: Ilustração do método de obtenção do *mapa de Poincaré*. O mapa é definido a partir das perfurações descendentes da superfície  $S$  pela curva de solução  $C$  de uma equação diferencial, de forma que  $G(A) = B$ , e assim por diante. Ilustração retirada da referência [1].

trajetória  $C$  atravessa a superfície  $S$  no sentido de cima para baixo, é demarcado o ponto  $A$ , a trajetória atravessa a superfície no sentido de baixo para cima, que não é contabilizado para o mapeamento, e perfura novamente a superfície no sentido descendente no ponto  $B$ . Temos, então, o mapeamento do ponto  $B$  em termos do ponto  $A$ , de forma que o *mapa de Poincaré* é definido como o mapa  $G$  tal que  $G(A) = B$ . Dado  $A$ , as equações diferenciais podem ser resolvidas com  $A$  como o valor inicial e o ponto  $B$  como o final. Portanto,  $A$  determina somente  $B$  e isto garante que o mapa  $G$  é bem definido. Este mapa pode ser iterado para encontrar todos os pontos subsequentes que atravessam  $S$  e muito do comportamento dinâmico da trajetória  $C$  é mantido no mapa  $G$ . Por exemplo, o mapa reflete comportamentos periódicos, quase periódicos ou caóticos que a trajetória  $C$  pode apresentar [31].

Além do critério da evolução temporal, no âmbito da física, um sistema dinâmico pode ser classificado levando em conta a conservação (ou não) da energia. Podemos classificá-lo entre conservativo ou dissipativo. Um sistema é dito conservativo quando sua energia total é conservada, e é dissipativo quando há diminuição de sua energia ao longo do tempo. Para exemplificar, tomemos a lei de Newton  $F = m\ddot{x}$  e consideremos uma partícula de massa  $m$  se movendo ao longo do eixo  $x$ , que está sujeita a uma força  $F(x)$ . A equação de movimento é

$$m\ddot{x} = F(x). \quad (2.3)$$

Assumimos que  $F$  é independente de  $\dot{x}$  e  $t$ , não havendo nenhum tipo de amortecimento, fricção ou outras forças dependentes do tempo agindo sobre a partícula. Partindo das

suposições feitas, denotemos a energia potencial como  $V(x)$  definida a partir de  $F(x) = -dV/dx$ . Então,

$$m\ddot{x} + \frac{dV}{dx} = 0. \quad (2.4)$$

Se multiplicarmos ambos os lados por  $\dot{x}$  teremos

$$m\dot{x}\ddot{x} + \frac{dV}{dx}\dot{x} = 0, \quad (2.5)$$

e, uma vez que  $\frac{d}{dt}V(x(t)) = \frac{dV}{dx}\frac{dx}{dt}$ , obtemos a relação

$$\frac{d}{dt} \left[ \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + V(x) \right] = 0. \quad (2.6)$$

Portanto, para uma dada solução  $x(t)$ , a energia total do sistema

$$E = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + V(x) \quad (2.7)$$

é constante quando derivada em relação ao tempo, ou seja, é conservada [1].

Outra maneira de determinar a conservabilidade de um sistema dinâmico é através da conservação do volume do espaço de fase do sistema. Para tal, define-se um hipervolume de condições iniciais  $S_0$  em um espaço de fase  $k$ -dimensional e todas as condições iniciais são evoluídas no tempo. O hipervolume de  $S_0$  evoluirá para um hipervolume definido por  $S_t$  num dado tempo  $t$  e, se os volumes de  $S_0$  e de  $S_t$  forem iguais, ( $V_0 = V_t$ ), o sistema é dito conservativo [1, 32]. Se o volume inicial for maior que o final, ( $V_0 > V_t$ ), o sistema é dissipativo e se for menor, ( $V_0 < V_t$ ), uma interpretação possível é a de que o sistema recebe, por exemplo, energia de alguma fonte externa. Este é, essencialmente, o teorema de Liouville, que diz que um volume  $V$  do espaço de fase na vizinhança de um dado ponto  $(q, p)$  se mantém constante no tempo em sistemas conservativos [34]. Matematicamente, é possível averiguar se um sistema é conservativo ou não através de operações envolvendo suas derivadas. Para fluxos, calculamos o *gradiente* das funções do sistema, que é definido pela operação

$$\nabla_i = \frac{\partial}{\partial x_i}, \quad (2.8)$$

de forma que  $i$  indica a  $i$ -ésima componente do operador e do vetor  $\mathbf{x}$  da Equação (2.1). Para mapas, analisamos o determinante da *matriz Jacobiana* composta pelos elementos

$$J_{i,m} = \frac{\partial M_i}{\partial x_m}, \quad (2.9)$$

sendo  $M_i$  os componentes do vetor  $\mathbf{M}(\mathbf{x}_n)$  e  $x_m$  os componentes do vetor  $\mathbf{x}_n$  da Equação (2.2). Definidas as operações envolvidas, classifica-se matematicamente um sistema dinâmico como conservativo ou dissipativo quando:

	Mapas	Fluxos
Conservativo	$ \det(\mathbf{J})  = 1$	$\nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{x}) = 0$
Dissipativo	$ \det(\mathbf{J})  < 1$	$\nabla \cdot \mathbf{F}(\mathbf{x}) < 0$

Tabela 2.1: Classificação de sistemas dissipativos ou conservativos a partir das derivadas do sistema.

### 2.1.1 Sistemas Dinâmicos Dissipativos e Atratores

Sistemas dissipativos podem surgir como modelos para descrever fenômenos físicos ou dispositivos onde a fricção, viscosidade, amortecimento ou outros tipos de processos que resultam na perda de energia do sistema estão presentes. Como apresentado na seção anterior, ao evoluir um conjunto de condições iniciais de um sistema dissipativo ao longo do tempo, ocorre a contração do volume do espaço de fase. Outra característica da dissipação é a irreversibilidade de um processo em determinado sistema, que é caracterizada como a quebra de simetria temporal.

Analiseemos um sistema dissipativo para interpretar o significado da contração do volume do espaço de fase: considerando um oscilador harmônico amortecido cujas equações de movimento são

$$\begin{aligned} x(t) &= A_0 e^{-\alpha t} \cos(\omega t + \phi), \\ v(t) &= A_0 e^{-\alpha t} [-\alpha \sin(\omega t + \phi) + \cos(\omega t + \phi)], \end{aligned} \quad (2.10)$$

num regime de amortecimento em que é possível oscilar diversas vezes antes de parar, com os valores dos parâmetros  $A_0 = 3,0$ ,  $\alpha = 0,15$  e  $\omega = \pi$ . Ao examinar o gráfico de tempo  $\times$  posição ou tempo  $\times$  velocidade, conforme o tempo passa, os valores da velocidade e da posição decaem a zero, como visto na Figura 2.2. Se pensarmos num conjunto de

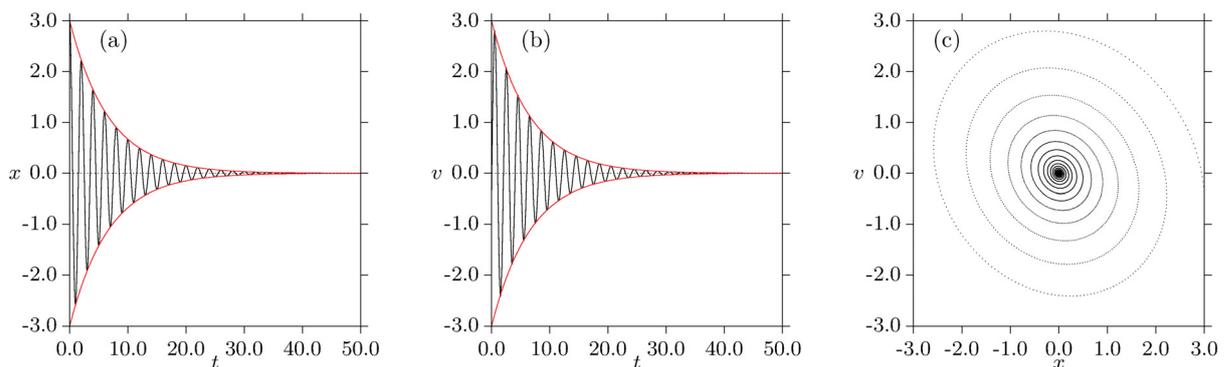


Figura 2.2: Trajetória de um oscilador harmônico amortecido. No Painel (a) está o gráfico de posição ( $x$ ) por tempo ( $t$ ), em (b) o gráfico de velocidade ( $v$ ) por tempo ( $t$ ) e, em (c), está o espaço de fase ( $x, v$ ) do sistema. As linhas em vermelho nos Painéis (a) e (b) são os valores para a função exponencial, responsável pelo amortecimento e delimitação da oscilação.

condições iniciais com diversos valores diferentes de  $(x_0, v_0)$ , utilizando o mesmo conjunto de parâmetros, todos culminarão no ponto  $(x, v) = (0, 0)$  (Painéis 2.2(a) e (b)). Neste caso, o ponto único para o qual o sistema evolui é conhecido como *ponto fixo estável* ou *atrator*

do tipo ponto fixo. A evolução temporal da trajetória no espaço de fase até o atrator é apresentada no Painel 2.2(c), onde cada ponto representa o estado  $(x, v)$  do sistema num instante de tempo diferente. A trajetória inicia na borda direita do espaço de fase, com  $(x, v) \approx (3, 0, -0, 2)$ .

Um *atrator* pode ser brevemente definido como um conjunto do espaço de fase fechado  $A$  com as seguintes propriedades [1]:

- $A$  é um *conjunto invariante*: qualquer trajetória  $\mathbf{x}(t)$  que inicie em  $A$ , permanece em  $A$  por todo o tempo.
- O conjunto  $A$  atrai um *conjunto aberto de condições iniciais*: Há um conjunto aberto  $U$  que contém  $A$ , de forma que se uma condição inicial  $\mathbf{x}(0) \in U$  se aproxima de  $A$  conforme o tempo passa, diz-se que  $A$  atrai as trajetórias que começam suficientemente próximas a ele. Quando  $t \rightarrow \infty$ ,  $x(t) \rightarrow A$ . O maior  $U$  possível é conhecido como a bacia de atração de  $A$ .
- $A$  é mínimo: não há nenhum subconjunto de  $A$  que satisfaça as condições supracitadas.

A bacia de atração de um atrator pode ou não preencher o espaço de fases por completo. Caso preencha, o único estado possível no regime assintótico é o atrator da bacia existente. Caso mais de uma bacia exista numa mesma configuração do espaço de fase, ao menos duas dinâmicas assintóticas diferentes existirão. Neste caso, o atrator para o qual o sistema tende a evoluir depende das condições iniciais escolhidas. A coexistência de dois ou mais atratores faz com que o sistema seja *multiestável* [35, 36].

Atratores podem ser classificados de acordo com o comportamento da trajetória no estado assintótico do sistema:

- Atrator de ponto fixo: Um ponto no espaço de fase para onde as trajetórias são atraídas. (Como, por exemplo, na Figura 2.2).
- Atrator periódico (torus): A trajetória repete um caminho fechado no espaço de fase.
- Atrator quase-periódico: A trajetória realiza um movimento regular, mas sem se fechar sobre si.
- Atrator caótico: Trajetória caótica, que apresenta grande sensibilidade à mudanças nas condições iniciais.
- Atrator estranho não-caótico: Trajetória que apresenta comportamento complexo e não periódico, porém não caótica. [37]

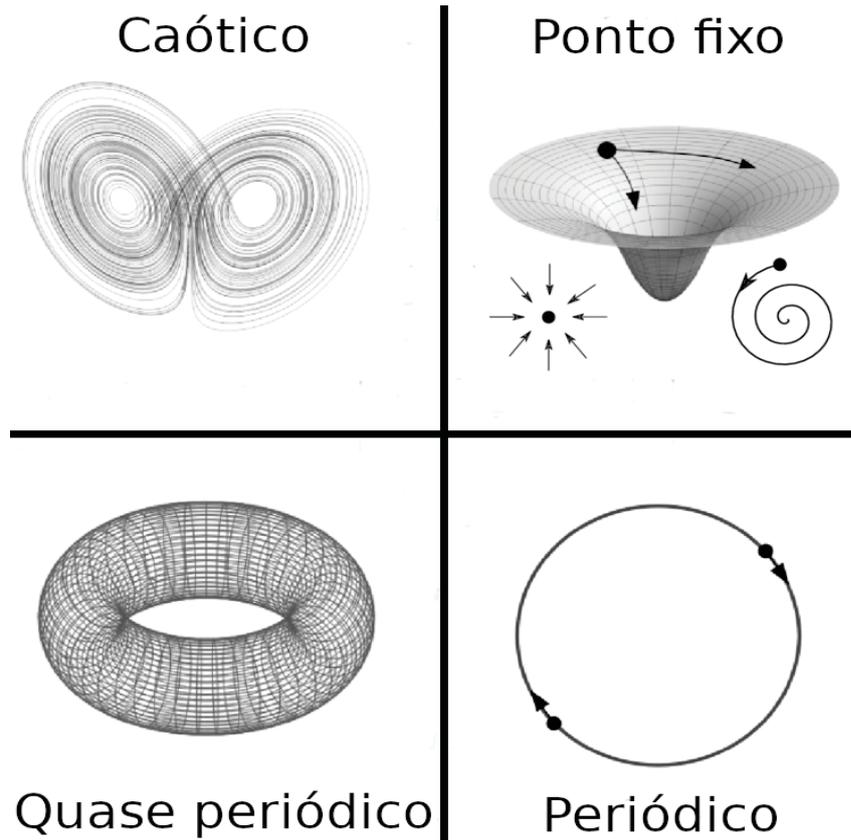


Figura 2.3: Ilustração dos tipos de atratores encontrados em sistemas dinâmicos. Figura feita com base na referência [2].

Os tipos de atratores são ilustrados na Figura 2.3. Outra forma de identificar tal comportamento é através de medidas calculadas em seu estado assintótico. A mais comum delas é o expoente de Lyapunov, que mede a taxa de afastamento ou aproximação de duas trajetórias que são iniciadas infinitesimalmente próximas.

### 2.1.2 Caos e expoente de Lyapunov

O termo caos é comumente associado à imprevisibilidade de algum fenômeno ou situação. De fato, na área de sistemas dinâmicos, podemos dizer que um sistema é caótico quando há algum tipo de imprevisibilidade em seu comportamento, mas é importante ressaltar que esta constatação somente é válida quando há mudança nas condições iniciais. Quando trata-se de um sistema determinístico, a reprodução de experimentos com a mesma configuração deve ser sempre a mesma, desde que a condição inicial seja mantida exatamente. Ou seja, caoticidade e aleatoriedade são coisas distintas: enquanto a primeira pode ter seu comportamento alterado drasticamente ao mudar sua condição inicial mesmo que infinitesimalmente, a segunda é imprevisível para toda e qualquer realização, independente das condições iniciais e parâmetros serem mantidos ou não.

O expoente de Lyapunov é uma medida que é capaz de quantificar a sensibilidade à mudança de condições iniciais que sistemas dinâmicos podem apresentar. Em suma,

tal quantidade explicita a taxa exponencial com que duas trajetórias, separadas por uma distância infinitesimal em  $t = 0$ , se aproximam ou se afastam. Caso as trajetórias se aproximem ou mantenham uma taxa de afastamento constante durante a evolução do sistema, podemos dizer que estas são trajetórias regulares e que pequenas mudanças nas condições iniciais não resultam em um comportamento caótico. Caso se distanciem com uma taxa exponencial, então sim, são classificadas como caóticas.

Consideremos um mapa unidimensional e tomemos duas condições iniciais, uma com coordenada  $x_0$  e outra com coordenada  $x_0 + \delta_0$ , onde  $\delta_0$  é um distanciamento infinitesimal. Passadas  $N$  iterações do mapa, que pode ser definido como  $x_{j+1} = M(x_j)$ , a distância entre as duas trajetórias agora é dada por  $\delta_N$ . A relação entre  $\delta_N$  e  $\delta_0$  pode ser explicitada pela expressão

$$|\delta_N| \sim |\delta_0|e^{\lambda N}, \quad (2.11)$$

onde  $\lambda$  é o expoente de Lyapunov. Isolando o expoente na expressão acima, o reescrevemos como

$$\lambda = \lim_{\delta_0 \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \left( \left| \frac{\delta_N}{\delta_0} \right| \right). \quad (2.12)$$

A distância  $\delta_N$  é a distância entre as duas trajetórias, iniciadas em  $x_0$  e  $x_0 + \delta_0$ , e pode ser expressada utilizando os valores assumidos pelo mapeamento  $M(x_j)$ :

$$\delta_N = M^{(N)}(x_0 + \delta_0) - M^{(N)}(x_0), \quad (2.13)$$

onde  $M^{(N)}$  é a  $N$ -ésima iteração do mapa. Desta maneira, obtemos  $\lambda$  a partir de

$$\lambda = \lim_{\delta_0 \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \left( \left| \frac{M^{(N)}(x_0 + \delta_0) - M^{(N)}(x_0)}{\delta_0} \right| \right), \quad (2.14)$$

que pode ser expressada na forma da derivada de  $M^{(N)}$  calculada em  $x_0$ , ao considerarmos que  $\delta_0$  é um incremento infinitesimal. Temos, então,

$$\lambda = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \left| \frac{dM^{(N)}(x)}{dx} \right|_{x=x_0}. \quad (2.15)$$

Aplicando a regra da cadeia à derivada:

$$\left. \frac{dM^{(N)}(x)}{dx} \right|_{x_0} = \left. \frac{dM(x)}{dx} \right|_{x_{N-1}} \left. \frac{dM(x)}{dx} \right|_{x_{N-2}} \cdots \left. \frac{dM(x)}{dx} \right|_{x_0}, \quad (2.16)$$

com o índice  $j$  de  $x_j = M^j(x_0)$  indicando a  $j$ -ésima iteração do mapa. Podemos, agora, escrever  $\lambda$  em termos de um produto:

$$\lambda = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \prod_{j=0}^{N-1} \left| \frac{dM(x)}{dx} \right|_{x=x_j}. \quad (2.17)$$

E então, utilizando as propriedades do logarítmico, escrevemos  $\lambda$  como

$$\lambda = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{j=0}^{N-1} \ln \left| \frac{dM(x)}{dx} \right|_{x=x_j}. \quad (2.18)$$

Tratando-se de um mapa unidimensional, existe apenas um expoente de Lyapunov. Para mapas com  $D$  dimensões, haverão  $D$  expoentes de Lyapunov associados, e podemos calcular o *espectro de Lyapunov* do sistema.

Para mapas com  $D > 1$  dimensões, podemos classificar o comportamento do mesmo através do maior expoente de Lyapunov (MEL). Se o MEL é positivo, o comportamento do sistema é caótico ou hipercaótico<sup>1</sup>, se é nulo refere-se a quase-periodicidade e se é negativo significa que a trajetória é periódica.

## 2.2 CATRACAS DETERMINÍSTICAS

A estrutura desta seção tem como base o capítulo 3 da referência [38].

Os estudos de sistemas com foco no efeito de catraca (*ratchet effect*), ganharam destaque a partir da apresentação de um mecanismo descrito no primeiro volume da série Feynman Lectures on Physics [3]. Esse mecanismo, ilustrado na Figura 2.4, consiste em duas caixas, identificadas pelos índices 1 e 2, ambas preenchidas por um gás à mesma temperatura  $T_1 = T_2$ . As caixas estão conectadas por um eixo comum: a caixa 1 contém paletas, enquanto a caixa 2 possui uma catraca acoplada a uma lingueta. No centro do eixo há uma polia, que sustenta um objeto com massa, representado como uma pulga no exemplo do autor. A gravidade gera um torque sobre o eixo devido à massa suspensa, mas esse movimento é bloqueado pela lingueta. As conexões entre o eixo e as caixas são consideradas ideais, permitindo que as paletas na caixa 1 girem em resposta ao torque gerado pelo movimento do gás. Como o movimento das partículas é aleatório, o torque resultante também possui direção e intensidade aleatórias. Entretanto, a catraca na caixa 2 restringe o movimento a um único sentido, fazendo com que as paletas girem de maneira a elevar a pulga. Nesse cenário, o mecanismo aparentaria realizar trabalho espontaneamente mesmo quando os dois corpos estão em equilíbrio térmico.

Modelos como esse, que sugerem a realização de trabalho com eficiência acima do limite termodinâmico, são classificados como moto-perpétuos. No entanto, uma análise mais detalhada revela limitações importantes. Um dos problemas surge quando a lingueta sobe para permitir o movimento da catraca; para retomar sua posição original, seria necessário adicionar uma mola à lingueta. Em um sistema sem dissipação, onde todos os componentes são perfeitamente elásticos, essa mola causaria um comportamento imprevisível: ao retornar, a lingueta colidiria com os dentes da catraca, potencialmente

---

<sup>1</sup>O hipercaos é definido para casos com  $D \geq 2$  em mapas e  $D \geq 4$  em fluxos, onde pelo menos dois dos expoentes são positivos.

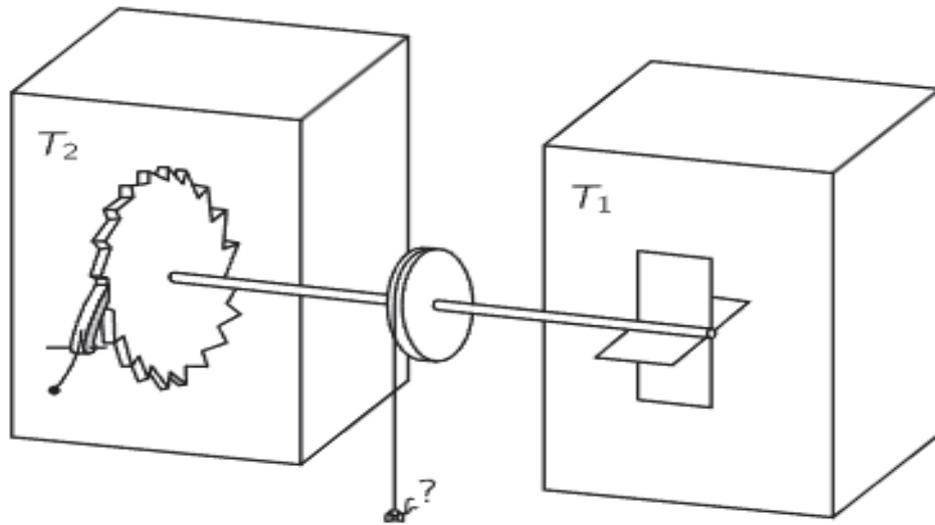


Figura 2.4: Esquemática do dispositivo de catraca que Feynman propôs. Ao lado direito, uma caixa preenchida com um gás que se encontra a uma temperatura  $T_1$  comporta as paletas responsáveis por gerar movimento. Ao lado esquerdo há outra caixa, cujo gás que a preenche está a temperatura  $T_2$  e onde se encontra a catraca e a lingueta que permitem ou proíbem o movimento, a depender da direção. A catraca e as paletas são conectadas por um eixo, responsável por transmitir o movimento de uma caixa para outra. No centro do eixo e fora das delimitações das duas caixas, está uma polia com uma pulga (objeto com massa) suspensa. Figura retirada de [3].

permitindo o movimento reverso. Essa inversão resulta em um movimento médio nulo. Assim, a dissipação de energia é essencial para viabilizar o movimento direcionado do sistema.

