

## Poços Duplos de Potenciais Simétricos não-Harmônicos e Harmônicos.

O *poço de potencial duplo* tem sido estudado em muitos livros textos e aplicado para investigar um grande número de fenômenos em Mecânica Clássica [z.1-z.3] e em Mecânica Quântica. Não é nossa intenção fazer uma revisão sobre esses estudos e aplicações. Analisaremos somente alguns casos unidimensionais onde são usados *poços duplos de potenciais simétricos harmônicos e não-harmônicos*.

### (Z) Mecânica Clássica - Poços Duplos Quárticos.

Alguns sistemas conservativos com Hamiltonianos dependentes do tempo  $t$  da forma  $H(p_1, \dots, p_N; q_1, \dots, q_N; t)$  que são periódicos no tempo tem se mostrado muito úteis para estudar a *transição para o caos* [z.1] porque é possível de se controlar as condições que levam a essa transição.

Um dos sistemas mais simples com um grau de liberdade é o oscilador conservativo de Duffing [z.1]. De acordo com Reichl [z.1] o Hamiltoniano  $H$  de Duffing pode ser escrito como

$$H(p, x; t) = p^2/2m - kx^2/2 + x^4 + \varepsilon x \cos(\omega_0 t), \quad (Z.1)$$

onde o termo oscilante  $\varepsilon x \cos(\omega_0 t)$  é perturbativo em relação ao Hamiltoniano  $H_0 = p^2/2m + V(x) = p^2/2m - kx^2/2 + x^4$ . O potencial não-harmônico (ou *poço quártico duplo*)  $V(x) = -kx^2/2 + x^4$  é formado por dois poços simétricos de potencial em torno de  $x = 0$ , com mínimos em  $x = -\sqrt{k/2}$  e  $x = \sqrt{k/2}$  (vide Fig.(Z.1)). Para  $\varepsilon = 0$  o sistema é integrável, mas para  $\varepsilon > 0$  ele é não-integrável.

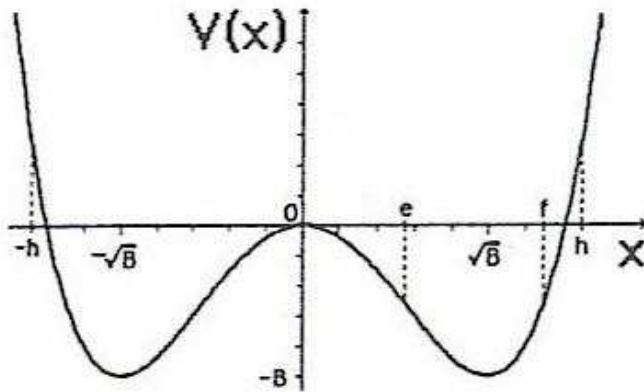


Fig.(Z.1).Gráfico do potencial duplo não-harmônico  $V(x) = -kx^2/2 + x^4$  em função de  $x$ ;  $B^2 = k/2$  e os parâmetros  $e$  e  $f$  são definidos na Eq.(Z.1).

### Caso integrável $