Até o momento, constatamos que são necessárias duas condições para que o movimento direcionado ocorra espontaneamente: a quebra de simetria espacial e a existência de dissipação no sistema. Contudo, Feynman apresenta outro argumento, referente à temperatura de cada uma das caixas. Quando o sistema se encontra em equilíbrio térmico, a probabilidade da lingueta ser levantada e permitir que a catraca gire no sentido oposto é a mesma que a de mover a pá e fazer com que a lingueta se mova por conta da rotação da catraca. Isso se dá ao fato de que a força necessária para fazer com que a lingueta levante (força contra a mola que mantém a lingueta na posição 'inicial') é a mesma, e a probabilidade de que o movimento browniano das partículas seja capaz de realizar tal feito é igual para os dois casos, uma vez que tal probabilidade depende da temperatura do gás. Portanto, para que o movimento direcionado sem viés ocorra, além da dissipação e da quebra de simetria espacial, também é imprescindível que haja desequilíbrio térmico, mais rigorosamente, é preciso que  $T_1 > T_2$ . De fato, a necessidade do sistema se encontrar fora de equilíbrio térmico foi confirmada experimentalmente em escala molecular [39, 40, 41] na síntese do tripticeno<sub>4</sub>heliceno, onde todos os componentes essenciais foram integrados em uma única molécula. O catavento de tripticeno desempenha o papel de catraca circular e também de pás, enquanto o heliceno funciona como trinco, garantindo a assimetria necessária ao sistema. Esses dois elementos estão ligados por uma única ligação química,

permitindo um grau de liberdade rotacional interno. Utilizando técnicas de ressonância magnética nuclear, os experimentos confirmaram que, em equilíbrio térmico, não há uma direção preferencial de rotação, conforme previsto [21].

A ideia central para o desenvolvimento do dispositivo é a de que introdução de assimetria espacial seria capaz de gerar movimento direcionado. A assimetria espacial, no exemplo visto, aparece por conta da catraca, que privilegia um dos sentidos de giro no sistema. Para a existência do movimento direcionado, no entanto, se faz necessária a existência da dissipação, por menor que seja [42], e que o sistema esteja em desequilíbrio térmico (fora do equilíbrio). O modelo apresentado e discutido no livro de Feynman deu origem à área de estudo conhecida como 'efeito catraca'. Para exemplificar o funcionamento de um dispositivo onde o efeito catraca possa ser percebido, observemos o funcionamento de um sistema, ilustrado na Figura 2.5. Trata-se de um conjunto de partículas que são

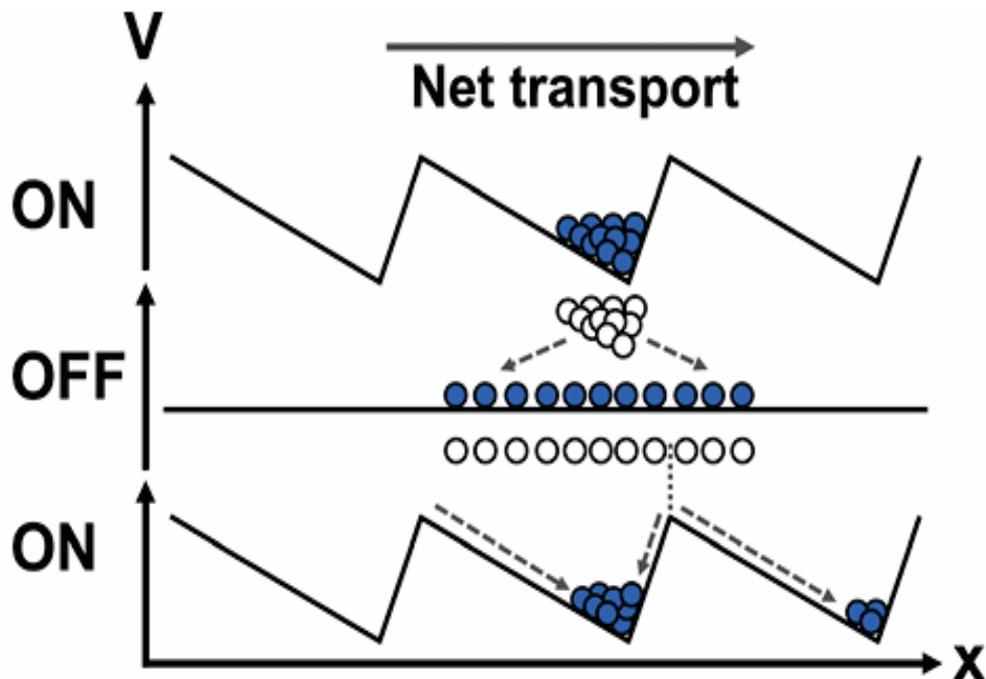


Figura 2.5: Esquemática de um dispositivo que transporta matéria sem aplicação de uma força líquida. Um potencial assimétrico, com formato de dentes de serra pode aprisionar um conjunto de partículas. Este potencial pode ser acionado e desligado, aprisionando e libertando as partículas. Figura retirada de [4].

submetidas periodicamente a um potencial. Num instante inicial (no topo da figura), as partículas são armadilhadas por um potencial em formato de dente de serra. Este potencial pode ser ligado e desligado, aprisionando e libertando as partículas. Num segundo instante de tempo, o potencial é desligado e as partículas se espalham. Num terceiro momento, o potencial é religado e as partículas são aprisionadas novamente. Por conta da assimetria do potencial, o processo de aprisionamento das partículas tem como efeito o transporte líquido das partículas no sentido da esquerda para a direita. As partículas que, durante

a fase de espalhamento, vão para a esquerda, voltam a se mover para a direita com a reativação do potencial [4]. A quebra de simetria espacial surge do formato assimétrico do potencial, a ativação/desativação do potencial tira as partículas do equilíbrio, enquanto a dissipação está presente no processo de colisão das partículas. Para estudar de maneira genérica o fenômeno que dá origem ao efeito de catraca, propõe-se uma equação diferencial que sirva como um modelo simplificado desta classe de sistemas. No âmbito da Mecânica Clássica, um sistema de catraca pode ser descrito pela equação

$$m\ddot{\mathbf{x}} = - \int_{-\infty}^t K(t-t')\dot{\mathbf{x}}dt' + \mathbf{F}(\mathbf{x},t) + \xi(t). \quad (2.19)$$

Sendo uma forma generalizada da equação de Langevin, onde o termo  $\mathbf{F}(\mathbf{x},t)$  adicionado é uma força provinda de um potencial dependente do tempo. a Equação (2.19) descreve a interação entre um sistema de interesse e um banho térmico. O banho se trata de um sistema muito maior, em equilíbrio térmico, cujas alterações oriundas da interação com o sistema de interesse são tão mínimas que podem ser ignoradas. A influência do banho sobre o sistema de interesse é mediada pelas grandezas  $K(t-t')$ , que é um núcleo de memória relacionado a dissipação [43], e pelo ruído estocástico  $\xi(t)$ , relacionado às flutuações térmicas do banho. O termo dissipativo trata-se de uma integral num instante passado  $t'$  e o termo estocástico é um ruído branco, com distribuição gaussiana e as propriedades a seguir:

$$\begin{aligned} \langle \xi(t) \rangle &= 0, \\ \langle \xi(t)\xi(t') \rangle &= \frac{2k_B T}{m} K(t-t'), \end{aligned} \quad (2.20)$$

onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann,  $T$  é a temperatura do banho e as médias são calculadas para todas as realizações do ruído térmico. A modelagem do ruído é dada por uma distribuição gaussiana centrada em zero.

O ruído é modelado por uma distribuição gaussiana com média zero. A segunda expressão reflete um caso específico do teorema de flutuação-dissipação, que estabelece uma relação entre as correlações do ruído térmico em tempos distintos e os mecanismos de dissipação. Além da dissipação, os elementos necessários para caracterizar o sistema como uma catraca ainda precisam ser identificados. A assimetria espacial e a assimetria temporal são introduzidas pela força  $\mathbf{F}(\mathbf{x},t)$ , derivada de um potencial assimétrico no espaço e periódico tanto no domínio temporal quanto espacial. Esse forçamento periódico é essencial para que o movimento resulte exclusivamente da interação entre a partícula e o potencial, sem que seja direcionado por uma força externa. A dependência temporal, por sua vez, desempenha um papel crucial ao remover o sistema do equilíbrio térmico, algo que não seria possível com um potencial estático [38].

No limite apropriado de acoplamento fraco, é possível derivar a Equação (2.19) para um sistema acoplado a um banho via um potencial linear nas variáveis do sistema, mas genérico nas variáveis do banho. No regime clássico, é possível mostrar que a equação

de Langevin abrange toda uma classe de interações entre o sistema e o banho, e a natureza detalhada destas interações não afeta a forma da equação ou a relação flutuação-dissipação. Portanto, uma dada equação de Langevin pode ser usada para representar uma grande variedade de sistemas a nível fenomenológico [43].

A aproximação markoviana leva em consideração que os estados futuros do sistema não dependem dos estados passados, somente do estado presente [44]. Quando os tempos relevantes para os processos de interesse são muito maiores do que o tempo de relaxação do sistema (intervalo característico no qual os efeitos de memória são significativos), é possível adotar uma aproximação markoviana, na qual o termo de dissipação  $K(t-t')$  pode ser aproximado por uma função delta  $\lambda\delta(t-t')$  [43]. Portanto, como a memória guardada pelo termo  $K(t-t')$  não possui influência nas medidas de interesse dos estudos desenvolvidos neste trabalho, a aproximação markoviana pode ser adotada.

### 3 O EFEITO DO *BAILOUT EMBEDDING* NUM SISTEMA DE CATRACA

A descrição do movimento de partículas de tamanho finito em escoamentos de fluido se mostrou um desafio significativo na dinâmica dos fluidos ao longo de gerações. Apesar de esse problema ser de uma aplicação das equações de Navier-Stokes com condições de contorno móveis, resolver diretamente essas equações é um processo complexo e pouco prático. Desde o século XIX, esforços foram feitos para desenvolver aproximações que permitissem descrever o movimento de pequenas partículas rígidas em escoamentos como equações diferenciais ordinárias, tratando o campo de velocidade do escoamento como conhecido. No entanto, realizar tais aproximações de maneira autoconsistente envolve dificuldades conceituais, e muitos resultados iniciais continham erros. O avanço decisivo veio com os trabalhos de Maxey e Riley [45], que formularam as equações de movimento para pequenas partículas esféricas e rígidas advectadas por escoamentos suaves, enquanto Auton *et al.* [46], baseando-se no trabalho de Taylor [47], corrigiram um termo referente à massa adicional [48].

As equações de Maxey-Riley oferecem uma base para explorar a dinâmica global de partículas individuais de tamanho finito advectadas, possibilitando o uso de métodos da área de sistemas dinâmicos. Desde os trabalhos pioneiros de Aref [49], a análise de partículas advectadas em escoamentos de fluido tem sido um tema importante no estudo do caos e de regimes dinâmicos complexos. No entanto, os primeiros estudos adotaram a suposição de que as partículas se comportariam como rastreadores passivos, ignorando seu próprio tamanho e a inércia. Quando o tamanho finito é levado em conta, a inércia se torna um fator influente, pois partículas com tamanho finito deixam de ser completamente controladas pelo movimento do fluido que as circunda e passam a exibir dinâmicas próprias, distintas das do escoamento. Exemplos incluem o comportamento de partículas poluentes suspensas na atmosfera e de organismos planctônicos nos oceanos [48].

A dinâmica de pequenas partículas esféricas imersas em fluidos foi extensamente investigada em uma série de estudos publicados no período dos anos 2000, utilizando um método denominado *bailout embedding*. Thyagu e Gupte [50, 51], Motter *et. al* [52], Babiano *et. al* [53] e Cartwright *et. al* [54, 55, 48] são algumas das referências que utilizaram o *bailout embedding* para estudar controle de caos Hamiltoniano, transporte e difusão em escoamentos de fluido, dinâmica de partículas em escoamentos de fluidos caóticos e a detecção de ilhas KAM<sup>1</sup> minúsculas no espaço de fases de sistemas Hamiltonianos.

Neste capítulo, pretendemos aplicar o método supracitado para investigar seus efeitos num mapa de catraca. O método já foi aplicado a mapas Hamiltonianos, incluindo

---

<sup>1</sup>Ilhas KAM são ilhas de regularidade que se encontram dentro do mar de caos no espaço de fase de sistemas Hamiltonianos. Como exemplo, temos a ilha central no Painel 3.3(a).

o de Chirikov Taylor [56], que possui estrutura semelhante ao mapa que descreve uma catraca determinística. Como já mencionado na Introdução, nosso interesse é entender se, ao submetê-lo ao *bailout embedding*, o mapa de catraca é capaz de gerar transporte da mesma forma que em sua forma original e se os valores ótimos para o transporte estão relacionados a EIEs no espaço de parâmetros.

A principal vantagem deste método é seu caráter de acoplamento, que pode ser aplicado a sistemas simples e de baixa dimensionalidade, com custo computacional muito menor do que a solução de equações comumente usadas na área de hidrodinâmica. O sistema escolhido para aplicar o *bailout embedding* deve ser conservativo.

### 3.1 BAILOUT EMBEDDING

O método *bailout embedding* surge a partir de uma simplificação da equação de Maxey-Riley [45], adaptada para que possa ser acoplada a sistemas dinâmicos. A equação de Maxey-Riley descreve o movimento de pequenas partículas esféricas em fluido incompressível e é matematicamente descrita por:

$$\begin{aligned} \rho_p \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \rho_f \frac{D\mathbf{u}}{Dt} + (\rho_p - \rho_f)\mathbf{g} - \frac{9\nu\rho_f}{2a_0^2} \left( \mathbf{v} - \mathbf{u} - \frac{a_0^2}{6} \nabla^2 \mathbf{u} \right) \\ - \frac{\rho_f}{2} \left( \frac{d\mathbf{v}}{dt} - \frac{D}{Dt} \left[ \mathbf{u} + \frac{a_0^2}{10} \nabla^2 \mathbf{u} \right] \right) - \frac{9\rho_f}{2a_0} \sqrt{\frac{\nu}{\pi}} \int_0^t \frac{1}{\sqrt{t-\zeta}} \frac{d}{d\zeta} \left( \mathbf{v} - \mathbf{u} - \frac{a_0^2}{6} \nabla^2 \mathbf{u} \right) d\zeta, \end{aligned} \quad (3.1)$$

Sendo  $\mathbf{v}$  a velocidade da partícula,  $\mathbf{u}$  um campo de velocidade não perturbado na localização da partícula,  $\nu$  a viscosidade cinética do fluido,  $\rho_p$  a densidade da partícula,  $\rho_f$  a densidade do fluido,  $a_0$  o raio da partícula,  $t$  e  $\zeta(t)$  variáveis temporais (relacionadas a efeitos de memória) e  $g$  a gravidade. Ao lado direito da Equação (3.1) temos cinco termos, cada um se refere a um efeito da interação fluido-partículas:

- Primeiro termo  $\left[ \rho_f \frac{D\mathbf{u}}{Dt} \right]$  : Força que o fluido não perturbado exerce sobre a partícula;
- Segundo termo  $\left[ (\rho_p - \rho_f)\mathbf{g} \right]$  : Efeitos de flutuação;
- Terceiro termo  $\left[ \frac{-9\nu\rho_f}{2a_0^2} \left( \mathbf{v} - \mathbf{u} - \frac{a_0^2}{6} \nabla^2 \mathbf{u} \right) \right]$  : Força de Stokes, relacionada à fricção viscosa na superfície da esfera;
- Quarto termo  $\left[ \frac{\rho_f}{2} \left( \frac{d\mathbf{v}}{dt} - \frac{D}{Dt} \left[ \mathbf{u} + \frac{a_0^2}{10} \nabla^2 \mathbf{u} \right] \right) \right]$  : Adição de massa, devido a fixação do fluido na partícula;

- Quinto termo  $\left[ \frac{9\rho_f}{2a_0} \sqrt{\frac{\nu}{\pi}} \int_0^t \frac{1}{\sqrt{t-\zeta}} \frac{d}{d\zeta} \left( \mathbf{v} - \mathbf{u} - \frac{a_0^2}{6} \nabla^2 \mathbf{u} \right) d\zeta \right]$ : Força de Basset-Boussinesq, que leva em conta o arrasto adicional gerado pela história da aceleração relativa da partícula em relação ao fluido [57].
- Os termos proporcionais a  $a_0^2 \nabla^2$  são conhecidos como correções de Faxén, que surgem devido ao campo de velocidade não uniforme do fluido [58].

A derivada  $D\mathbf{u}/Dt$  é ao longo do caminho de um elemento de fluido e definida como

$$\frac{D\mathbf{u}}{Dt} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u}, \quad (3.2)$$

enquanto a derivada  $d\mathbf{u}/dt$  é ao longo da trajetória da partícula e dada por [58], [48]

$$\frac{d\mathbf{u}}{dt} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{u}. \quad (3.3)$$

As duas expressões acima são derivadas materiais, ou derivadas substanciais. Sendo  $\mathbf{u}$  um campo de velocidade escalar, os termos à esquerda da igualdade são as próprias derivadas materiais de  $\mathbf{u}$ ,  $\partial \mathbf{u} / \partial t$  é a variação local de  $\mathbf{u}$  no tempo e os termos com  $\nabla$  estão relacionados ao movimento do fluido. Para simplificar o modelo, assumiremos que  $D\mathbf{u}/Dt = d\mathbf{u}/dt$ . Utilizando aproximações para um pequeno número de Reynolds, desprezando efeitos de flutuação e as correções de Faxén, mantendo somente os termos de Bernoulli, a lei de Stokes e os termos de adição de massa, a equação fica

$$\rho_p \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \rho_f \frac{d\mathbf{u}}{dt} + \frac{9\nu\rho_f}{2a_0^2} (\mathbf{v} - \mathbf{u}) - \frac{\rho_f}{2} \left( \frac{d\mathbf{v}}{dt} - \frac{d\mathbf{u}}{dt} \right), \quad (3.4)$$

definindo

$$\gamma = \frac{2}{3} \frac{\alpha}{St} \quad \text{e} \quad \alpha = \frac{3\rho_f}{\rho_f + 2\rho_p}, \quad (3.5)$$

a equação do *bailout embedding* para a aplicação em sistemas contínuos é, então, dada por [59, 60, 61, 58]:

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} - \alpha \frac{d\mathbf{u}}{dt} = -\gamma (\mathbf{v} - \mathbf{u}). \quad (3.6)$$

Onde  $\alpha$  é um parâmetro que relaciona as densidades do fluido e da partícula e  $\gamma$  controla a dissipação do sistema. A quantidade  $St$  é o número de Stokes, que está relacionado à inércia da partícula e tende a zero quando o raio da partícula tende a zero. Dependendo do valor de  $\alpha$ , podemos ter três regimes diferentes, referentes ao comportamento das partículas em relação ao fluido [61]:

- Regime bolha: ( $\alpha > 1, \rho_f > \rho_p$ ) A densidade das partículas é menor que a do fluido;

- Regime aerossol ( $\alpha < 1, \rho_f < \rho_p$ ) A densidade das partículas é maior que a do fluido;
- Flutuação ( $\alpha = 1, \rho_f = \rho_p$ ) A densidade das partículas e do fluido são iguais e as partículas flutuam.

O comportamento do sistema pode mudar drasticamente de um regime para outro.

O modelo a tempo discreto análogo à Equação (3.6) não é obtido de uma derivação direta, mas sim observando algumas características cruciais da equação, sendo elas:

- No limite de  $\gamma \rightarrow \infty$ , a dinâmica do fluido conservativo deve ser recuperada;
- O parâmetro  $\gamma$  determina a contração do espaço de fase;
- No regime de baixa inércia, a contração do espaço de fase é proporcional a  $\gamma^{-1}(\alpha - 1)$ .

A proposição deste acoplamento foi feita em [52, 62], e tem como objetivo fazer possível a aplicação do método *bailout embedding* em sistemas mais simples como mapas. O acoplamento é da forma [50]

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_{n+1} &= \mathbf{M}(\mathbf{x}_n) + \boldsymbol{\delta}_n, \\ \boldsymbol{\delta}_{n+1} &= e^{-\gamma}[\alpha \mathbf{x}_{n+1} - \mathbf{M}(\mathbf{x}_n)], \end{aligned} \quad (3.7)$$

nas quais o mapa  $\mathbf{M}(\mathbf{x})$  representa o fluido ao qual a partícula está acoplada. As variáveis  $\mathbf{x}$  e  $\boldsymbol{\delta}$  são as coordenadas de configuração espacial e a velocidade de destacamento do fluido, respectivamente, e representam as coordenadas do espaço de fases  $(\mathbf{x}, \boldsymbol{\delta})$ .

O mapa que utilizamos para aplicar o *bailout embedding* se trata de uma catraca clássica, descrita pelas equações [63]

$$\begin{cases} p_{n+1} = \chi p_n + K [\sin(x_n) + a \sin(2x_n + \phi)], \\ x_{n+1} = p_{n+1} + x_n, \end{cases} \quad (3.8)$$

onde  $p$  é o momento,  $x$  a posição,  $K$  é o parâmetro de não linearidade e  $a$  e  $\phi$  controlam a assimetria existente por conta da soma dos senos. O estudo deste sistema se dá usualmente com valores de  $\chi < 1$ , pois é necessário haver dissipação no sistema para a observância do efeito de catraca. Como desejamos averiguar os efeitos que a quebra de simetria temporal introduzida pelo acoplamento acarretará, utilizaremos  $\chi = 1$ . Lembrando que há também a necessidade de que o sistema seja conservativo para que o método possa ser aplicado.

As equações do sistema a ser estudado são:

$$\begin{cases} p_{n+1} = p_n + K [\sin(x_n) + a \sin(2x_n + \phi)] + \delta_n^p, \\ x_{n+1} = p_n + K [\sin(x_n) + a \sin(2x_n + \phi)] + x_n + \delta_n^x, \\ \delta_{n+1}^p = e^{-\gamma} [\alpha p_{n+1} - (p_{n+1} - \delta_n^p)], \\ \delta_{n+1}^x = e^{-\gamma} [\alpha x_{n+1} - (x_{n+1} - \delta_n^x)]. \end{cases} \quad (3.9)$$

O sistema acoplado (3.9) descreve o movimento de uma partícula conservativa imersa num fluido viscoso em escoamento. O mapa de catraca clássica (Equação (3.8)) é acoplado às equações do *bailout embedding*, resultando no sistema acoplado (3.9). Quando  $\gamma \rightarrow \infty$  (consequentemente  $St \rightarrow 0$ ) o sistema (3.9) reduz-se ao conjunto de Equações (3.8) que descrevem o movimento de partículas num escoamento conservativo (considerando que  $\alpha$  é finito). Esta condição existe pois, no regime em que a partícula se torna pontual ( $St \ll 1$ ), se move totalmente de acordo com o escoamento [48]. Com valores de  $\gamma$  e  $\alpha$  finitos, os termos acoplados  $\delta_{n+1}^p$  e  $\delta_{n+1}^x$  são responsáveis por mediar a interação da partícula com o meio, expressando a influência do fluido no movimento das partículas nos termos  $\delta^p$  e  $\delta^x$  somados a  $p_{n+1}$  e  $x_{n+1}$ , respectivamente.

Algumas propriedades deste sistema devem ser destacadas:

- Quando  $\gamma \rightarrow \infty$ ,  $e^{-\gamma} \rightarrow 0$  e recupera-se o mapa desacoplado;
- No caso em que  $\alpha = 1$  e  $(\delta_0^p, \delta_0^x) = (0, 0)$ , obtemos novamente o mapa desacoplado;
- Para  $\gamma = 0$  também temos um caso conservativo, mas não igual ao mapa desacoplado.

## 3.2 RESULTADOS NUMÉRICOS

Nesta Seção, são discutidos os resultados obtidos por meio de simulações numéricas realizadas para estudar as propriedades dinâmicas e de transporte do mapa de catraca acoplado descrito matematicamente na Equação (3.9). Para tal, mantemos os valores dos parâmetros  $\{\phi, a\} = \{\pi/2, 1/2\}$  fixos em todas as simulações, enquanto investigamos a influência de  $K, \gamma$  e  $\alpha$ . Estes valores de  $\phi$  e  $\alpha$  garantem a existência da assimetria espacial no sistema (veja a seção 2.2). Embora haja interesse em abordar diferentes regimes caracterizados pela variação de  $\alpha$  (bolha, aerossol e de flutuação), neste trabalho restringiremos seus valores a  $\alpha \leq 0,9$ , devido à existência de uma região de divergência no espaço de parâmetros. Este intervalo de valores é referente ao regime aerossol.

Uma região de divergência ocupa parte do espaço de parâmetros quando  $\alpha > 1$ , pois a taxa de contração/dilatação  $\exp[-\gamma(\alpha - 1)]$  assume valores positivos neste intervalo. Enquanto o termo exponencial não for suficiente para suprimir o termo linear em  $\alpha$ , a injeção de energia faz com que as trajetórias diverjam. A Figura 3.1 é um espaço de

parâmetros  $\alpha \times \gamma$  com a paleta de cores identificando o valor da taxa de contração/dilatação  $\mathcal{C} = f(\gamma, \alpha) = \exp[-\gamma(\alpha - 1)]$ . As cores verde e ciano do gradiente na Figura 3.1 referem-se

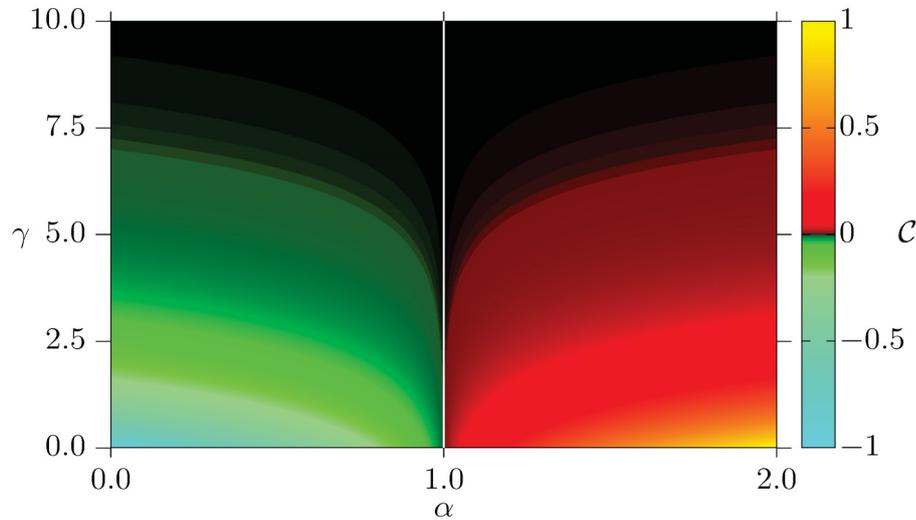


Figura 3.1: Espaço de parâmetros de  $\alpha \times \gamma$  para o valor da taxa de contração ou dilatação, representada pelo gradiente de cores.

a valores negativos da taxa de contração/dilatação e o sistema se encontra no regime dissipativo, para  $\alpha = 1, \mathcal{C} = 0$  (quando  $\delta_0^p$  e  $\delta_0^x$  são nulos) o sistema é conservativo e os valores correspondentes se encontram ao longo da linha branca central, as cores amarelo, laranja e vermelho indicam valores positivos da taxa de contração/dilatação. Como visto na Seção 2.2, para que ocorra o efeito de movimento direcionado sem viés, uma das condições é que a dissipação esteja presente no sistema, e este é o motivo da restrição do valor de  $\alpha$ .

Na Seção 2.1.2, é visto que o maior expoente de Lyapunov (MEL) é uma quantidade que pode indicar o comportamento do sistema (periódico, quase-periódico ou caótico) para uma determinada configuração de parâmetros e condições iniciais. Para investigar a dinâmica do mapa de catraca modificado e a influência do *bailout embedding*, calculamos o MEL ( $\lambda_1$ ) no espaço dos parâmetros que representam a viscosidade do fluido e a relação entre as densidades do fluido e da partícula. Para o cálculo numérico do MEL, utilizamos o método desenvolvido e apresentado em [64]. A Figura 3.2 ilustra o MEL no espaço de parâmetros de  $\alpha \times \gamma \in [0, 0; 2, 0] \times [0, 0; 10, 0]$  para  $K = 1, 5$  no Painel 3.2(a) e a separatriz de divergência no Painel 3.2(b). Utilizamos uma grade de  $1000 \times 1000$  pontos,  $10^6$  iterações transientes e  $10^5$  iterações para o cálculo do MEL. No Painel 3.2 as cores laranja e vermelho indicam valores do MEL positivos, a cor preta está relacionada às combinações de  $\alpha$  e  $\gamma$  que resultam em um MEL nulo e as cores azuis representam valores do MEL negativos. A cor branca denota condições iniciais que resultam em divergência. É possível notar que, para  $\alpha < 1$ , uma grande parte das combinações de parâmetros possíveis resultam em valores do MEL  $\leq 0$ , enquanto para  $\gamma \gtrsim 7,0$  o aspecto granular que mistura caos e expoente nulo caracteriza um comportamento transiente [65]. A curva separatriz da divergência

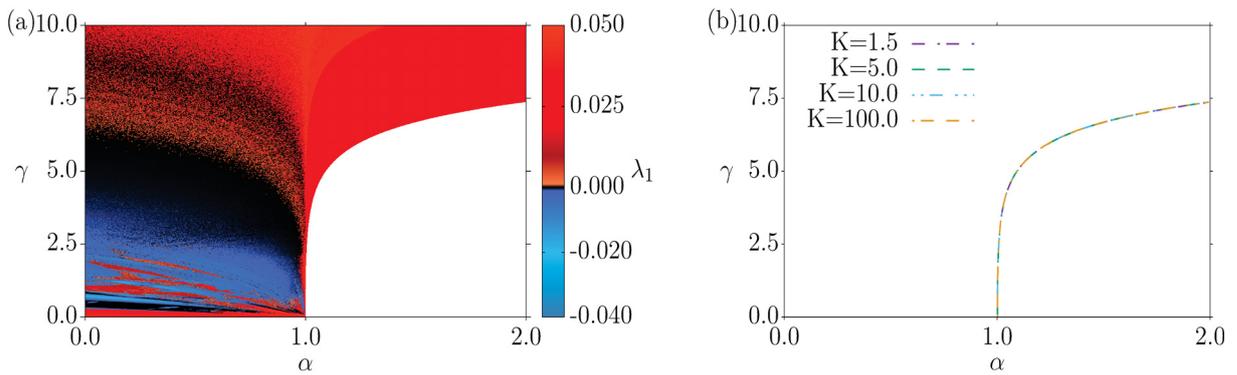


Figura 3.2: O Painel (a) ilustra o espaço de parâmetros de  $\alpha \times \gamma$  para o MEL, representado pelo gradiente de cores, e a área branca indica a região de divergência. No Painel (b), as curvas representam a separatriz de divergência para diferentes valores do parâmetro  $K$ . No Painel (a), cores em laranja e vermelho indicam comportamento caótico, a cor preta indica quase-periodicidade e tons em azul indicam periodicidade.

está ilustrada no Painel 3.2(b) para a mesma configuração de parâmetros e condições iniciais do Painel 3.2(a). A mudança no valor do parâmetro de não linearidade  $K$  não influencia na curva separatriz, i.e., a divergência do sistema surge por conta do efeito de contração/dilatação inserido no sistema pelo *bailout embedding*.

### 3.2.1 A dinâmica do espaço de fase

Para compreender as alterações na dinâmica do sistema causadas pelo acoplamento, iniciamos nossos estudos investigando o espaço de fase sob influência de diferentes valores para o parâmetro de dissipação  $\gamma$ . Na Figura 3.3 são apresentados, em quatro painéis, o espaço de fase do sistema para:  $\gamma = 10,0$  no Painel 3.3(a),  $\gamma = 7,5$  no Painel 3.3(b),  $\gamma = 5,0$  no Painel 3.3(c) e  $\gamma = 2,5$  no Painel 3.3(d), com  $K = 1,5$ ,  $\alpha = 0,4$ . O Painel 3.3(a) exibe uma dinâmica típica de sistemas conservativos, caracterizada pela mistura de regiões de caos e regularidade no espaço de fase. Diversos toros aperiódicos circundam um ponto fixo elíptico de período 1 próximo ao centro do painel, enquanto outra órbita periódica de período 4 é identificada mais próxima à borda da ilha de regularidade, que também possui toros aperiódicos que a orbitam. Fora da região de regularidade, o espaço de fase é permeado pelo denominado *mar de caos* [66]. Conforme  $\gamma$  diminui, há aumento de dissipação no sistema, no Painel 3.3(b) ( $\gamma = 7,5$ ) vemos que os toros aperiódicos se afastam do ponto fixo elíptico central e as trajetórias passam a se concentrar no entorno das ilhas de período 4 (vide o aumento da densidade de pontos). As órbitas aperiódicas também se tornam mais espessas, indicando uma espécie de perturbação no sistema, o que é causado pelo acoplamento. Para  $\gamma = 5,0$ , no Painel 3.3(c), os toros aperiódicos desaparecem e a densidade de pontos no mar de caos é muito menor, é possível ver que a maioria das trajetórias se encontra no entorno da órbita periódica de período 4, que é vista no Painel 3.3(a). Com o parâmetro dissipativo  $\gamma = 2,5$ , no Painel 3.3(d), observa-se que todas as condições iniciais convergem para um ciclo limite.

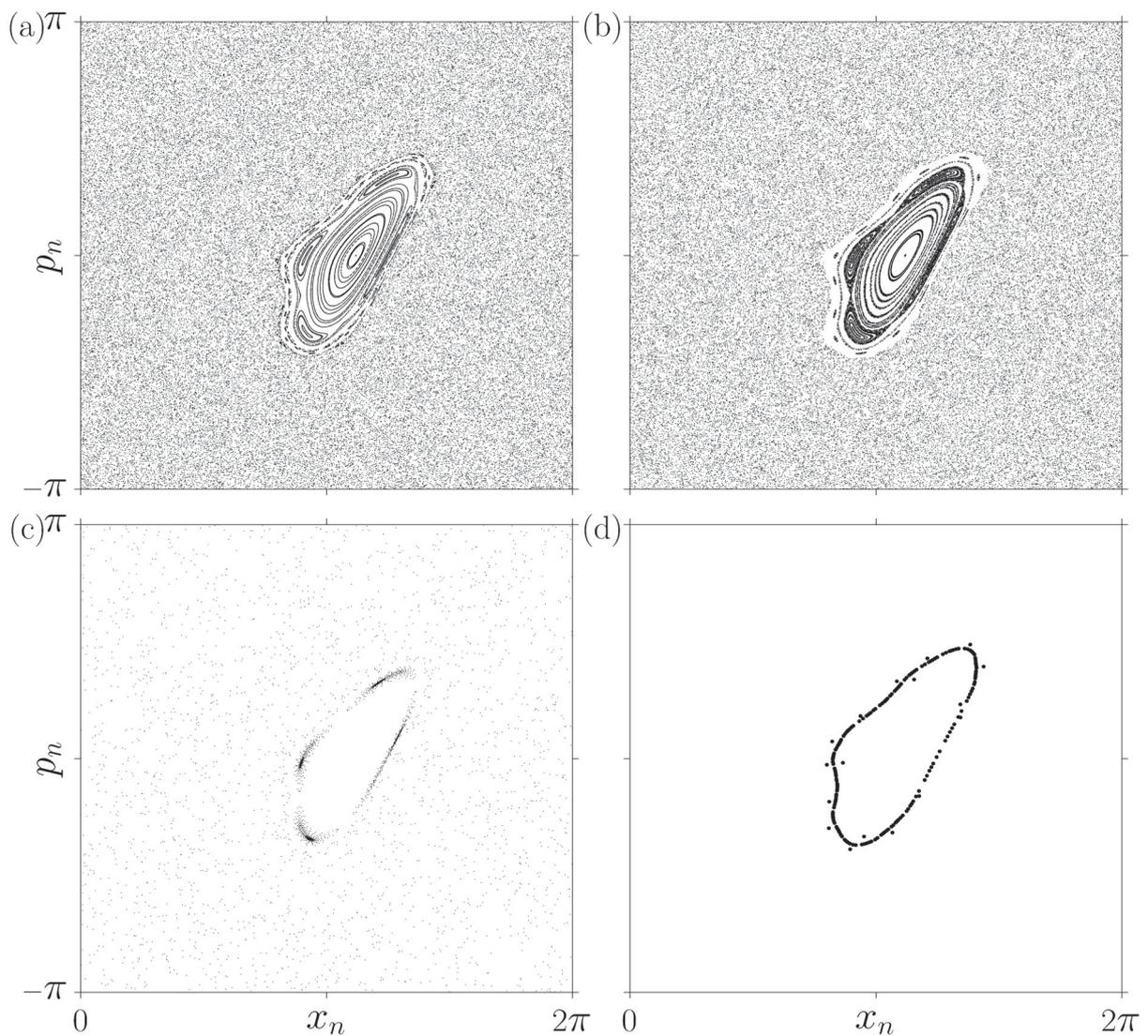


Figura 3.3: Dinâmica do espaço de fase  $(x_n, p_n)$  para o mapa de catraca acoplado (3.9) para  $K = 1, 5$ ,  $\alpha = 0, 4$  e diferentes valores de  $\gamma$ . Os valores das variáveis estão restritos ao intervalo  $(x_n, p_n) \in [0, 2\pi], [-\pi, \pi]$ .

### 3.2.2 Diagramas de Lyapunov

A quantidade de expoentes de Lyapunov de um sistema depende da dimensionalidade do mesmo, de acordo com a Seção 2.1.2. O sistema em estudo possui 4 dimensões, no entanto, focaremos nossas investigações apenas no MEL pois este é suficiente para diferenciar a dinâmica do sistema entre regular e caótica. A Figura 3.4 ilustra o MEL ( $\lambda_1$ ) no espaço de parâmetros  $K \times \gamma \in [0, 0, 1, 2], [0, 0, 0, 5]$  com uma grade de  $1000 \times 1000$  pontos, tempo transiente de  $10^6$  iterações e  $10^5$  iterações para o cálculo do MEL. Na cor preta estão indicados os MELs com valor nulo, os quais indicam uma dinâmica quase-periódica. Em vermelho e laranja estão os expoentes de valor positivo, que estão associados à dinâmica caótica, e regiões em azul indicam dinâmica periódica estável. Uma diversidade de comportamentos é visível no Painel 3.4(a). Grande parte do espaço de parâmetros é permeado pela dinâmica caótica, que é infiltrada por uma cadeia de estruturas periódicas

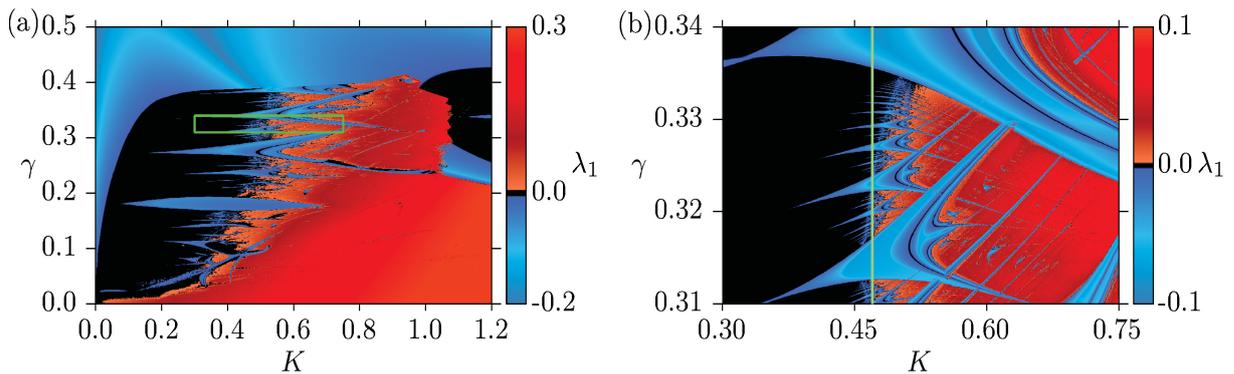


Figura 3.4: Diagrama de Lyapunov ilustrando o valor do MEL usando o gradiente de cores posicionado à direita. Estes diagramas são mapeados no espaço de parâmetro  $K \times \gamma \in [0, 0, 1, 2] \times [0, 0, 0, 5]$  no regime aerossol ( $\alpha = 0,4$ ). Através do MEL, podemos discernir os tipos de dinâmica, distinguindo os comportamentos entre periódico (azul), quase-periódico (preto) e caótico (vermelho). O Painel (a) destaca estruturas periódicas reconhecidas como línguas de Arnold, enquanto o Painel (b) proporciona uma visão detalhada da sua organização. No Painel (b), uma linha verde clara marca os pontos utilizados para o cálculo de um diagrama de bifurcação, ilustrado na Figura 3.5

com bordas bem definidas que 'nascem' na região quase-periódica. No Painel 3.4(b) é exibida uma magnificação da região indicada pelo retângulo verde no Painel 3.4(a), trazendo em mais detalhes a cadeia de estruturas. Por mais que a CC esteja relacionada a estruturas periódicas (ou EIEs) no espaço de parâmetros, neste intervalo não encontramos estruturas com CC ideais. Uma hipótese é a de que a dissipação é muito forte, sendo capaz até de deformar algumas das estruturas, como ocorre para valores próximos a  $\gamma = 0,2$ , onde a estrutura não possui um formato conhecido. Para valores maiores de  $\gamma$ , é percebida a existência de camarões [67] e línguas de arnold [68] (mais visíveis na magnificação no Painel 3.4(b)). As línguas de Arnold são estruturas encontradas no espaço de parâmetros e possuem a propriedade de autossimilaridade: são produzidas infinitamente nesta cadeia e possuem uma regra de formação que está relacionada aos seus períodos. Para investigar melhor esta regra de formação, calculamos o diagrama de bifurcação e os correspondentes períodos ao longo da linha verde vertical do Painel 3.4(b). O diagrama de bifurcação é retratado na Figura 3.5. Na horizontal está o parâmetro  $\gamma \in [0,31, 0,34]$  e na vertical a variável  $p_n$ . As janelas de periodicidade separam diversos intervalos de caos e quase-periodicidade. Os períodos foram contados para cada janela indicada e encontramos duas principais regras de formação:  $a_{i+1} = a_i + 11$  com  $a_0 = 10$  para as janelas em vermelho e  $b_{i+1} = b_i + 22$  com  $b_0 = 31$  para as em azul. Além destas duas regras de formação, a adição do período de duas estruturas vermelhas subsequentes é igual ao período da estrutura em azul que fica entre elas. A Figura 3.6 esquematiza a regra de formação encontrada para as línguas de Arnold. Intervalos em vermelho são separados por período 11 enquanto azuis são separados por período 22. Todos convergem para um atrator final de período 11, destacado pela linha de cor verde na Figura 3.5 para  $\gamma \approx 0,34$ .

A Figura. 3.6 exibe uma representação esquemática dos períodos relacionados às línguas de Arnold. Janelas vermelhas são separadas por um período de valor 11, enquanto

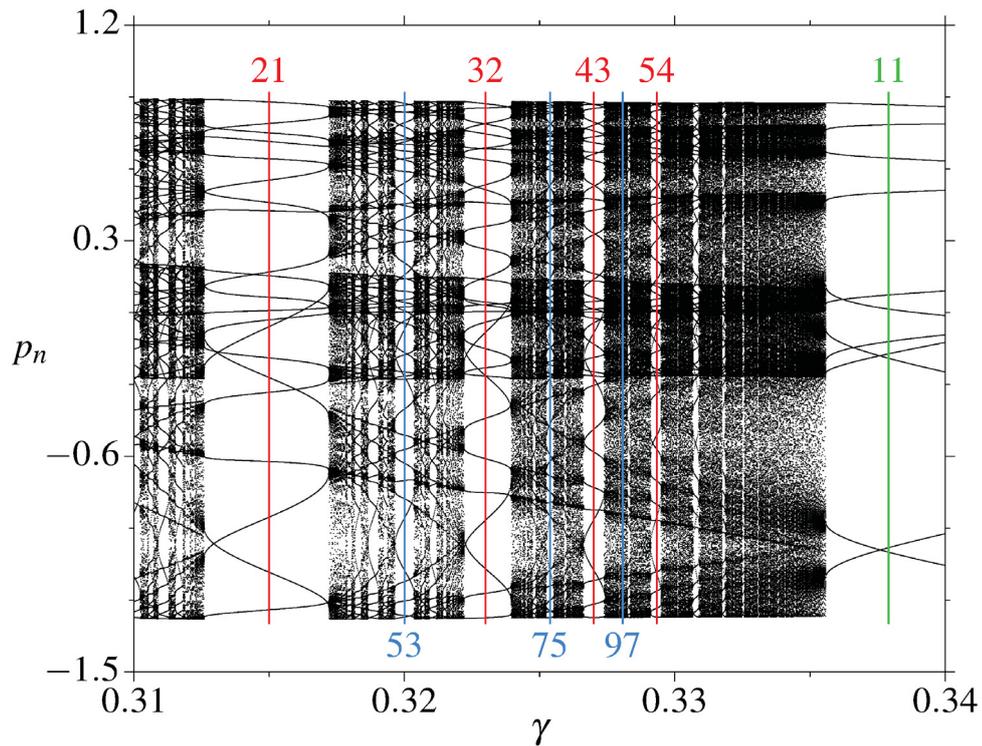


Figura 3.5: O diagrama de bifurcação  $\gamma \times p_n$  é gerado para linha reta destacada no Painel 3.4(b), que representa uma magnificação do espaço de parâmetros apresentado no Painel 3.4(a) (refere-se à caixa em verde). Números em azul e vermelho são utilizados para expressar o período correspondente das línguas de Arnold, alinhadas com o valor de  $\gamma$  indicado pelas respectivas linhas verticais coloridas.

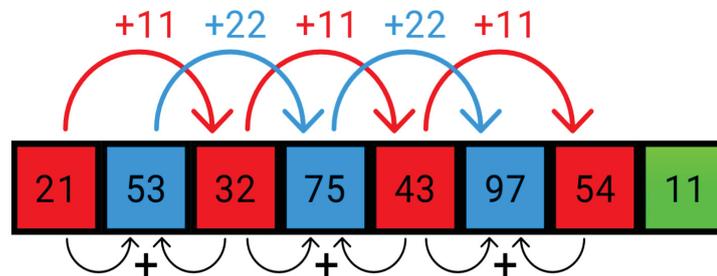


Figura 3.6: Diagrama esquemático mostrando a sequência de  $p_n$  observada na Figura 3.5 e destacada pelas linhas verticais, indicando a regra de organização das línguas de Arnold.

as azuis são separadas por um período 22. O crescimento do período vai no sentido de um atrator final de período 11, indicado pela linha vertical verde na Figura 3.5, para  $\gamma$  próximo a 0,34. Como ilustrado na Figura 3.6, o período resultante da soma entre os períodos 11 e 21 é 32, e o período 53 aparece como resultado entre a soma (e entre as janelas) dos períodos 21 e 32. Então, a lei que rege a geração e o crescimento dos períodos é a mesma que rege a sequência de Fibonacci [69, 70]:  $c_{i+2} = c_i + c_{i+1}$ . A sequência identificada em nossos resultados é  $11 \rightarrow 21 \rightarrow 32 \rightarrow 53$  e continua a crescer com  $85 \rightarrow 138 \rightarrow 223 \rightarrow \dots$ . A razão  $\frac{c_{i+1}}{c_i}$  converge assintoticamente para  $\Phi = \frac{1+\sqrt{5}}{2} \approx 1.618033989$ , conhecida como a proporção áurea ou número de ouro, como mostrado na Tabela 3.1. Para análises mais detalhadas das estruturas organizadas e suas regras de formação, verificar as referências [71, 72, 73].

**Tabela 1:** Convergência da razão  $\frac{c_{i+1}}{c_i}$  para  $\Phi = \frac{1+\sqrt{5}}{2} \approx 1.618033989$ .

Iteração	Razão entre Períodos $\frac{c_{i+1}}{c_i}$	Convergência para $\Phi$
0	21/11	1,909090909
1	32/21	1,523809524
2	53/32	1,656250000
3	85/53	1,603773585
4	138/85	1,623529412
5	223/138	1,615942029
10	2474/1529	1,618051014
15	27437/16957	1,618033850
20	304281/188056	1,618033990
25	3374528/2085573	1,618033989

Tabela 3.1: Sequência que leva à convergência da razão  $\frac{c_{i+1}}{c_i}$  para  $\Phi = \frac{1+\sqrt{5}}{2} \approx 1.618033989$ . A primeira coluna indica a quantidade de iteradas necessárias, a segunda coluna indica a razão entre os períodos e a terceira o valor da divisão. Os valores de período até 85 foram identificados no diagrama de bifurcação, enquanto o restante foi calculado pela regra de formação das línguas de Arnold.

### 3.2.3 Efeitos de transiente e reversão de corrente de catraca

Durante a realização de medidas e ao calcular indicadores, efeitos transitórios são frequentemente desconsiderados. No cálculo do expoente de Lyapunov, onde o intuito é efetuar a medida do expoente após o sistema ter atingido o estado assintótico. No entanto, a depender do fenômeno que está sendo observado, efeitos transitórios podem revelar comportamentos que não são identificados no estado assintótico do sistema. Efeitos como reversão e ativação de CC só podem ser vistos ao analisar a série temporal do cálculo da CC. Na Figura 3.7, cada painel está relacionado a diferentes tempos transientes e calculamos a CC para uma grade de  $500 \times 500$  pontos em  $K \times \alpha \in [2, 0, 16, 0] \times [0, 0, 0, 9]$ , com 100 condições iniciais igualmente distribuídas em  $(x_0, p_0) \in [0, 0, 2\pi] \times [0, 0, 2\pi]$ . A expressão para o cálculo da CC é [74]:

$$J = \frac{1}{M} \sum_M \left( \frac{1}{n} \sum_{i=n_{transiente}}^{n_{total}} p_i \right), \quad (3.10)$$

sendo uma média sobre o número de condições iniciais  $M$  e sobre o tempo, onde  $n_{transiente}$  é a quantidade de iterações transientes descartadas,  $n_{total}$  é o total de iterações e  $n$  é o intervalo no qual calculamos o valor da CC,  $n = n_{total} - n_{transiente}$ . A predominância das cores verde e preto indicam que a maior parte do espaço de parâmetros é permeada por CC nula ou positiva. Pequenas regiões em vermelho indicam a presença de estruturas com corrente negativa. Conforme aumenta-se o tempo transiente no sentido Painel 3.7(a)→(d), as estruturas com CC positiva aumentam e pequenas estruturas com CC negativa se fazem visíveis. Especialmente para valores de  $\alpha$  grandes, boa parte da região com CC nula no Painel 3.7(a) é ocupada por estruturas com CC efetiva positiva no Painel 3.7(d). Ainda

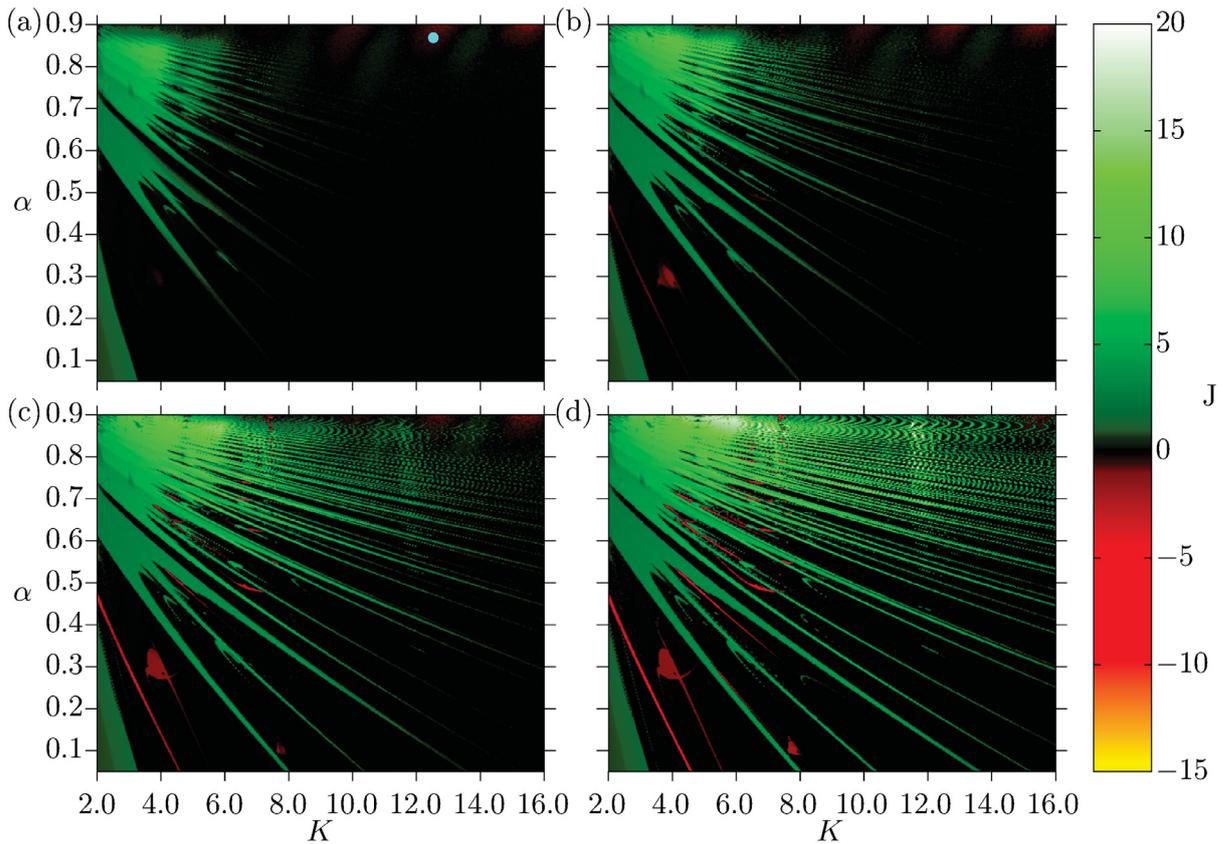


Figura 3.7: O efeito do tempo transiente nos valores da CC, denotada como  $J$ , é plotado ao longo do espaço de parâmetros de  $K \times \alpha$  para  $n = 10^5$  depois de  $n_{\text{transiente}} = 10$  iterações transientes. O tempo de iteração descartado para cada um dos Painéis é:  $n_{\text{transiente}} = 10^4$  para (a),  $n_{\text{transiente}} = 10^5$  para (b),  $n_{\text{transiente}} = 10^6$  para (c) e  $n_{\text{transiente}} = 10^7$  para (d). O círculo na cor ciano no Painel 3.7(a), para os valores de parâmetros  $K = 12, 56$ ,  $\alpha = 0, 87$ , é utilizado para calcular o valor da CC ao longo do tempo, na Figura 3.8, e garantir a existência da reversão de corrente.

nesta região, observa-se que existem manchas de CC fraca, tanto negativa quanto positiva, para tempos transientes curtos, que são sobrepostas por estruturas com CC alta conforme o tempo descartado aumenta. O círculo na cor ciano indica o ponto  $K = 12, 56$ ,  $\alpha = 0, 87$  para o qual calculamos a CC ao longo do tempo na Figura 3.8, para averiguar a existência de reversão de CC. Para tempos curtos, percebemos que existe uma grande flutuação nas curvas para a CC, conforme o tempo aumenta, o valor é estabilizado próximo a zero. Para tempos muito longos,  $n \gtrsim 10^7$ , a CC cresce rapidamente no sentido positivo e atinge um limite de saturação, fenômeno que está relacionado ao surgimento das estruturas com grande CC positiva na região de  $\alpha \in [0, 8, 0, 9]$  na Figura 3.7. Portanto, o fenômeno de reversão de corrente está presente no sistema em estudo e surge devido às estruturas observadas no espaço de parâmetros.

### 3.2.4 Multiestabilidade e a influência de $\alpha$ no espaço de parâmetros

A coexistência de diferentes comportamentos para uma mesma configuração de parâmetros é um fenômeno que pode ser encontrado em uma variedade de sistemas em diferentes

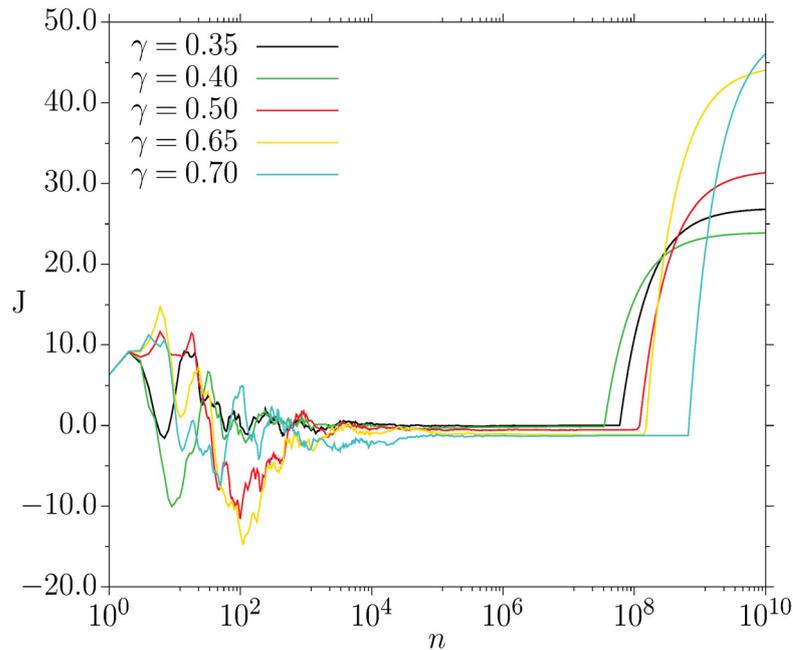


Figura 3.8: Ilustração da reversão de corrente em função do tempo, para diferentes valores do parâmetro de dissipação  $\gamma$  calculados no ponto indicado pelo círculo de cor ciano no Painel 3.7:  $K = 12,56$ ,  $\alpha = 0,87$ . O cálculo da CC foi realizado para 900 condições iniciais, igualmente espacadas em  $(x, p)$ , para um total de  $10^{10}$  iterações no tempo.

áreas das ciências naturais [75]. A multiestabilidade pode ser identificada através de ferramentas que possibilitam distinguir diferentes atratores, tais como bacias de atração ou diagramas de bifurcação. Na Figura 3.9 estão ilustrados o espaço de parâmetros para a CC (Painel 3.9(a)) e a linha azul indica os pontos para os quais calculamos o diagrama de bifurcação (Painel 3.9(b)). No Painel 3.9(a), a cor verde indica CC positiva, a cor vermelha CC negativa e pontos em preto estão relacionados a CC nula. O espaço de parâmetros é bastante desordenado, mas é possível identificar duas estruturas periódicas associadas a CC ideais na cor verde claro. Tais estruturas sobrepõem regiões com CC negativa ótima ou CC nula, o que pode indicar que o sistema exibe mais de um comportamento para um mesmo par de parâmetros  $K \times \gamma$ . Uma vez que correntes eficientes estão associadas a estruturas periódicas e a sobreposição destas estruturas está relacionada à existência de multiestabilidade no sistema [72], investigamos se há, de fato, a coexistência de diferentes estados no sistema. Para averiguar a existência de multiestabilidade, calculamos o diagrama de bifurcação que é apresentado no Painel 3.9(b). Para a construção do Painel 3.9(b), procedemos seguindo o atrator: definido o intervalo de  $\gamma$ , dois diagramas de bifurcação são calculados incrementando o parâmetro de duas formas diferentes, uma com incremento positivo, crescendo de  $\gamma_{\min}$  até  $\gamma_{\max}$  e outro com incremento negativo, decrescendo de  $\gamma_{\max}$  até  $\gamma_{\min}$ . Uma única condição inicial é escolhida  $(x_0, p_0) = (0, 1, -0, 1)$ , utilizada para o primeiro valor de  $\gamma$  da simulação e, para os valores seguintes do parâmetro, seguimos o atrator, usando como condição inicial o último ponto  $(x, p)$  calculado para o valor de  $\gamma$  prévio. Pontos em preto indicam que o parâmetro  $\gamma$  cresce de 1,4 para 1,7 e

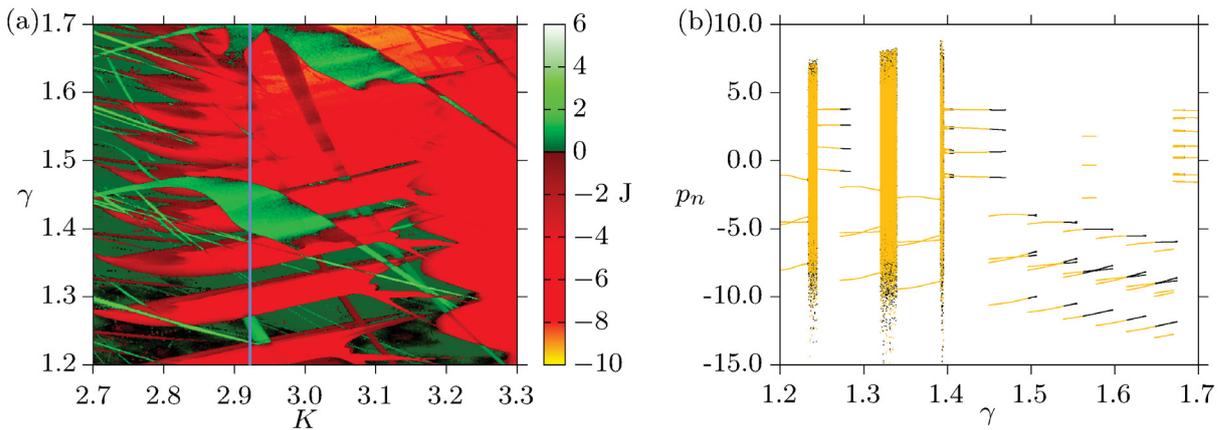


Figura 3.9: A CC, denotada como  $J$ , é exibida no espaço de parâmetros de  $K \times \gamma$  no Painel (a), enquanto o Painel (b) exibe o diagrama de bifurcação de  $\gamma \times p$ . O diagrama de bifurcação foi gerado utilizando duas abordagens: uma incrementando  $\gamma$  no sentido crescente, indo de 1,2 para 1,7 (indicado por pontos pretos), e a outra com um incremento negativo, indo de 1,7 para 1,2 (ilustrado na cor amarela). A linha azul no Painel (a) indica os pontos que foram utilizados para o cálculo do diagrama, com  $K$  sendo mantido fixo em 2,922.

pontos em amarelo indicam que o parâmetro  $\gamma$  decresce de 1,7 para 1,4. Caso não exista multiestabilidade, todos os pontos em preto e amarelo devem estar sobrepostos. Para esta ilustração, os pontos em amarelo são plotados sobre os pontos pretos. Portanto, a observância de pontos pretos no diagrama de bifurcação, por si só, já é indicativo de multiestabilidade. Algumas janelas de caos e quase periodicidade são observadas, mas o comportamento periódico (seja para pontos em amarelo ou em preto) predominam o diagrama de bifurcação. É válido salientar que o diagrama de bifurcação não abrange todos os possíveis estados do sistema para as configurações de parâmetros abordadas mas, ainda assim, a Figura 3.9 evidencia a coexistência de múltiplos atratores.

O parâmetro  $\alpha$  é a grandeza que relaciona as densidades do fluido e da partícula e possui grande influência na dinâmica do sistema. Por mais que nossas investigações estejam limitadas a valores de  $\alpha \leq 0,9$ , mudanças neste parâmetro continuam a afetar o comportamento do sistema consideravelmente. Para entender como os valores da CC são afetados pelo parâmetro, calculamos quatro espaços de parâmetros de  $K \times \gamma$  com diferentes valores de  $\alpha$ , que são apresentados na Figura 3.10. Cores no gradiente de verde para branco representam CC positiva para o correspondente par  $(K, \gamma)$  no espaço de parâmetros, pontos na cor preta indicam que a CC é nula e cores no gradiente de vermelho para amarelo indicam CC negativa. Conforme  $\alpha$  cresce, do Painel 3.10(a)  $\rightarrow$  (d), observa-se a compressão e o deslocamento das estruturas, que se movem para regiões de menores valores de  $\gamma$ . Do Painel 3.10(a) para o Painel 3.10(d), a quantidade de pontos que estão relacionados a CC negativa na região de  $K > 7,0$  aumenta significativamente, enquanto novas regiões com CC positiva surgem para  $K < 7,0$ .

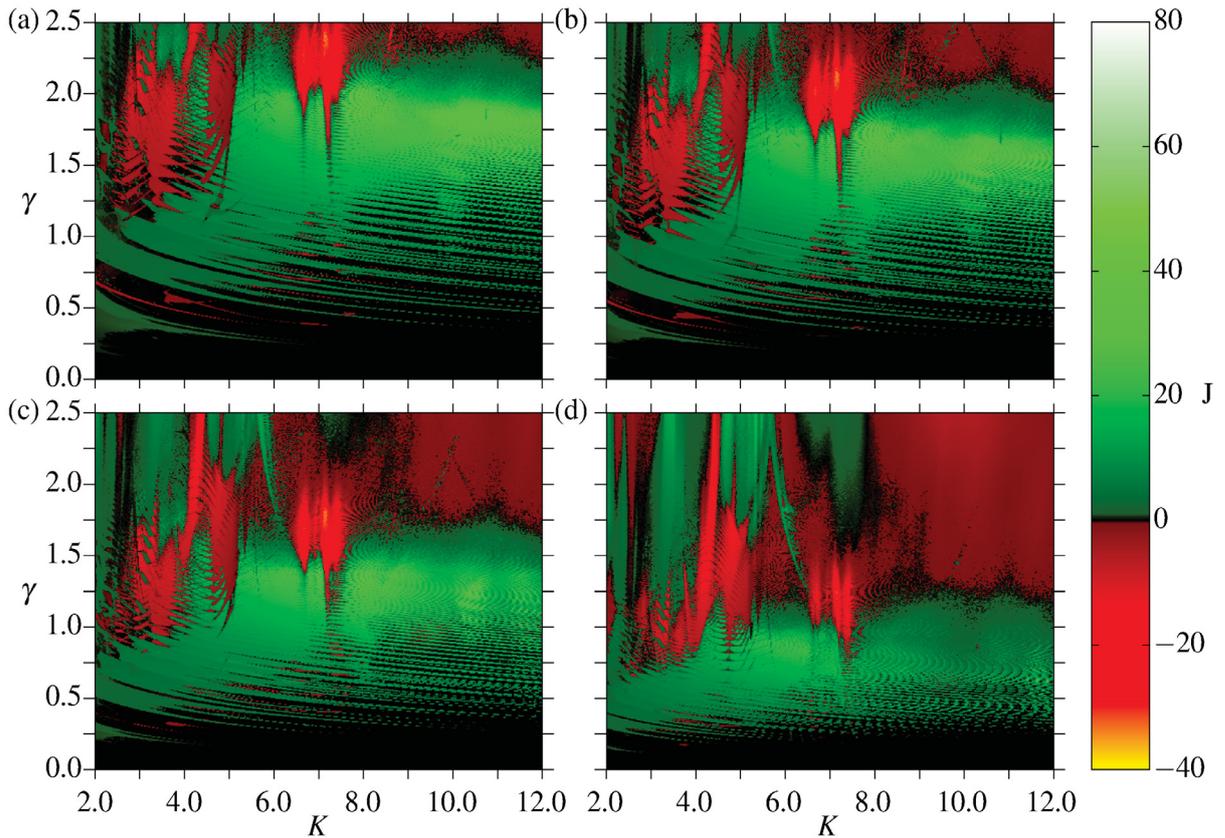


Figura 3.10: Corrente de catraca para o espaço de parâmetros de  $K \times \gamma$  com diferentes valores de  $\alpha$ . Para o Painel (a),  $\alpha$  vale 0,20, em (b)  $\alpha = 0,40$ , em (c)  $\alpha = 0,60$  e em (d)  $\alpha = 0,80$ . O cálculo computacional foi feito para uma grade de  $500 \times 500$ , com 100 condições iniciais igualmente espaçadas em  $(x, p)$  e tempo de iteração de  $10^3$  depois de  $10^7$  iteradas descartadas como transiente.

### 3.3 CONCLUSÕES PARCIAIS

Empregamos a estrutura matemática do bailout embedding para investigar o fenômeno de transporte direcionado sem viés em um sistema de catraca acoplado a um fluido. O sistema completo é caracterizado por um mapa quadridimensional que depende de parâmetros como dissipação ( $\gamma$ ), intensidade da catraca ( $K$ ) e a relação entre as densidades do fluido e da partícula ( $\alpha$ ). Nosso foco principal recai sobre o limite aerossol ( $\alpha < 1$ ). O efeito catraca gera um transporte retificado sem viés de partículas, sendo a corrente de catraca (CC) a principal medida física para quantificar esse transporte. Nossa pesquisa revela o comportamento intrincado da CC em espaços de parâmetros  $K \times \gamma$  e  $K \times \alpha$ . Observamos correntes de catraca mais altas para combinações de parâmetros que resultam em dinâmicas periódicas estáveis, delineando estruturas periódicas estáveis no espaço de parâmetros. Notavelmente, a presença dessas estruturas periódicas estáveis exerce uma influência significativa sobre a CC. Além disso, nosso estudo identifica regiões de multiestabilidade, onde o sistema manifesta múltiplos atratores exibindo combinações distintas de comportamentos caóticos e periódicos.

A importância da multiestabilidade reside em sua capacidade de permitir controle sobre a resposta do sistema. Pequenas perturbações ou mudanças nas condições iniciais podem direcionar o sistema para diferentes estados estáveis. Isso significa que o sistema pode ser ajustado para reagir de forma distinta a estímulos similares, o que pode ser útil em aplicações que exigem a capacidade de alternar entre vários estados de movimento.

Adicionalmente, exploramos efeitos transitórios, revelando que a CC pode se inverter não apenas com mudanças nos parâmetros, mas também como função do tempo para determinados valores fixos de parâmetros. Além disso, investigamos o impacto da densidade das partículas sobre a CC. Descobrimos que o aumento da densidade das partículas comprime regiões com CC zero e desloca para baixo as regiões com CC negativa no espaço de parâmetros  $K \times \gamma$

## 4 O EFEITO CATRACA NUM CHIP DE GRAFENO

Neste capítulo abordaremos, inicialmente e de forma breve, as características do grafeno, um material com alta resistência mecânica e propriedades de condução térmica e elétrica. Posteriormente, investigaremos um dispositivo construído a partir de uma monocamada deste material: o chip de grafeno, explicando seu funcionamento e suas limitações e, posteriormente, expondo os resultados encontrados.

### 4.1 O GRAFENO E SUAS PROPRIEDADES

O grafeno é um material bidimensional composto por átomos de carbono dispostos numa rede cristalina hexagonal, formando um padrão que se assemelha a um favo de mel (em inglês é chamada de *honeycomb lattice*). No grafeno não dopado, a energia de Fermi coincide com a energia nos pontos cônicos, a banda de valência é completamente ocupada e a banda de condução desocupada, não havendo lacunas (*gap*) entre as bandas. Do ponto de vista da teoria de bandas, o grafeno é um exemplo de um semicondutor sem *gap* (*gapless semiconductor*) [5].

A *honeycomb lattice* não é uma rede primitiva, é construída quando duas redes de Bravais triangulares são sobrepostas, e os seus elementos de base são dois átomos vizinhos que pertencem a redes distintas. Para exemplificar, na Figura 4.1(a) estão esquematizadas as duas redes triangulares, uma denotada pela cor preta (A) e outra pela cor cinza (B). A célula unitária primitiva é composta, por exemplo, pelos dois átomos que possuem os índices A e B. Os vetores  $\vec{a}_1$  e  $\vec{a}_2$  são os vetores que configuram a rede triangular, definidos por

$$\vec{a}_1 = \frac{a}{2} (3, \sqrt{3}), \quad \vec{a}_2 = \frac{a}{2} (3, -\sqrt{3}), \quad (4.1)$$

onde  $a = 1,42\text{Å}$  é a distância entre dois átomos vizinhos na rede. A zona de Brillouin possui pontos simétricos ( $K$  e  $K'$ ) que possuem relação com as propriedades eletrônicas do grafeno. Outros pontos importantes são os pontos  $M$ , que se encontram entre dois pontos  $K$  e  $K'$  e o ponto  $\Gamma$ , que se encontra no centro da zona de Brillouin e é o ponto onde existe o maior *gap* entre as bandas. A zona de Brillouin é uma célula unitária que se encontra no espaço recíproco, e que é definida pelos vetores

$$\vec{b}_1 = \frac{2\pi}{3a} (1, \sqrt{3}), \quad \vec{b}_2 = \frac{2\pi}{3a} (1, -\sqrt{3}), \quad (4.2)$$

ilustrados na Figura 4.1(b), que compõem uma rede recíproca triangular.

O átomo de carbono possui 6 elétrons com distribuição  $1s^2 2s^2 2p^2$ , com quatro elétrons na camada de valência. Os quatro elétrons dão origem a quatro orbitais de

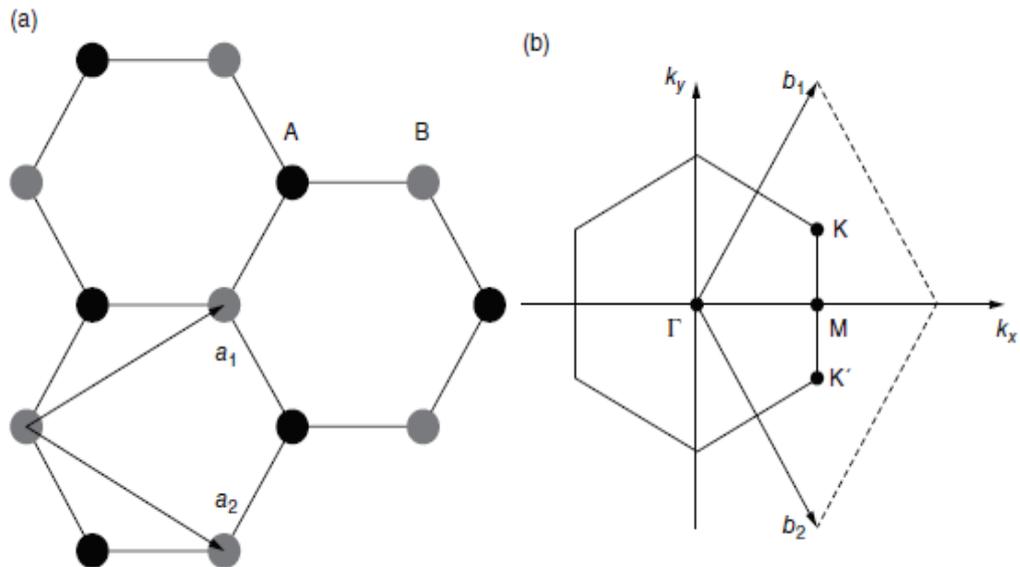


Figura 4.1: Esquematização da disposição dos átomos de carbono na rede que constitui o grafeno em (a). Átomos A e átomos B fazem parte de duas redes triangulares diferentes, que quando sobrepostas, formam o padrão de favo de mel característico do material. Em (b) está ilustrada a célula unitária no espaço recíproco, também chamada de zona de Brillouin. Os pontos simétricos  $K$  e  $K'$  são denominados pontos de Dirac. Figura retirada de [5]

valência ( $2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z$ ), que podem formar hibridizações  $sp^n$ ,  $n = 1, 2, 3$  para efetuar uma variedade de diferentes ligações. No grafeno, os orbitais de valência ( $2s, 2p_x, 2p_y$ ) produzem três orbitais híbridos  $sp^2$  idênticos, com um ângulo de  $120^\circ$  no plano  $2D$  onde os átomos são dispostos [6]. Na Figura 4.2 está ilustrada uma representação gráfica dos orbitais  $sp^2$  e  $sp_z$  do grafeno. Estes orbitais  $sp^2$  formam três ligações covalentes

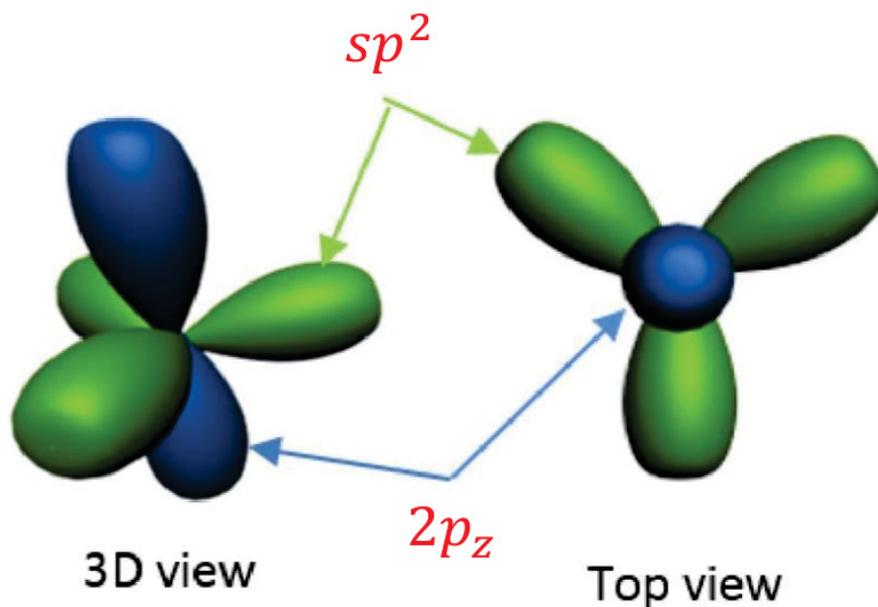


Figura 4.2: Representação gráfica dos orbitais  $sp^2$  e  $sp_z$  no grafeno. Figura retirada da referência [6].

$\sigma$  no plano  $xy$ , que são responsáveis pela estabilidade mecânica do material. Como a banda  $\sigma$  é completamente ocupada, seus elétrons não contribuem para as propriedades eletrônicas. Próximo da energia de Fermi, os orbitais  $p_z$  restantes, que possuem uma pequena sobreposição, dão origem a ligações covalentes  $\pi$  fracas e deslocalizadas. São estas ligações que são responsáveis pelo transporte eletrônico e as propriedades ópticas do grafeno. Na Figura 4.3, as ligações formadas entre os átomos de carbono, no grafeno, estão esquematizadas. Na Figura 4.4 é apresentado um gráfico da estrutura eletrônica de

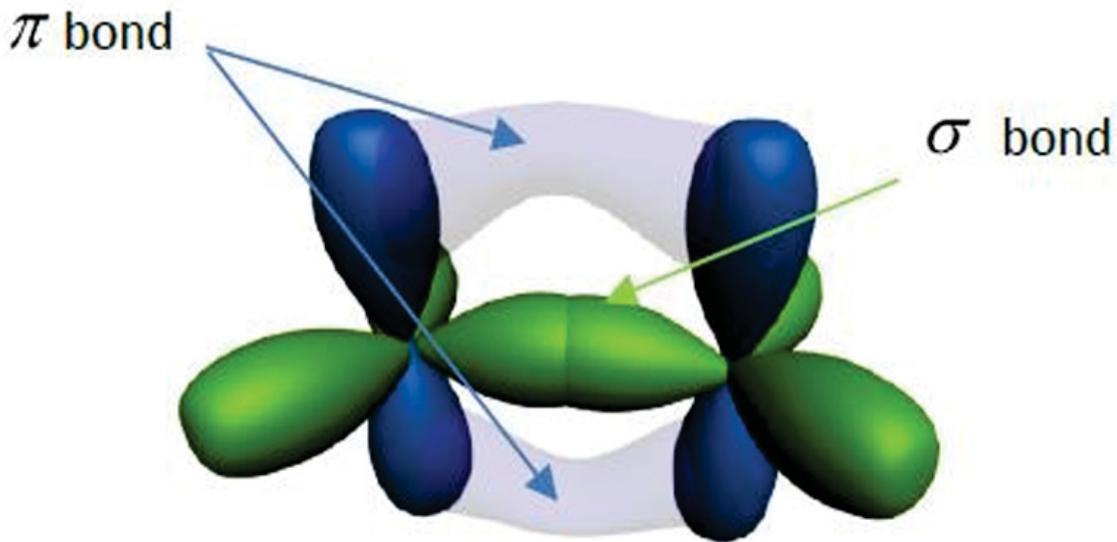


Figura 4.3: Ligações  $\sigma$  ( $\sigma$  bond) e  $\pi$  ( $\pi$  bond) no grafeno. Para formar a rede favo de mel, cada orbital  $sp^2$  se sobrepõe ao orbital  $sp^2$  de um átomo vizinho (pertencente a outra rede triangular) para criar uma ligação  $\sigma$ , enquanto os orbitais  $p_z$  remanescentes dão origem a uma ligação  $\pi$ . Figura retirada da referência [6].

bandas do grafeno. A função utilizada para obter o gráfico e o mapa de calor é calculada utilizando o modelo de aproximação *tight-binding*, que torna possível que a estrutura de bandas ao longo de toda a zona de Brillouin seja descrita matematicamente (mais detalhes do método podem ser encontrados na Referência [76]). Duas bandas de energia simétricas existem em torno de  $E = 0$ . A banda superior é a de condução, enquanto a inferior é a banda de valência. As duas bandas se conectam em seis pontos distintos na zona de Brillouin e criam pontos nos quais não há lacunas (ou gaps) entre as bandas. Os pontos nos quais as bandas se encontram são chamados de pontos de Dirac, denotados por  $K$  e  $K'$ . Na estrutura de bandas, os pontos  $M$  são pontos de sela.

## 4.2 O CHIP DE GRAFENO

O chip de grafeno, proposto e investigado inicialmente na referência [29], é o modelo estudado nesta e na próxima seção deste capítulo, onde apresentamos as propriedades do sistema e discutimos os resultados que encontramos através de simulações numéricas.

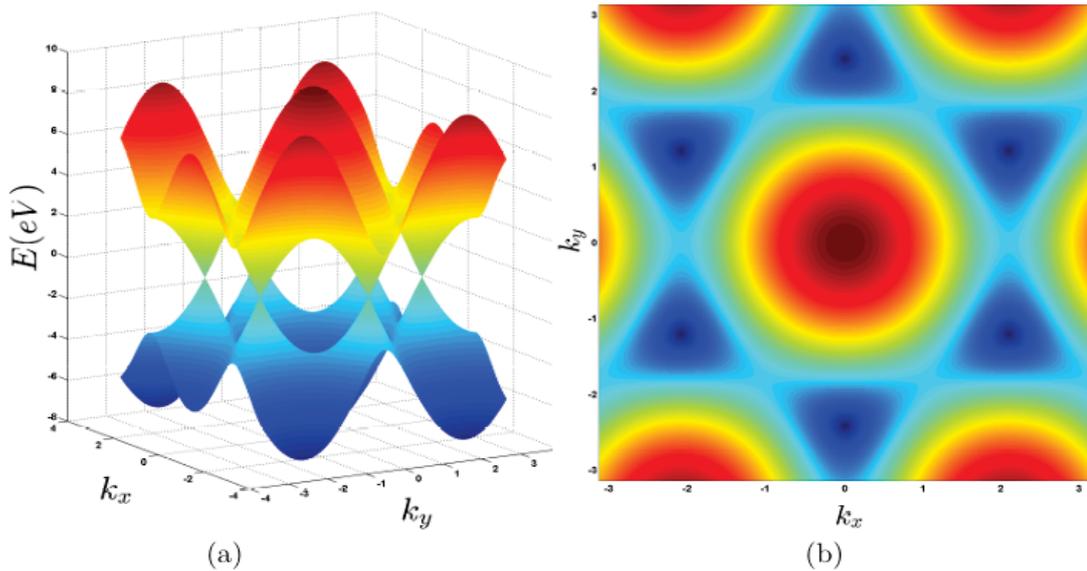


Figura 4.4: Estrutura eletrônica de bandas do grafeno, calculada pelo modelo tight-binding para toda a primeira zona de Brillouin. Em (a) está o gráfico de dispersão de energia do grafeno: as bandas de valência e condução são simétricas em torno de  $E = 0$ , e se tocam nos pontos simétricos da zona de Brillouin (pontos  $K$  e  $K'$ ). Em (b) é projetado um mapa de calor da banda de condução, os pontos simétricos aparecem em azul escuro. Figura retirada da referência [6].

Os dados foram obtidos via códigos na linguagem Fortran, desenvolvidos com base no algoritmo de integração estocástica com passo fixo apresentado em [77]. Trata-se de uma folha de grafeno, sem bordas, onde eletrodos positivos e negativos são dispostos de forma regularmente espaçada sobre a camada de grafeno, resultando num potencial elétrico.

O movimento estocástico dos portadores de carga no chip de grafeno, que tem como origem as possíveis interações com a rede, é descrito por um sistema de equações de Langevin acopladas, que governam a dinâmica do momento bidimensional  $\mathbf{p} = (p_x, p_y)$  [29]. Estas equações obedecem a relação de dispersão  $\epsilon = v_F p_0$ , onde  $p_0 = \sqrt{p_x^2 + p_y^2}$  é a magnitude do momento,  $\epsilon$  a energia da partícula e  $v_F$  a velocidade de Fermi. A função distribuição de equilíbrio das energias do elétron a baixas temperaturas é dada pela Fermi-Dirac,  $\rho(\epsilon) = 1/(\exp[\epsilon/k_{BT}] + 1)$ . A operação do chip de grafeno requer uma energia de  $\epsilon \sim V$  para os portadores de carga e, para valores de energia grandes o suficiente e que se encontram no intervalo  $k_{BT} \lesssim \epsilon \lesssim V$ , a distribuição  $\rho(\epsilon)$  pode ser aproximada para uma distribuição relativística proporcional à de Jüttner:  $\rho(\mathbf{p}) \sim \exp(-\epsilon(\mathbf{p})/kT)$  [29, 78, 79]. Neste contexto, um conjunto de equações de Langevin consistente com a distribuição de Jüttner em duas dimensões é [29, 79]

$$\begin{cases} \dot{p}_x = \gamma v_F p_x / p_0 - E_V(x) + E_x(t) + \sqrt{2\gamma k_B T} \xi_x(t), \\ \dot{p}_y = \gamma v_F p_y / p_0 + E_y(t) + \sqrt{2\gamma k_B T} \xi_y(t), \\ \mathbf{S} \equiv (\dot{x}, \dot{y}) = \partial \epsilon / \partial \mathbf{p} = v_F \mathbf{p} / p_0, \end{cases} \quad (4.3)$$

onde  $\gamma$  denota uma constante de amortecimento fenomenológica, que engloba os possíveis mecanismos de colisão que a partícula pode ser submetida ao se mover ao longo do chip de grafeno [29]. A constante  $k_B$  é a constante de Boltzmann, os termos  $\xi_x(t)$  e  $\xi_y(t)$  representam ruídos gaussianos brancos e  $T$  é a temperatura. As médias no tempo  $\langle \xi_i(t) \rangle = 0$  e  $\langle \xi_i(t) \xi_j(0) \rangle = \delta_{ij} \delta(t)$  para  $i, j = x, y$  garantem a termalização apropriada à temperatura  $T$  específica. Por sua vez,  $\mathbf{S}$  é a velocidade  $(\dot{x}, \dot{y})$  e tem seu módulo igual a  $v_F$  [80]. Os termos  $E_V(x)$ ,  $E_x(t)$  e  $E_y(t)$  são o campo elétrico associado ao potencial e as componentes  $x$  e  $y$  do campo elétrico externo, respectivamente.

É importante ressaltar que a validade do sistema descrito pela Equação (4.3) para a descrição do movimento de portadores de carga no chip de grafeno é restrita ao limite clássico, onde efeitos quânticos podem ser negligenciados. As restrições físicas que garantem a descrição correta do fenômeno dentro do limite clássico são: (i) o comprimento de onda de de Broglie perpendicular à barreira ( $\lambda_x = \hbar/p_x$ ) deve ser muito menor do que o período do potencial do substrato ( $\lambda_x \ll L$ ), fazendo com que não existam bandas estreitas ou níveis de energia discretos; (ii) o comprimento de onda de de Broglie paralelo à barreira ( $\lambda_y = \hbar/p_y$ ) deve ser muito menor que  $L$ , de forma a suprimir a probabilidade de tunelamento de partículas quirais, onde um efeito denominado tunelamento de Klein pode ocorrer (este efeito resulta na quase transparência de uma barreira de potencial, efeito análogo ao paradoxo de Klein na relatividade) [81, 29]. A condição de que ( $\lambda_y \ll L$ ) também não permite o tunelamento dos pares elétron-buraco; (iii) o valor da temperatura deve ser grande o suficiente para assegurar que o tunelamento de partículas quirais no topo da barreira  $U(x)$  seja insignificante em relação ao salto das partículas ativado pelo ruído, ou seja,

$$\min \left\{ \hbar v_F / L; \hbar \omega_y^2 U^2 / v_F A^2 L \right\} \ll kT \lesssim U. \quad (4.4)$$

Como visto na Seção 2.2, o efeito catraca só pode ser identificado em sistemas com quebra de assimetria espacial e temporal, sem forças externas que direcionem o movimento, e fora do equilíbrio térmico. O potencial elétrico gerado pelos eletrodos é assimétrico e sua forma pode ser alterada variando a distância entre eles. A dissipação no sistema está presente a partir do parâmetro  $\gamma$ , enquanto a assimetria espacial é garantida pelo potencial elétrico gerado pelos eletrodos. O campo elétrico que arrasta as partículas no eixo  $y$  é responsável por tirar o sistema do equilíbrio. A Figura 4.5(a) é uma ilustração do chip de grafeno, onde os átomos de carbono estão indicados por pontos vermelhos, os eletrodos positivos por linhas azuis e os eletrodos negativos por linhas verdes,  $E_x(t)$  e  $E_y(t)$  são componentes de um campo elétrico externo. Em nosso estudo, o campo elétrico externo é descrito pela expressão

$$E(t) = (0, A \cos(\omega_y t)), \quad (4.5)$$

sendo que os termos  $A$  e  $\omega_y$  são a amplitude do campo e a frequência, respectivamente, e o cálculo da corrente de catraca é feito na direção da componente  $x$ . No Gráfico 4.5(b)

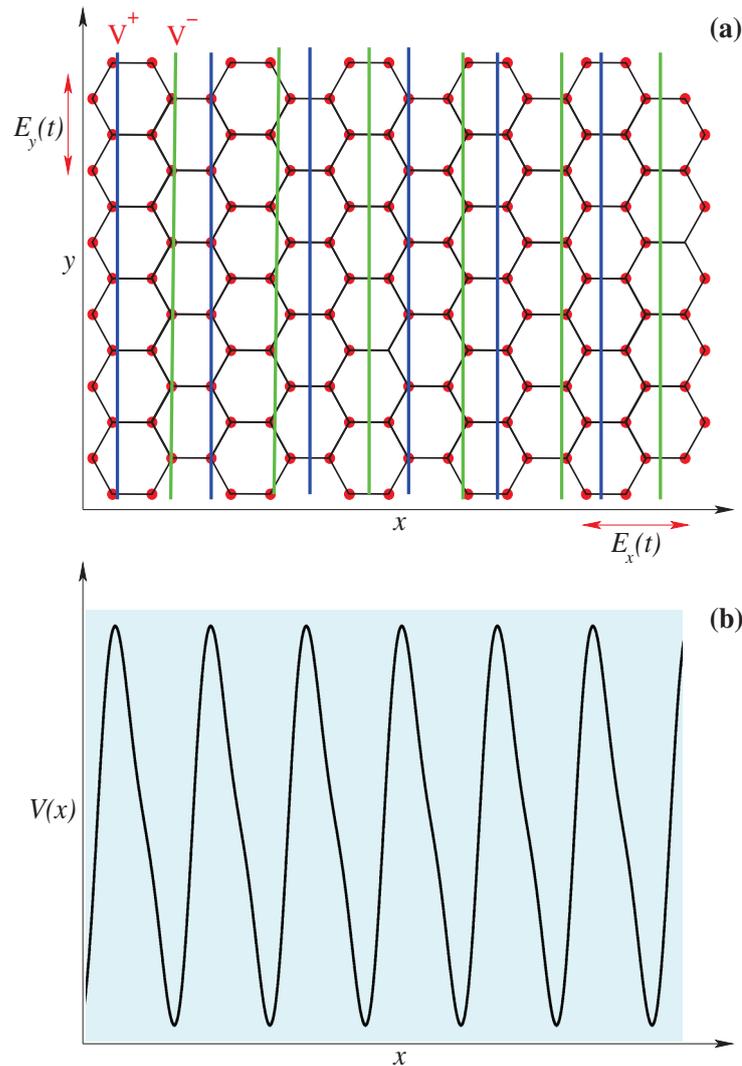


Figura 4.5: (a) Representação esquemática de um chip de grafeno de uma camada. Átomos de carbono são destacados por pontos vermelhos, organizados em uma rede tipo favo de mel. Eletrodos são posicionados sobre a monocamada de grafeno, organizados em pares igualmente espaçados, compostos por um eletrodo positivo (azul) e outro negativo (verde). O espaçamento entre cada elemento do par e entre dois pares é diferente, garantindo a assimetria do potencial gerado na direção  $x$ . O potencial elétrico gerado pelos eletrodos é ilustrado em (b), para  $V_0 = 1,0$  e  $V_1 = 0,25$  na Equação (4.6)

está plotada a função que descreve o potencial de catraca, demonstrando a relação entre os máximos e mínimos da função e a posição dos eletrodos. A expressão matemática que descreve o potencial é

$$V(x) = V_0 \sin(2\pi x) + V_1 \sin(4\pi x), \quad (4.6)$$

sendo que  $V_0$  e  $V_1$  são parâmetros que controlam o grau de assimetria da função, com valores  $V_0 = 1,0$  e  $V_1 = 0,25$ . O campo elétrico  $E_V(x)$ , derivado do potencial  $V(x)$ , é dado por

$$E_V(x) = \frac{dV(x)}{dx} = -2\pi V_0 \cos(2\pi x) - 4\pi V_1 \cos(4\pi x). \quad (4.7)$$

Substituindo as Equações 4.6 e 4.7 na Equação (4.3), obtemos a expressão que utilizamos para fins de cálculo do movimento dos portadores de carga e o efeito catraca relativístico

no chip de grafeno. Aqui chamamos de efeito catraca relativístico pelo fato da natureza do movimento das cargas no material imitar a de uma partícula relativística, assim como nos referiremos à corrente de catraca como corrente de catraca relativística (CCR).

### 4.3 RESULTADOS NUMÉRICOS

Nesta seção, apresentaremos os resultados encontrados durante o estudo do modelo do chip de grafeno. As simulações numéricas compreendem o cálculo da CCR sob diferentes ângulos, variando os diferentes parâmetros, a temperatura e, também, o tempo de integração do sistema.

A CCR é calculada utilizando uma média dupla sobre as condições iniciais e o tempo de iteração, de acordo com a equação:

$$\langle J_x \rangle = \frac{1}{(n_{\text{tot}} - n_{\text{cut}})} \frac{1}{N} \sum_{l=n_{\text{cut}}}^{n_{\text{tot}}} \sum_{j=1}^N \dot{x}^j(t_l), \quad (4.8)$$

com o índice  $j = 1, \dots, N$  denotando a soma sobre  $N = 81$  condições iniciais igualmente distribuídas no intervalo  $[-\pi, \pi]$ , o tempo  $t_l$  denotando o período de observação,  $n_{\text{cut}} = 1 \times 10^3$  indicando a quantidade de passos de integração removidos como transiente e  $n_{\text{tot}} = 3 \times 10^6$  sendo a quantidade total de passos de integração. Efeitos transientes são eliminados para assegurar a convergência do valor da corrente de catraca. Alguns parâmetros foram mantidos constantes durante as simulações numéricas, por conta da grande quantidade de parâmetros existentes. Dos dez parâmetros que o sistema possui  $\{\gamma, v_F, k_B, T, V_0, V_1, A, B, \omega_x, \omega_y\}$ , sete têm seu valor fixado durante nossas investigações:  $\{\gamma, v_F, k_B, V_0, V_1, B, \omega_x\} = \{1, 0, 1, 0, 1, 0, 1, 0, 0, 25, 0, 0, 0, 0\}$ . Portanto, examinaremos de que forma a temperatura ( $T$ ), intensidade ( $A$ ) e frequência ( $\omega_y$ ) da componente do campo elétrico externo  $E_y(t)$  afetam o comportamento do sistema e como se relacionam com a corrente de catraca  $\bar{J}_x$ . A estrutura e posição dos atratores pode mudar ao variar os valores de  $A$  e  $\omega_y$ , fazendo com que média dupla utilizada para calcular a CCR possa variar de positiva para negativa, ou vice-versa. Mudanças no valor da temperatura  $T$  aumentam ou diminuem a estocasticidade do sistema, podendo alterar a estabilidade de condições iniciais ou, até mesmo, destruir atratores existentes. Estruturas isoperiódicas robustas no espaço de parâmetros tendem a resistir a maiores valores de  $T$  e também a possuir valores de CC mais eficientes [82]. Conseqüentemente, ao pensar em uma adaptação experimental, pequenos efeitos ou ruídos incontroláveis que possam afetar o sistema não devem resultar em grandes alterações nesta classe de estruturas e, portanto, na CCR.

Nossos primeiros resultados são apresentados na Figura 4.6, onde o Painel 4.6(a) mostra a CCR  $\bar{J}_x$  como função da temperatura  $T$  em escala semi-log, com o parâmetro  $A = 65$  e com três valores de  $\omega_y = 1, 23, 2, 00$  e  $2, 45$ . A curva roxa está relacionada ao valor de  $\omega_y = 1, 23$  e demonstra grande oscilação nos valores da corrente para menores valores de

$T$ , tendendo a zero gradualmente conforme  $T$  aumenta. A magnificação no Painel 4.6(a) representa a curva de  $\omega_y = 1,23$  em escala log-log, onde podemos ver um decaimento algébrico da forma  $0,003T^{-1,5}$ , indicado pela linha preta. Para  $\omega_y = 2,00$ , em vermelho, a CCR tem valor negativo e com pequenas oscilações para a maioria dos valores de  $T$ , se aproximando de zero para  $k_B T / \Delta V \sim 1,0$ . A curva em ciano está relacionada a  $\omega_y = 2,45$  e apresenta valores negativos para a CCR até  $k_B T / \Delta V \approx 0,003$ , onde a CCR se torna positiva e, posteriormente, se aproximando de zero conforme  $k_B T / \Delta V \rightarrow 1,0$ . Portanto, para os casos estudados, pequenos valores de temperatura implicam em valores finitos da CCR e, conforme a temperatura aumenta, o efeito de catraca tende a ser suprimido pelo ruído.

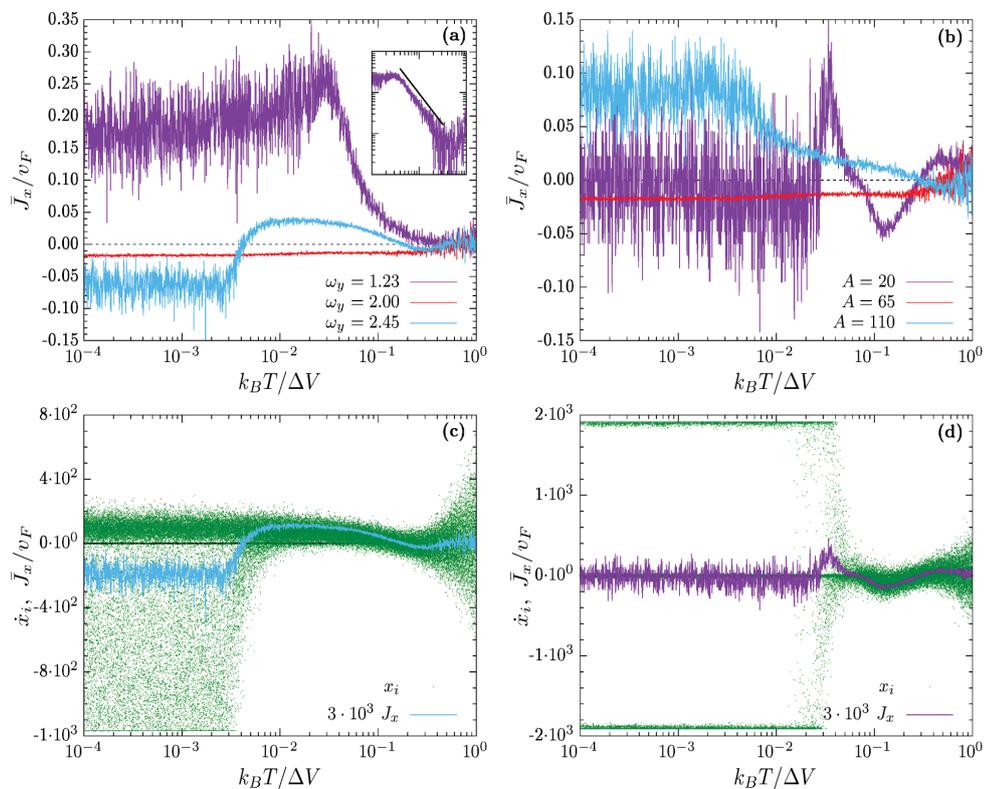


Figura 4.6: Ilustração da CCR  $\bar{J}_x$  em função da temperatura  $T$  para o modelo de chip de grafeno 4.3. Em (a) e (b) a CCR é ilustrada para diferentes valores dos parâmetros  $\omega_y$  e  $A$ , respectivamente. Junto à CCR, em pontos verdes nos Painéis (c) e (d), são apresentadas as velocidades  $\dot{x}_i$  de cada uma das 81 condições iniciais utilizadas no ensemble. Em (a), fixamos o parâmetro  $A = 65$  e utilizamos três valores de  $\omega_y = \{1,23, 2,00, 2,45\}$ , enquanto em (b) fixamos  $\omega_y = 2,0$  e utilizamos  $A = \{20, 65, 110\}$ . O Painel (c) apresenta a curva da CCR para  $A = 65$  e  $\omega_y = 2,45$  de (a), já o Painel (d) ilustra a curva da CCR de (b) para  $A = 20$  e  $\omega_y = 2,0$ . Em ambos os Painéis, as velocidades  $\dot{x}_i$  estão representadas por pontos verdes.

Nos resultados apresentados no Painel 4.6(b), investigamos o comportamento do sistema perante a variação do parâmetro  $A$ , mantendo o valor de  $\omega_y = 2,0$  fixo e abordando os valores  $A = 20, 65$  e  $110$ . A curva em vermelho ( $A = 65, \omega_y = 2,0$ ) corresponde ao mesmo conjunto de dados plotados no Painel 4.6(a), também na cor vermelha. Para  $A = 20$ , indicado pela cor roxa, são observadas grandes oscilações em torno da curva vermelha quando  $T$  assume valores menores, com sua média se mantendo negativa. Conforme  $T$

aumenta, a curva se torna mais bem definida (menores oscilações) e os valores da CCR vão de negativo para positivo quando  $k_B T / \Delta V \sim 0,02$ , depois voltam a ser negativos em  $k_B T / \Delta V \sim 0,05$  e tornam a ser positivos em  $k_B T / \Delta V \sim 0,1$ , assim se mantendo até  $k_B T / \Delta V = 1,0$ . A curva em ciano ( $A = 110$ ) mostra que os valores da CCR são predominantemente positivos, apresentando grande oscilação para menores valores de temperatura até  $k_B T / \Delta V \sim 0,01$ , onde as oscilações são atenuadas e a curva decai, se tornando negativa próxima a  $k_B T / \Delta V = 0,25$  e, posteriormente, com seu valor médio tendendo a zero conforme  $k_B T / \Delta V \rightarrow 1,0$ .

O fenômeno de reversão da CCR observado nos Painéis 4.6(a) e (b) pode ter sua origem associada às mudanças na configuração dos atratores, causadas pela alteração no valor de um dos parâmetros do sistema (neste caso a temperatura  $T$ ). Nos Painéis 4.6(c) e (d), investigamos uma das componentes dos atratores existentes no sistema, com o objetivo de analisar quais mudanças surgem com o aumento da temperatura. No Painel 4.6(c), a curva em azul indica os valores da CCR correspondente ao caso  $\omega_y = 2,45$  de (a), plotados sobre os valores da velocidade  $\dot{x}_i$  em pontos na cor verde, onde cada ponto indica uma das  $i = 1, 2, \dots, 81$  condições iniciais no instante  $n_{\text{tot}} = 3 \times 10^6$  para a temperatura  $T$  indicada no gráfico. Para valores de  $k_B T / \Delta V \lesssim 3 \times 10^{-3}$ , as velocidades registradas se encontram espalhadas num grande intervalo para os valores negativos, enquanto para valores positivos estão concentrados em uma região menor, com a média da CCR permanecendo negativa. Para  $k_B T / \Delta V \gtrsim 3 \times 10^{-3}$  as velocidades negativas desaparecem, como efeito do aumento da temperatura, fazendo com que a CCR se torne positiva. Portanto, a mudança estrutural no atrator é responsável pela reversão da corrente. Para  $k_B T / \Delta V \gtrsim 3 \times 10^{-1}$ , os valores da velocidade se dispersam com sua média indo a zero. O Painel 4.6(d) ilustra as velocidades  $\dot{x}_i$  em pontos verdes da mesma forma que no Painel 4.6(c), enquanto CCR é representada por uma curva na cor roxa, para o caso  $A = 20$  do Painel 4.6(b). Neste caso, podemos notar a existência de um atrator de período dois, centralizado em torno de zero e posicionado simetricamente em  $x \pm 2 \times 10^3$ . Para valores de  $k_B T / \Delta V \lesssim 3 \times 10^{-2}$ , a CCR apresenta média nula, exceto pelas oscilações. No intervalo  $3 \times 10^{-2} \lesssim k_B T / \Delta V \lesssim 4 \times 10^{-2}$  uma parte do atrator é afetada, fazendo com que a CCR se torne positiva e indicando a quebra de simetria do atrator como consequência do aumento de  $T$ . A CCR se torna negativa a partir de  $k_B T / \Delta V = 4 \times 10^{-2}$  e tende assintoticamente a zero conforme  $k_B T / \Delta V \rightarrow 1$ .

#### 4.3.1 Ativação e destruição da CCR pela temperatura

Ao ajustar apropriadamente os valores da temperatura  $T$  e dos parâmetros  $\omega_y$  e  $A$ , a ativação ou supressão da CCR se torna possível no modelo de chip de grafeno estudado. Nesta seção, investigamos o sistema sob mudança dos parâmetros e para alguns valores da temperatura. Também analisamos o deslocamento dos portadores de carga na direção  $x$ , ao longo do tempo.

A Figura 4.7 exibe a CCR em função do parâmetro  $A$ , para diferentes valores da temperatura no intervalo  $T \in [0, 25, 4, 0]$ . Os valores de temperatura são diferenciados pela cor de cada curva, indicado na legenda de cada painel. Para o menor valor abordado,  $T = 0,25K$ , a CCR é zero para a maioria dos valores de  $A$ , exceto por um pequeno intervalo  $A \in [20, 34]$  onde a corrente se torna negativa e depois volta a ser nula. A curva para  $T = 0,50K$  mostra que o aumento da temperatura amplifica o intervalo e a magnitude do vale na CCR, que agora se encontra entre os valores de  $A \in [16, 44]$ . A partir de  $T = 0,75K$ , até  $T = 2,00K$ , existe um padrão no comportamento das curvas, tendo como característica a inversão de corrente perante a mudança no valor do parâmetro  $A$ . Inicialmente a corrente apresenta um pico positivo, que decresce, se torna negativo e se aproxima gradualmente a zero conforme  $A \rightarrow 100$ . Para valores de temperatura mais altos, como  $T \geq 4,0$ , os efeitos da temperatura se tornam mais visíveis, levando à degradação da CCR, como mostra a curva em azul no Painel 4.7(b).

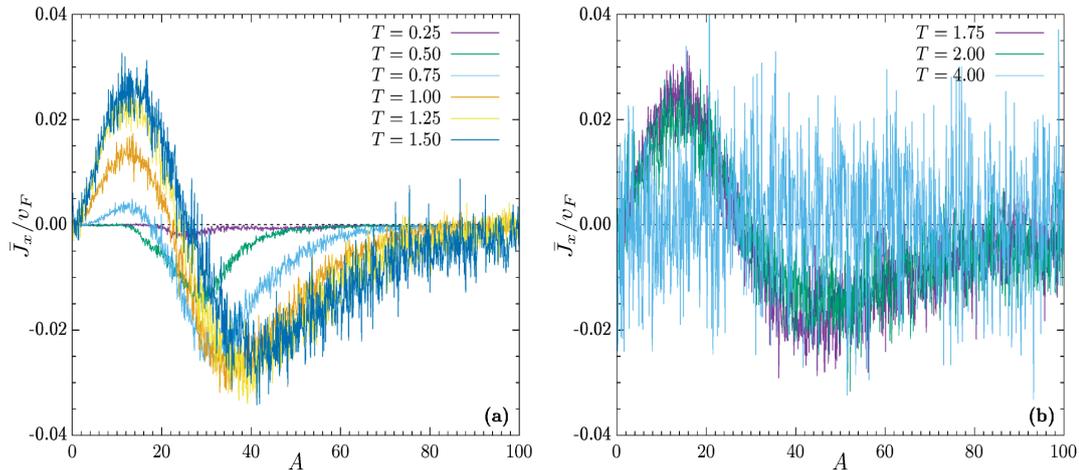


Figura 4.7: A influência do parâmetro  $A$ , amplitude do campo elétrico externo, nos valores da CCR  $\bar{J}_x$  para diferentes valores da temperatura  $T$  no chip de grafeno. No Painel (a), é apresentado o comportamento de  $\bar{J}_x$  perante a variação de  $A$  no intervalo  $[0, 100]$ , para os valores de  $T = \{0, 25, 0, 50, 0, 75, 1, 00, 1, 25, 1, 50\}K$ . No Painel (b), o intervalo de  $A$  é mantido o mesmo e para a temperatura, usamos os valores  $T = \{1, 75, 2, 00, 4, 00\}K$ .

Para compreender melhor o fenômeno de ativação da CCR via temperatura, investigamos um ensemble de trajetórias em função do tempo de integração e analisamos o comportamento individual e das médias das posições  $x_i(t)$ . A configuração de parâmetros escolhidas para estas simulações é  $(A, \omega_y) = (12, 0, 4, 0)$ , que de acordo com a Fig. 4.7, resulta em valores positivos para a CCR. Na Figura 4.8, cada linha verde está relacionada a uma das 81 condições iniciais, representando a posição  $x_i(t)$  no espaço de fase do sistema. Para cada Painel foi usado um valor de temperatura diferente:  $T = 0,25K$  para (a),  $T = 0,50K$  para (b),  $T = 1,0K$  para (c),  $T = 1,5K$  para (d),  $T = 2,0K$  para (e),  $T = 4,0K$  para (f). A curva em preto ilustra o valor da média de  $x_i(t)$  sobre as condições iniciais e para os Painéis 4.8(a), (b) e (f) tem valor aproximadamente igual a zero para todos os valores de  $t$ , indicando que a CCR tende a ser mínima para estas configurações de parâmetros

e temperaturas. Nos Painéis 4.8(c), (d) e (e), o comportamento da curva que indica a média das posições revela a origem da CCR positiva: o deslocamento dos portadores de carga no sentido positivo de  $x$ , induzido pela temperatura  $T$ . Para  $T = 0,25K$ , a posição  $x_i(t)$  se mantém praticamente constante e a média  $\langle x_i(t) \rangle$  é nula. Com o aumento da temperatura, agora com  $T = 0,50K$ , há um aumento nas flutuações e transições de uma trajetória para outra, tal qual a destruição ou aparecimento de novas trajetórias. De maneira geral, o aumento na temperatura resultou, também, no aumento da quantidade de linhas na parte positiva do gráfico no Pannel 4.8(b) em relação ao Pannel 4.8(a). Com o aumento da temperatura, o comportamento Browniano das trajetórias é reconhecido, nos Painéis 4.8(c)-(f). Contudo, nos Painéis 4.8(c)-(e) a média  $\langle x_i(t) \rangle$  se mostra positiva e crescente, indicando que a velocidade e, conseqüentemente, a CCR  $\bar{J}_x/v_F$  são positivas, condizendo com o que se observa nas curvas ilustradas na Figura 4.7. Para  $T = 4,00K$ , os valores para a média são todos  $\langle x_i(t) \rangle \approx 0$ , indicando que não há ativação de corrente. A análise dos resultados desta seção destaca a interação complexa entre os parâmetros  $A$  e  $T$  e seus efeitos no comportamento da CCR, que exhibe diferentes regimes de ativação e reversão, e os eventuais impactos de flutuações de temperatura no sistema.

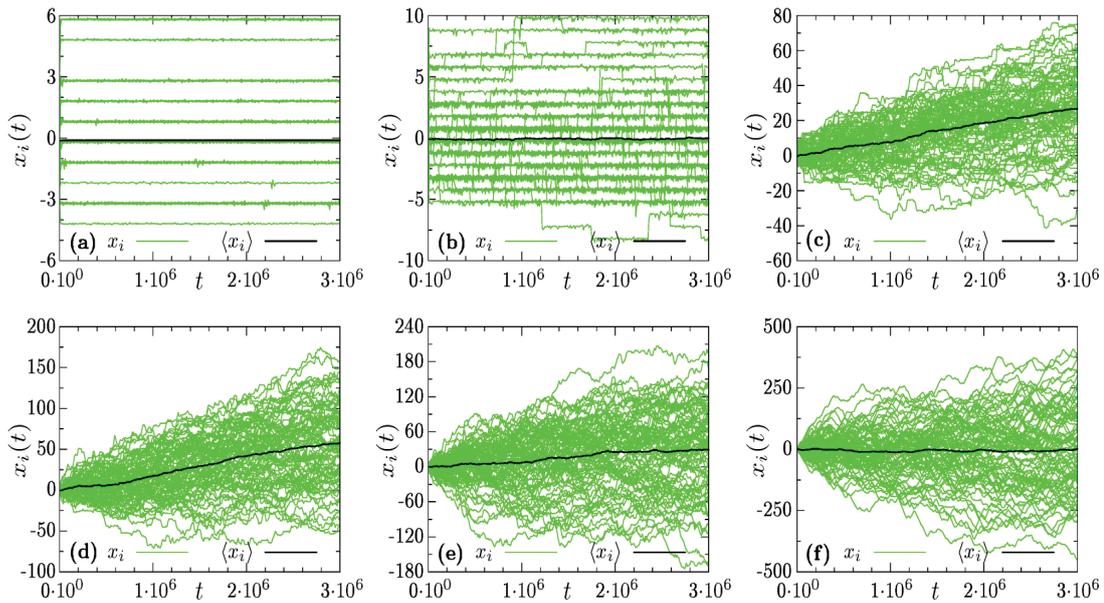


Figura 4.8: Ilustração das trajetórias das coordenadas  $x_i(t)$  dos portadores de carga, representadas na cor verde, juntamente aos valores médios, em preto. As curvas são apresentadas para valores específicos dos parâmetros  $(A, \omega_y) = (12, 4, 0)$ , escolhidos em torno do pico de  $\bar{J}_x$  do Pannel 4.7(a), para vários valores de temperatura no modelo do chip de grafeno, descrito pela Equação (4.3). Para cada um dos painéis, os valores de  $T$  são: (a)  $T = 0,25K$ , (b)  $T = 0,50K$ , (c)  $T = 1,0K$ , (d)  $T = 1,5K$ , (e)  $T = 2,0K$ , e (f)  $T = 4,0K$ . Os outros parâmetros são os mesmos da Figura 4.6. Nos Painéis (a), (b) e (f),  $\bar{J}_x \sim 0$ , enquanto nos Painéis (c), (d) e (e),  $\bar{J}_x > 0$  por conta da ativação da CCR pela temperatura  $T$ .

Os resultados reportados acima destacam a complexa e diversa gama de comportamentos da CCR, obtidos através da variação dos parâmetros  $A$ ,  $\omega_y$  e  $T$ . Para ter uma visão mais ampla desta variedade, nas seções seguintes são apresentados diagramas da CCR, calculados nos espaços de parâmetros  $T \times \omega_y$  e  $A \times \omega_y$ .

### 4.3.2 CCR no espaço de parâmetros $T \times \omega_y$

Para compreender melhor os efeitos da mudança nos valores dos parâmetros, nesta e na próxima subseção investigaremos diferentes configurações de espaços de parâmetros, calculando os valores da CCR. Estamos interessados, também, nas mudanças que ocorrem no espaço de parâmetros com relação ao aumento de temperatura, principalmente quando analisamos estruturas com CCR ideais. O aumento de temperatura (ou ruído) geralmente acarreta na destruição parcial ou total destas estruturas [82].

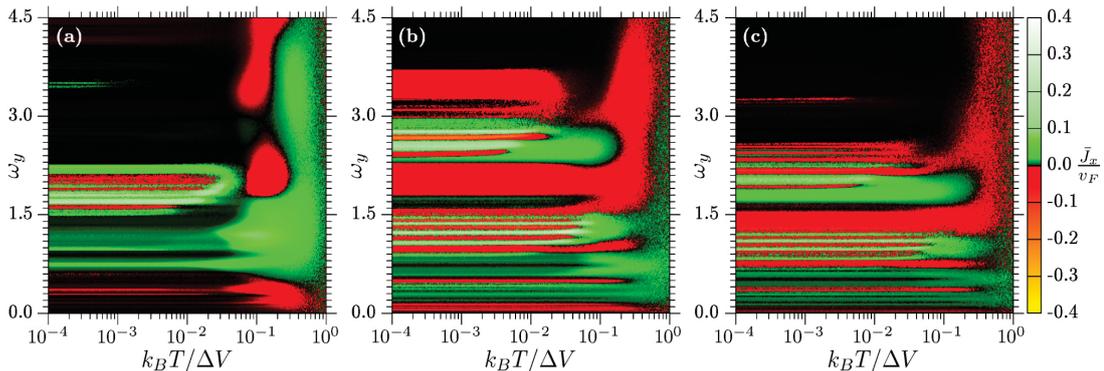


Figura 4.9: Valores da CCR,  $\bar{J}_x$  (na barra de cores), plotados em escala semi-logarítmica no espaço de parâmetros de  $k_B T / \Delta V \times \omega_y$  para o modelo do chip de grafeno modelado pela Equação (4.3). Os valores de parâmetros utilizados nas simulações se encontram nos seguintes intervalos:  $k_B T / \Delta V \in [10^{-4}, 10^0]$  e  $\omega_y \in [0, 4, 5]$ . Cada Painel corresponde a um valor de  $A$  diferente:  $A = 20$  em (a),  $A = 65$  em (b) e  $A = 110$  em (c). Nos Painéis (b) e (c), as listras que são relacionadas ao fenômeno de reversão de CCR são mais evidentes.

Os diagramas de CCR ilustrados na Figura 4.9 são apresentados com escala logarítmica no eixo horizontal, cobrindo o espaço de parâmetros do par  $(k_B T / \Delta V, \omega_y)$  no intervalo  $[0, 0001, 1, 0] \times [0, 0, 4, 5]$  numa grade de  $800 \times 500$  pontos. Os três painéis exibem a CCR  $\bar{J}_x$  em cores para (a)  $A = 20$ , (b)  $A = 65$  e (c)  $A = 110$ . O gradiente de verde para branco indica pontos onde a CCR tem valor positivo, enquanto o gradiente de vermelho para amarelo indica valores de CCR negativos. Em preto são indicadas as configurações de  $(k_B T / \Delta V, \omega_y)$  que resultam em CCR nula. No Painel 4.9(a), CCRs positivas e negativas para temperaturas pequenas só aparecem para valores menores da frequência:  $\omega_y \lesssim 2, 3$ . Conforme a temperatura aumenta, até  $k_B T / \Delta V \sim 0,02$ , algumas listras com CCR positivas e negativas são observadas. Para  $k_B T / \Delta V > 0,02$ , as listras desaparecem e dão lugar a regiões maiores de CCR. No regime de maiores temperaturas, correntes eficientes são encontradas também para maiores valores de  $\omega_y$ . Conforme  $k_B T / \Delta V \rightarrow 1,0$ , a CCR tende a zero para todos os valores de  $\omega_y$ . Para o Painel 4.9(b), onde  $A = 65$ , a quantidade de listras e regiões com CCR ideal aumenta e agora são observadas também em regiões com valores maiores de  $\omega_y$ . As listras se estendem para maiores valores de  $k_B T / \Delta V$  e a região com CCR positiva próxima a  $k_B T / \Delta V = 1,0$  diminui. Para  $A = 110$ , no Painel 4.9(c) regiões com valor de CCR ideal voltam a diminuir para frequências mais altas. As listras com CCR eficiente encontradas no Painel 4.9(b) são comprimidas, se tornando menos

espessas e sendo deslocadas para menores valores de  $\omega_y$ . A região com CCR positiva próxima a  $k_B T / \Delta V = 1,0$  desaparece, dando espaço a uma região pontilhada que mistura valores de CCR positivo, negativo e nulo. O aspecto granular, aparente nos Painéis 4.9(b) e (c), é característica de dinâmica transiente [65, 83].

### 4.3.3 CCR no espaço de parâmetros $A \times \omega_y$

Com o objetivo de entender melhor a influência do parâmetro  $A$  nos valores da CCR e focando na ativação ou destruição da CCR induzida pela temperatura, investigamos um recorte no espaço de parâmetros de  $A \times \omega_y$  no intervalo  $[5, 180] \times [0, 0, 4, 5]$ , com um valor de temperatura  $T$  fixo. A grade utilizada para a simulação foi de  $1000 \times 500$  pontos. Na Figura 4.10, a CCR  $\bar{J}_x$  é ilustrada em cores, com seus valores indicados pela barra posicionada à direita dos Painéis: pontos em verde ou branco indicam valores de CCR positivos, pontos em vermelho, laranja ou amarelo indicam valores de CCR negativos. Pontos em preto indicam que, para a determinada configuração de parâmetros  $(A, \omega_y)$ , a CCR é nula. Os resultados são apresentados nos Painéis 4.10(a)-(h), para os valores de temperatura  $T = \{1,0 \times 10^{-14}, 1,0 \times 10^{-3}, 1,0 \times 10^{-1}, 0,3, 0,5, 1,0, 2,0, 4,0\}K$ . Nos

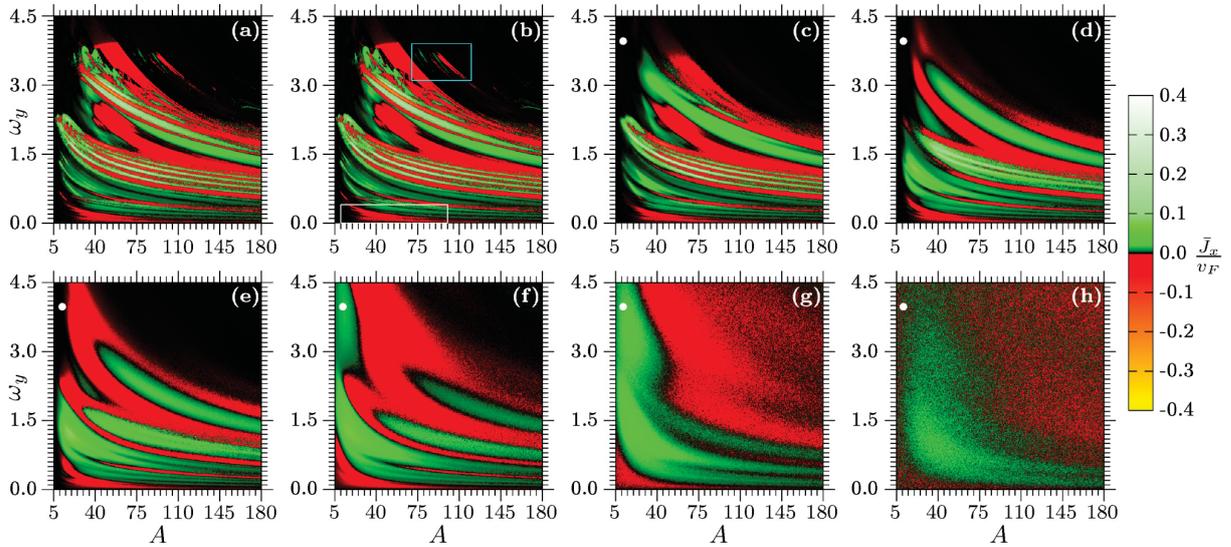


Figura 4.10: A CCR,  $\bar{J}_x$ , é apresentada em cores no do espaço de parâmetros de  $A \times \omega_y$  para o modelo do chip de grafeno da Equação (4.3). Os valores utilizados para os parâmetros, nas simulações, são os seguintes:  $A \in [5, 180]$  e  $\omega_y \in [0, 4, 5]$ , para as diferentes temperaturas  $T = 1,0 \times 10^{-14}K$  para (a),  $T = 1,0 \times 10^{-3}K$  para (b),  $T = 1,0 \times 10^{-1}$  para (c),  $T = 0,3K$  para (d),  $T = 0,5K$  para (e),  $T = 1,0K$  para (f),  $T = 2,0K$  para (g), e  $T = 4,0K$  para (h).

Painéis 4.10(a) e (b), o comportamento do sistema para baixíssimas temperaturas é observado. Para valores do parâmetro  $A \lesssim 5$ , a CCR é nula para todo e qualquer valor de frequência. Contudo, conforme  $A$  aumenta, diversas listras curvadas com valores positivos e negativos de CCR surgem. A reversão de corrente perante a mudança do parâmetro  $\omega_y$  ocorre diversas vezes, para um mesmo valor de  $A$ . Para amplitudes maiores do campo elétrico, a região ocupada por estruturas com CCR diferente de zero diminui,

fazendo com que a parte superior do espaço de parâmetros seja preenchida por pontos com CCR nula. No Painel 4.10(b), a caixa em destaque na parte superior da ilustração evidencia a existência de uma estrutura menor com CCR ideal, separada da grande região permeada por CCR não nula. Uma magnificação desta região é apresentada no Painel 4.11(a), revelando múltiplas pequenas estruturas com CCR positivas e negativas. Para  $\omega_y < 0,4$ , as listras se mostram mais evidentes, como exibido na magnificação do retângulo inferior do Painel 4.10(b), no Painel 4.11(b). A configuração das listras é, de

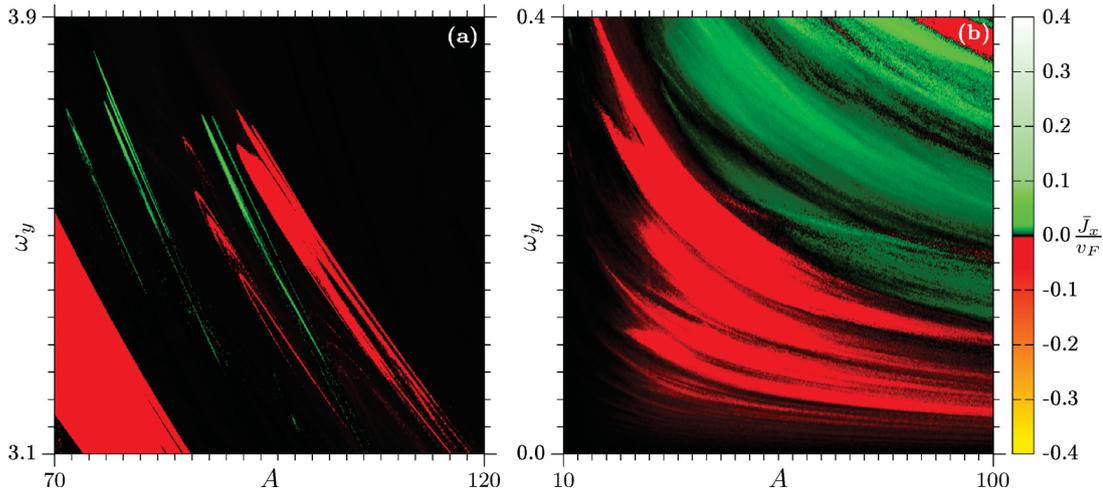


Figura 4.11: Magnificação da região delimitada pela caixa nas cores ciano (a) acima e branco (b) abaixo do Painel 4.10(b), para  $T = 10^{-3}K$ . No Painel (a) identificamos sequências de estruturas organizadas com CC positiva e negativa, que são suprimidas quando  $T = 0,1K$ , como visto no Painel 4.10(c). As estruturas observadas no Painel (b) passam a ser menos bem definidas conforme a temperatura aumenta, e passam a ser indistinguíveis a partir de  $T = 0,5K$ , no Painel 4.10(e).

certa forma, similar a estruturas periódicas estáveis genéricas reportadas nas referências [26, 28], onde correntes de catraca ideais são caracterizadas. Comparando os dois primeiros Painéis ao Painel 4.10(c), é notável a diminuição da quantidade de listras no espaço de parâmetros, principalmente no interior da estrutura com CCR positiva na parte superior da ilustração. A destruição das pequenas estruturas desanexas é outro efeito visível, causado pelo aumento da temperatura do sistema. No Painel 4.10(d), a maioria das listras finas tendem a desaparecer e as delimitações das estruturas se tornam menos definidas. Conforme a temperatura aumenta, há o surgimento de um padrão granulado que ocupa cada vez mais o espaço de parâmetros, do Painel 4.10(e) para o Painel 4.10(f), até quase preenchê-lo no Painel 4.10(h). No Painel 4.10(h), o efeito da temperatura no sistema faz com que as estruturas pré-existent sejam quase indistinguíveis. Nos Painéis 4.10(g) e (h), os efeitos transientes são muito mais evidentes, sugerindo que altas temperaturas tendem a destruir as CCRs. A supressão da CCR ideal, induzida pela temperatura, se alinha a descobertas prévias em diferentes sistemas relacionados ao efeito de catraca [82, 84, 74, 85].

Da análise da Figura 4.10, é importante notar a ativação de CCR ideal induzida pela temperatura. Comparando os Painéis 4.10(c), (d) e (e) para  $T = 1K \times 10^{-1}$ ,  $T = 0,3K$  e  $T = 0,5K$ , respectivamente, nas coordenadas para as quais o ponto branco está situado

( $A \sim 12, \omega_y = 4, 0$ ), a CCR se mantém nula para consideráveis aumentos na temperatura. Entretanto, com o aumento progressivo de  $T$ , a região com CCR nula é ocupada por uma estrutura com CCR positiva no Painel 4.10(f), tendo seu valor e tamanho aumentados no Painel 4.10(g). Além disso, as listras vermelhas menores, vistas a baixas temperaturas no interior das regiões associadas a CCR positivas continuam a ser dissipadas com o aumento da temperatura. No Painel 4.10(f), além da expansão da região vermelha de CCR, nota-se a ativação de CCR positiva para baixos valores de  $A$  e valores de  $\omega_y \gtrsim 0,75$ . Por outro lado, para valores altos de  $A$  e para todo o intervalo de  $\omega_y$ , efeitos transientes induzidos por altas temperaturas se tornam mais visíveis, dado o aumento das regiões de CCR negativa e positiva com padrão granuloso. O processo de granularização, indicativo de efeitos transientes prolongados, pode ser observado em todos os Painéis, mas é especialmente evidente nos Painéis 4.10(g) e (h). Para altas temperaturas (Painel 4.10(h)), o comportamento do chip de grafeno 4.3 é governado, essencialmente, por dinâmica transiente. Tais resultados podem colaborar para o avanço nos estudos de aplicação para chips de grafeno reais em diferentes gradientes de temperatura.

#### 4.4 CONCLUSÕES PARCIAIS

Investigamos o fenômeno de corrente de CCR em um chip de grafeno com uma camada, descrito pelo sistema de equações da Equação (4.3). A capacidade de condução de calor e eletricidade do grafeno e o transporte balístico das cargas por longas distâncias evidenciam a importância do estudo da dinâmica dos portadores de carga nestes dispositivos com promissoras aplicações tecnológicas e comerciais [86]. Para tal, é crucial a investigação da estabilidade e das propriedades de transporte de carga em relação aos parâmetros controláveis do sistema. Para diferentes configurações do espaço de parâmetros, determinamos numericamente os valores da CCR. Os principais resultados discutidos ao longo deste capítulo revelam a dependência da temperatura para a ativação da CCR. Encontramos valores finitos razoáveis de CCR para intervalos de temperatura  $1,0 \times 10^{-14}(0)K \leq T \lesssim 2,0K$ , amplitude  $0 < A \lesssim 100$  e frequência  $0 < \omega_y \lesssim 4,0$ . Para diversas configurações do sistema, a reversão de CCR existe como função de um parâmetro. Estes resultados podem ser explicados em termos de alterações estruturais e quebras de simetria dos atratores dissipativos. Além disso, conforme a temperatura aumenta, a CCR tende a diminuir, indicando a relação intrínseca entre  $T$  e o fenômeno observado.

A ativação e reversão de CCRs encontradas revelam a diversidade e o complexo intervalo de comportamento da CCR obtida através de pequenas variações no parâmetro  $T$ ,  $\omega_y$  e  $A$ . Isto permite gerar distintos valores de CCRs e uma diversidade de efeitos para o transporte dos portadores de carga que podem ser aplicados e controlados no modelo considerado. Contudo, num cenário prático, algumas melhorias tecnológicas são

necessárias para se observar experimentalmente o fenômeno de reversão de corrente, que ocorre apenas para  $T < 4K$ .

## 5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Investigamos a aplicação de CC (CCR) em dois sistemas distintos. Um deles descreve a dinâmica de uma partícula num fluxo de fluido, enquanto o outro modela o movimento dos portadores de carga em um chip de grafeno. Nossas investigações tiveram como enfoque a exploração do espaço de parâmetros (calculados por meio de simulações computacionais), buscando diferentes configurações e analisando o impacto da variação dos parâmetros nos valores da CC (ou CCR) e de que forma essas podem ser induzidas nos sistemas abordados.

No primeiro cenário, o método *bailout embedding* foi aplicado a uma catraca determinística, introduzindo um termo dissipativo diferente do usual, e analisamos como esse afetou a dinâmica das partículas no fluxo de fluido. Estruturas periódicas, como as línguas de Arnold e os camarões, foram identificadas no espaço de parâmetros e desempenharam um papel importante na otimização da corrente de catraca. Além disso, foi observada a coexistência de múltiplos atratores, indicando a presença de multiestabilidade. Esse fenômeno sugere que pequenas alterações nas condições iniciais do sistema podem direcioná-lo para diferentes estados estáveis, permitindo o controle do sistema sem a necessidade de alterar seus parâmetros.

O estudo também explorou efeitos transientes e demonstrou que a corrente de catraca pode sofrer inversão em função do tempo ou de alterações nos parâmetros do sistema. Essa descoberta também ressalta a importância de considerar o comportamento transiente do sistema e não somente o assintótico. A inversão de corrente pode ser desejada em uma gama de sistemas ou dispositivos tecnológicos. Ter conhecimento de sua existência e dos intervalos nos quais ela existe é de grande importância.

De forma geral, este estudo explora a dinâmica complexa do sistema e fornece informações sobre a interação entre o sistema de catraca e o fluido circundante. Ele contribui para a compreensão dos fenômenos de transporte direcionado sem viés na dinâmica de fluidos e incentiva novas pesquisas neste campo. Limitações, como a simplicidade do modelo, impedem uma descrição precisa do sistema em estudo, mas a associação dos valores de CC eficientes às EIEs nos espaços de parâmetros podem indicar a existência de regiões com características iguais ou similares em modelos mais fiéis à realidade.

No segundo cenário, o foco foi o transporte com características relativísticas em um chip de grafeno, um material conhecido por suas propriedades excepcionais de condução térmica e elétrica. As simulações numéricas demonstraram que a CCR pode ser ativada ou suprimida pela variação de parâmetros como temperatura, amplitude e frequência do campo elétrico externo. A análise revelou que estruturas bem definidas no espaço de parâmetros são responsáveis por CCR eficientes. Além disso, os resultados destacaram a

relação intrínseca entre a temperatura e a destruição ou ativação de correntes, indicando que a eficiência do transporte depende diretamente das condições externas.

A possibilidade de controlar correntes de catraca em materiais como o grafeno, por meio de ajustes nos parâmetros do sistema, pode contribuir para aplicações em áreas como transporte de partículas, nanoengenharia e dispositivos eletrônicos avançados. Nossos resultados apontam para um intervalo de aplicação com temperaturas extremamente baixas, o que indica a impossibilidade da reprodução experimental. O efeito catraca é suprimido para temperaturas na casa de unidades de Kelvin, o que pode indicar a necessidade de adaptação do modelo utilizado, para que seja funcional a temperaturas maiores.

Em continuidade aos trabalhos desenvolvidos, a investigação de um sistema do tipo *bailout embedding* com menos simplificações (como alguns apresentados em [48, 58]) pode trazer resultados mais próximos do comportamento real de partículas imersas em fluidos, o que pode resultar numa melhor compreensão do transporte de partículas nestas situações. Como trabalho posterior ao estudo do chip de grafeno em monocamada, é razoável considerar a exploração de modelos que se baseiam no ‘twisted bilayer graphene’, cuja observação do efeito catraca já ocorreu em modelos similares ou modificados [87].

## REFERÊNCIAS

- [1] S. H. Strogatz. *Nonlinear Dynamics and Chaos: With Applications to Physics, Biology, Chemistry, and Engineering*. CRC Press, 2nd edition, 2015.
- [2] S. Gambacorta. *Qualitative Cusp Catastrophe Risk-Based Model for Describing Noise Induced Hearing Loss*. The Order of Apothecaries of Australia, 10 2022.
- [3] R. P. Feynman. *The Feynman lectures on physics*. Reading, Mass. : Addison-Wesley Pub. Co., 1963.
- [4] B. Lau, O. Kedem, J. Schwabacher, D. Kwasnieski, and E. A. Weiss. An introduction to ratchets in chemistry and biology. *Mater. Horiz.*, 4:310–318, 2017.
- [5] M. I. Katsnelson. *The Physics of Graphene*. Cambridge University Press, 2 edition, 2020.
- [6] M. B. Rhouma. *Modeling and simulation of composite plasmonic structures based on graphene and metals*. PhD thesis, Université Clermont Auvergne, 2021.
- [7] J. Lehmann, S. Kohler, V. May, and P. Hänggi. Vibrational effects in laser-driven molecular wires. *J. Chem. Phys.*, 121:2278, 2004.
- [8] G. Lambert, D. Liao, and R. H. Austin. Collective escape of chemotactic swimmers through microscopic ratchets. *Phys. Rev. Lett.*, 104:168102, 2010.
- [9] M. Magnasco. Forced thermal ratchets. *Phys. Rev. Lett.*, 71(10):1477, 1993.
- [10] J. Rousselet, L. Salome, A. Ajdari, and J. Prost. Directional motion of brownian particles induced by a periodic asymmetric potential. *Nature*, 370:446, 1994.
- [11] J. T. Finer, R. M. Simmons, and J. A. Spudich. Single myosin molecule mechanics: piconewton forces and nanometre steps. *Nature*, 368:113–119, 1994.
- [12] A.F. Huxley. 6 - muscle structure and theories of contraction. *Progress in Biophysics and Biophysical Chemistry*, 7:255–318, 1957.
- [13] S. M. Braxton. *Synthesis and use of a novel class of ATP carbamates and a ratchet diffusion model for directed motion in muscle*. PhD thesis, Washington State University, 2021.
- [14] M. O. Magnasco. Molecular combustion motors. *Phys. Rev. Lett.*, 72:2656–2659, Apr 1994.

- [15] F. Jülicher, A. Ajdari, and J. Prost. Modeling molecular motors. *Rev. Mod. Phys.*, 69:1269–1282, 1997.
- [16] R. Dean Astumian and Martin Bier. Fluctuation driven ratchets: Molecular motors. *Phys. Rev. Lett.*, 72:1766–1769, 1994.
- [17] R. Dean Astumian and M. Bier. Mechanochemical coupling of the motion of molecular motors to atp hydrolysis. *Biophysical J.*, 70(2):637–653, 1996.
- [18] R. L. Fagaly. Superconducting quantum interference device instruments and applications. *Review of Scientific Instruments*, 77(10):101101, 2006.
- [19] A.Th.A.M. De Waele, W.H. Kraan, R. De Bruyn Ouboter, and K.W. Taconis. On the d.c. voltage across a double point contact between two superconductors at zero applied d.c. current in situations in which the junction is in the resistive region due to the circulating current of flux quantization. *Physica*, 37(1):114–124, 1967.
- [20] A.Th.A.M. de Waele and R. de Bruyn Ouboter. Quantum-interference phenomena in point contacts between two superconductors. *Physica*, 41(2):225–254, 1969.
- [21] P. Reimann. Brownian motors: noisy transport far from equilibrium. *Phys. Rep.*, 361:57, 2002.
- [22] P. Shiv Halasyamani and Kenneth R. Poeppelmeier. Noncentrosymmetric oxides. *Chemistry of Materials*, 10(10):2753–2769, 1998.
- [23] A. M. Glass, D. von der Linde, and T. J. Negran. High-voltage bulk photovoltaic effect and the photorefractive process in linbo<sub>3</sub>. *Applied Physics Letters*, 25(4):233–235, 08 1974.
- [24] V. I. Belinicher and B. I. Sturman. The photogalvanic effect in media lacking a center of symmetry. *Soviet Physics Uspekhi*, 23(3):199, mar 1980.
- [25] B. I. Sturman and V. M. Fridkin. *Photovoltaic and Photo-refractive Effects in Noncentrosymmetric Materials*. Gordon and Breach, 1992.
- [26] A. Celestino, C. Manchein, H. A. Albuquerque, and M. W. Beims. Ratchet transport and periodic structures in parameter space. *Phys. Rev. Lett.*, 106:234101, 2011.
- [27] C. Manchein, A. Celestino, and M. W. Beims. Temperature resistant optimal ratchet transport. *Phys. Rev. Lett.*, 110:114102, Mar 2013.
- [28] A. Celestino, C. Manchein, H. A. Albuquerque, and M. W. Beims. Stable structures in parameter space and optimal ratchet transport. *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simulat.*, 19:139, 2014.

- [29] A. Pototsky, F. Marchesoni, F. V. Kusmartsev, P. Hänggi, and S. E. Savelév. Relativistic brownian motion on a graphene chip. *Eur. Phys. J. B*, 85:356, 2012.
- [30] A. Acun, L. Zhang, P. Bampoulis, M. Farmanbar, A. van Houselt, A. N. Rudenko, M. Lingenfelder, G. Brocks, M. I. Poelsema, B. and Katsnelson, and H. J. W. Zandvliet. Germanene: the germanium analogue of graphene. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 27(44):443002, oct 2015.
- [31] K. T. Alligood, T. D. Sauer, and J. A. Yorke. *CHAOS: An Introduction to Dynamical Systems*. Springer-Verlag, New York, 2 edition, 1996.
- [32] E. Ott. *Chaos in Dynamical Systems*. Cambridge University Press, Reino Unido, 2nd edition, 2002.
- [33] S. H. Strogatz. *Nonlinear Dynamics and Chaos: With Applications to Physics, Biology, Chemistry, and Engineering*. Addison-Wesley, 1994.
- [34] H. Goldstein, C. Poole, and J. Safko. *Classical mechanics*. Addison Wesley, San Francisco, 3 edition, 2002.
- [35] U. Feudel and C. Grebogi. Multistability and the control of complexity. *Chaos*, 7:4, 1997.
- [36] U. Feudel, C. Grebogi, B. R. Hunt, and J. A. Yorke. Map with more than 100 coexisting low-period periodic attractors. *Phys. Rev. E*, 54:71, 1996.
- [37] C. Grebogi, E. Ott, S. Pelikan, and J. A. Yorke. Strange attractors that are not chaotic. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 13(1):261–268, 1984.
- [38] A. Celestino. Investigação do espaço de parâmetros de catracas clássicas. Master’s thesis, Universidade Federal do Paraná – UFPR, Curitiba, PR, 2013.
- [39] T. R. Kelly, I. Tellitu, and J. P. Sestelo. In search of molecular ratchets. *Angewandte Chemie International Edition in English*, 36(17):1866–1868, 1997.
- [40] T. Ross Kelly, José Pérez Sestelo, and Imanol Tellitu. New molecular devices: In search of molecular ratchet. *The Journal of ORganic Chemistry*, 63:3655, 1998.
- [41] K. L. Sebastian. Molecular ratchets: Verification of the principle of detailed balance and the second law of dynamics. *Phys. Rev. E*, 61:937–939, 2000.
- [42] S. A. Abdulack, M. W. Beims, and S. R. Lopes. Controlling ratchet transport via a finite kicked environment. *Phys. Rev. E*, 94:062210, 2016.

- [43] E. Cortés, B. J. West, and K. Lindenberg. On the generalized langevin equation: Classical and quantum mechanicala). *The Journal of Chemical Physics*, 82(6):2708, 1985.
- [44] E. B. Dynkin. *Markov Processes*. Springer Berlin, 1 edition, 1965.
- [45] M. R. Maxey and J. J. Riley. Equation of motion for a small rigid sphere in a nonuniform flow. *The Physics of fluids*, 26:883, 1983.
- [46] T. R. Auton, J. C. R. Hunt, and M. Prud'Homme. The force exerted on a body in inviscid unsteady non-uniform rotational flow. *Journal of Fluid Mechanics*, 197:241–257, 1988.
- [47] G. I. Taylor. The forces on a body placed in a curved or converging stream of fluid. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 120(785):260–283, 1928.
- [48] J. H. E. Cartwright, U. Feudel, G. Károlyi, A. de Moura, O. Piro, and T. Tél. *Dynamics of Finite-Size Particles in Chaotic Fluid Flows*, pages 51–87. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2010.
- [49] H. Aref. Stirring by chaotic advection. *Journal of Fluid Mechanics*, 143:1–21, 1984.
- [50] N. Nirmal Thyagu and Neelima Gupte. Transport and diffusion in the embedding map. *Phys. Rev. E*, 79(6):066203, 2009.
- [51] N. Nirmal Thyagu and Neelim Gupte. Clustering, chaos, and crisis in a bailout embedding map. *Phys. Rev. E*, 76(4):046218, 2007.
- [52] A. E. Motter, Y. C. Lai, and C. Grebogi. Reactive dynamics of inertial particles in nonhyperbolic chaotic flows. *Phys. Rev. E*, 68:056307, 2003.
- [53] A. Babiano, J. H. E. Cartwright, O. Piro, and A. Provenzale. Dynamics of a small neutrally buoyant sphere in a fluid and targeting in Hamiltonian systems. *Phys. Rev. Lett.*, 84:5764, 2000.
- [54] J. H. E. Cartwright, M. O. Magnasco, and O. Piro. Bailout embeddings, targeting of invariant tori, and the control of Hamiltonian chaos. *Phys. Rev. E*, 65:045203(R), 2002.
- [55] J. H. E. Cartwright, M. O. Magnasco, O. Piro, and I. Tuval. Bailout embeddings and neutrally buoyant particles in three-dimensional flows. *Phys. Rev. Lett.*, 89:264501, 2002.

- [56] B. V. Chirikov. A universal instability of many-dimensional oscillator systems. *Phys. Rep.*, 52:263, 1979.
- [57] C. Reartes and P. D. Mininni. Bounds to the basset-boussinesq force on particle laden stratified flows. *Physics of Fluids*, 36(10):106605, 10 2024.
- [58] I. Tuval. *The dynamics of small bodies suspended in low Reynolds number flows: Applications in physics and biology*. PhD thesis, Universitat de les Illes Balears, Palma, 2005.
- [59] A. Babiano, J. H. E. Cartwright, O. Piro, and A. Provenzale. Dynamics of a small neutrally buoyant sphere in a fluid and targetin in hamiltonian systems. *Physical Review Letters*, 84(25):5764–5767, 2000.
- [60] S. Das and N. Gupte. Transport, diffusion, and energy studies in the arnold-beltrami-childress map. *Phys. Rev. E*, 96(3):032210, 2017.
- [61] W. F. De Magalhães. Dinâmica de partículas inerciais acopladas a um meio viscoso. Master’s thesis, Universidade do Estado de Santa Catarina – UDESC, Joinville, SC, 2019.
- [62] J. H. E. Cartwright, M. O. Magnasco, O. Piro, and I. Tuval. Noise-induced order out of chaos by bailout embedding. *Fluctuation and Noise Letters*, 2(4):R161–R174, 2002.
- [63] L. Wang, G. Benenti, G. Casati, and B. Li. Ratchet effect and the transporting islands in the chaotic sea. *Phys. Rev. Lett.*, 99:244101, 2007.
- [64] A. Wolf, J. B. Swift, H. L. Swinney, and J. A. Vastano. Determining Lyapunov exponents from a time series. *Physica D*, 16:285, 1985.
- [65] L. Santana, R. M. da Silva, H. A. Albuquerque, and C. Manchein. Transient dynamics and multistability in two electrically interacting FitzHugh-Nagumo neurons. *Chaos*, 31:053107, 2021.
- [66] Linda E. Reichl. *The Transition To Chaos: Conservative Classical Systems And Quantum Manifestations*. Springer-Verlag, New York, 2 edition, 2004.
- [67] J. A. C. Gallas. Dissecting shrimps: results for some one-dimensional physical systems. *Physica A*, 202:196, 1994.
- [68] V. I. Arnold. Small denominators. i. mapping the circle onto itself. *Izv. Math.*, 25, 1961.
- [69] S. L. T. de Souza, A. A. Lima, I. L. Caldas, R. O. Medrano-T., and Z. O. Guimarães-Filho. Self-similarities of periodic structures for a discrete model of a two-gene system. *Physics Letters A*, 376(15):1290–1294, 2012.

- [70] N. C. Pati, G. C. Layek, and Nikhil Pal. Bifurcations and organized structures in a predator-prey model with hunting cooperation. *Chaos, Solitons & Fractals*, 140:110184, 2020.
- [71] R. E. Ecke, J. D. Farmer, and D. K. Umberger. Scaling of the arnold tongues. *Nonlinearity*, 2(2):175, may 1989.
- [72] S. Garai, N. C. Pati, N. Pal, and G. C. Layek. Organized periodic structures and coexistence of triple attractors in a predator–prey model with fear and refuge. *Chaos, Solitons & Fractals*, 165:112833, 2022.
- [73] G. C. Layek. *An Introduction to Dynamical Systems and Chaos*. Springer Nature Singapore, 2 edition, 2024.
- [74] J. Spiechowicz, M. Kostur, and J. Łuczka. Brownian ratchets: How stronger thermal noise can reduce diffusion. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 27(2):023111, 2017.
- [75] U. Feudel. Complex dynamics in multistable systems. *International Journal of Bifurcation and Chaos*, 18(06):1607–1626, 2008.
- [76] R. Saito, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus. *Physical Properties of Carbon Nanotubes*. PUBLISHED BY IMPERIAL COLLEGE PRESS AND DISTRIBUTED BY WORLD SCIENTIFIC PUBLISHING CO., 1998.
- [77] R. L. Honeycutt. Stochastic Runge-Kutta algorithms. I. White noise. *Phys. Rev. A*, 45(2):600, 6 1992.
- [78] J. Dunkel and P. Hänggi. Relativistic brownian motion. *Phys. Rep.*, 471, 2009.
- [79] D. Cubero, J. C. Pascual, J. Dunkel, P. Talkner, and P. Hänggi. Thermal equilibrium and statistical thermometers in special relativity. *Phys. Rev. Lett.*, 99:170601, 2007.
- [80] S. A. Mikhailov. Nonlinear cyclotron resonance of a massless quasiparticle in graphene. *Phys. Rev. B*, 79:241309, 2009.
- [81] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. Chiral tunnelling and the klein paradox in graphene. *Nature Physics*, 2:620, 2006.
- [82] C. Manchein, A. Celestino, and M. W. Beims. Temperature resistant optimal ratchet transport. *Phys. Rev. Lett.*, 110:114102, 2013.
- [83] Y. Lai and T. Tél. *Transient Chaos: Complex Dynamics on Finite Time Scales*. Applied Mathematical Sciences. Springer-Verlag, New York, 2011 edition, 2011.

- [84] J. Spiechowicz, J. Łuczka, and P. Hänggi. Transient anomalous diffusion in periodic systems: ergodicity, symmetry breaking and velocity relaxation. *Sci. Rep.*, 6:30948, 2016.
- [85] C. Manchein, L. Santana, R. M. da Silva, and M. W. Beims. Noise-induced stabilization of the FitzHugh–Nagumo neuron dynamics: Multistability and transient chaos. *Chaos*, 32:083102, 2022.
- [86] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K.S. Novoselov, and A.K. Geim. The electronic properties of graphene. *Rev. Mod. Phys.*, 81(1):109, 2009.
- [87] E. Mönch, S. O. Potashin, K. Lindner, I. Yahniuk, L. E. Golub, V. Yu. Kachorovskii, V. V. Bel’kov, R. Huber, K. Watanabe, T. Taniguchi, J. Eroms, D. Weiss, and S. D. Ganichev. Ratchet effect in spatially modulated bilayer graphene: Signature of hydrodynamic transport. *Phys. Rev. B*, 105:045404, Jan 2022.

## APÊNDICE A – DEDUÇÃO DO MAPA DE CATRACA CLÁSSICA

A dedução aqui apresentada é baseada no conteúdo da dissertação [38].

Utilizando uma aproximação markoviana para o termo dissipativo na Equação (2.19), considerando que a temperatura é nula e considerando o modelo unidimensional, temos

$$m\ddot{x} = -\lambda\dot{x} + F(x, t). \quad (\text{A.1})$$

Como consideramos que a temperatura é nula, o termo estocástico  $\xi(t)$  é nulo, já que  $\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 0$  e  $T = 0$ . Lembrando que a primeira derivada da posição  $\dot{x}$  é a velocidade, a relação  $v = \dot{x}$  nos possibilita representar a Equação (A.1) por duas equações diferenciais ordinárias de primeira ordem

$$\begin{aligned} \dot{v} &= -\frac{\lambda}{m}v + \frac{F(x, t)}{m}, \\ \dot{x} &= v. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Precisa-se especificar  $F(x, t)$ , uma função periódica no tempo  $t$  e na posição  $x$ , que deve ser gerada a partir de um potencial assimétrico em  $x$ . Como queremos obter um mapa como resultado final, é cômodo escolher uma função que modele a dependência temporal por interações instantâneas, intervaladas com um período fixo. Para tal, podemos utilizar deltas de Dirac periódicas em  $t$ . A periodicidade espacial pode ser modelada por funções periódicas como senos ou cossenos. Definiremos o potencial gerador como uma soma de cossenos, do tipo

$$V(x, t) = k[\cos(x) + 0,5a \cos(2x + \phi)] \sum_{n=0}^{\infty} \delta(t - n\tau), \quad (\text{A.3})$$

sendo  $\tau$  o período com que os pulsos são gerados por

$$F(x, t) = -dV/dx = k[\text{sen}(x) + a\text{sen}(2x + \phi)] \sum_{n=0}^{\infty} \delta(t - n\tau), \quad (\text{A.4})$$

a cada intervalo  $\tau$ :  $0, \tau, 2\tau, 3\tau, \dots$ . A forma da curva gerada pela Equação (A.4) pode ser alterada variando os parâmetros de assimetria  $a$  e a fase  $\phi$ . A intensidade do pulso gerado depende da posição  $x$  no instante em que o pulso é gerado e também de  $k$ , que é a amplitude.

Nos tempos entre os impulsos, onde não há ação da força  $F(x, t)$ , a Equação (A.2) pode ser escrita como

$$\dot{v} = -\bar{\lambda}v, \quad (\text{A.5})$$

sendo definidas as variáveis do tipo  $\bar{\lambda}$  como as próprias quantidades divididas pela massa da partícula:  $\bar{\lambda} = \lambda/m$ . A solução da Equação (A.5) é do tipo

$$v(t) = v(0)e^{-\bar{\lambda}t}. \quad (\text{A.6})$$

No intervalo do período  $\tau$ , o deslocamento é descrito por

$$x_{n+1} - x_n = \int_0^\tau v(t)dt = \frac{v(0)}{\bar{\lambda}} \left(1 - e^{-\bar{\lambda}\tau}\right). \quad (\text{A.7})$$

Para simplificar, definimos  $\chi = \exp(-\bar{\lambda}\tau)$ , temos a expressão

$$x_{n+1} - x_n = \frac{\tau v(0)(1 - \chi)}{|\ln(\chi)|}. \quad (\text{A.8})$$

Desta forma, o resultado da integração sobre um intervalo terá a mesma solução que a de uma partícula em um fluido com viscosidade  $\lambda$  com  $T = 0$  (Equação A.6), a qual foi submetida a um impulso de magnitude  $k[\text{sen}(x) + a\text{sen}(2x_n + \phi)]$  e teve um aumento na sua quantidade de movimento inicial

$$v(0) = v_n + \bar{k}[\text{sen}(x) + a\text{sen}(2x_n + \phi)]. \quad (\text{A.9})$$

Substituindo o resultado acima à Equação (A.6), temos

$$v_{n+1} = \chi\{v_n + \bar{k}[\text{sen}(x) + a\text{sen}(2x_n + \phi)]\}. \quad (\text{A.10})$$

Definindo  $K = \tau(1 - \chi)\bar{k}/|\ln(\chi)|$  e o momento

$$p = \frac{v\tau(1 - \chi)}{\chi|\ln(\chi)|}, \quad (\text{A.11})$$

obtemos as equações que descrevem a trajetória de uma catraca clássica ao substituir as Equações A.9 e A.10 nas Equações A.8 e

$$p = \frac{v\tau(1 - \chi)}{\chi|\ln(\chi)|}, \quad (\text{A.12})$$

respectivamente, e identificando a expressão que corresponde a  $K$  nestas Equações. Por fim, o mapeamento para catracas é dado pelo sistema

$$\begin{cases} p_{n+1} = \chi p_n + K[\text{sen}(x_n) + a\text{sen}(2x_n + \phi)], \\ x_{n+1} = x_n + p_{n+1}. \end{cases} \quad (\text{A.13})$$

No sistema de Equações A.13, o parâmetro  $K$  controla a não-linearidade do sistema,  $\chi$  é responsável pela dissipação,  $\phi$  é a fase do potencial e  $a$  governa a assimetria do potencial.

Conforme citado na Seção 2.2, existem três características que o sistema deve possuir para que possa representar uma catraca, de fato. São elas o desequilíbrio térmico e as assimetrias espacial e temporal. O forçamento  $F(x, t)$  tira o sistema do equilíbrio térmico e o potencial gerador de  $F$  é assimétrico para  $\phi \neq i\pi$ , onde  $i \in \mathcal{Z}$  e  $a \neq 0$ , quebrando a simetria espacial. O parâmetro  $\chi$  introduz dissipação no sistema, gerando assimetria temporal, o que é refletido quando calcula-se o determinante da Jacobiana do sistema:

$$|\det(\mathbf{J})| = \chi, \quad (\text{A.14})$$

fazendo com que o sistema seja conservativo caso  $\chi = 1$  e dissipativo para  $\chi < 1$ .

## APÊNDICE B – DESCRIÇÃO DOS PORTADORES DE CARGA NO CHIP DE GRAFENO

A dedução do sistemas de equações apresentada neste apêndice tem como base a referência [29].

Discutimos aqui os argumentos que suportam a descrição clássica da Equação (4.3) da dinâmica dos portadores de carga numa folha de grafeno acoplada a um banho térmico com dada temperatura  $T$ .

No limite de baixa energia e na ausência de aleatoriedade (flutuações,  $T \equiv 0$ , desordem e outros), os portadores de carga no grafeno, elétrons e buracos, obedecem as equações análogas às de Dirac

$$(\mathcal{P}_x - i\mathcal{P}_y)\Psi_B + \frac{\mathcal{U}(x, y, t)}{v_F}\Psi_A = \frac{i\hbar}{v_F} \frac{\partial \Psi_A}{\partial t}, \quad (\text{B.1})$$

$$(\mathcal{P}_x + i\mathcal{P}_y)\Psi_A + \frac{\mathcal{U}(x, y, t)}{v_F}\Psi_B = \frac{i\hbar}{v_F} \frac{\partial \Psi_B}{\partial t}, \quad (\text{B.2})$$

onde as duas componentes espinorais da função de onda do portador,  $(\Psi_A, \Psi_B)$ , se referem às duas sub-redes triangulares e os operadores momento são definidos como  $(\mathcal{P}_x, \mathcal{P}_y) = (-i\hbar\partial/\partial x, -i\hbar\partial/\partial y)$ .

Aplicando os operadores  $(\mathcal{P}_x - i\mathcal{P}_y)$  e  $(\mathcal{P}_x + i\mathcal{P}_y)$ , respectivamente, à primeira e segunda equação, nos leva a equações diferenciais parciais de segunda ordem acopladas,

$$\left[ -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{\hbar^2}{v_F^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + 2 \frac{i\hbar}{v_F^2} \mathcal{U} \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\mathcal{U}^2}{v_F^2} \right] \Psi_B = -\frac{i\hbar}{v_F^2} \Psi_B \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} + \frac{i\hbar}{v_F} \Psi_A \left( \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial x} + i \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial y} \right), \quad (\text{B.3})$$

$$\left[ -\hbar^2 \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{\hbar^2}{v_F^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + 2 \frac{i\hbar}{v_F^2} \mathcal{U} \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\mathcal{U}^2}{v_F^2} \right] \Psi_A = -\frac{i\hbar}{v_F^2} \Psi_A \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} + \frac{i\hbar}{v_F} \Psi_B \left( \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial x} - i \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial y} \right). \quad (\text{B.4})$$

De forma equivalente, as ações efetivas  $(S_A, S_B)$ , definidas reescrevendo  $(\Psi_A, \Psi_B)$  como  $(\exp(iS_A/\hbar), \exp(iS_B/\hbar))$ , satisfazem as equações acopladas,

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial S_A}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial S_A}{\partial y} \right)^2 - \frac{1}{v_F^2} \left( \frac{\partial S_A}{\partial t} - \mathcal{U} \right)^2 - i\hbar \frac{\partial^2 S_A}{\partial x^2} - i\hbar \frac{\partial^2 S_A}{\partial y^2} + \frac{i\hbar}{v_F^2} \frac{\partial^2 S_A}{\partial t^2} = \\ -\frac{i\hbar}{v_F^2} \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} + \frac{\hbar}{v_F} e^{i(S_A - S_B)/\hbar} \left( i \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial x} - \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial y} \right), \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial S_B}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S_B}{\partial y}\right)^2 - \frac{1}{v_F^2} \left(\frac{\partial S_B}{\partial t} - \mathcal{U}\right)^2 - i\hbar \frac{\partial^2 S_B}{\partial x^2} - i\hbar \frac{\partial^2 S_B}{\partial y^2} + \frac{i\hbar}{v_F^2} \frac{\partial^2 S_B}{\partial t^2} = \\ -\frac{i\hbar}{v_F^2} \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial t} + \frac{\hbar}{v_F} e^{i(S_B - S_A)} \left( i \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial x} + \frac{\partial \mathcal{U}}{\partial y} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

No limite em que  $\hbar \rightarrow 0$ ,  $S_A$  e  $S_B$  tendem a uma única ação clássica,  $S$ , que é solução da equação de Hamilton-Jacobi clássica,

$$\left(\frac{\partial S}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2 - \frac{1}{v_F^2} \left(\frac{\partial S}{\partial t} - \mathcal{U}\right)^2 = 0. \quad (\text{B.7})$$

Fazendo uso da conhecida relação,  $\mathcal{H} = \partial S / \partial t$ , podemos derivar da Equação (B.7) a Hamiltoniana clássica para uma partícula relativística sem massa,

$$\mathcal{H} = \pm v_F \sqrt{p_x^2 + p_y^2} + \mathcal{U}, \quad (\text{B.8})$$

sendo  $\mathcal{U}(x, y, t) = U(x) - E_y(t)y - E_x(t)x$  e  $\pm$  se referindo aos respectivos elétrons e buracos, cujas densidades são relacionadas pela eletroneutralidade.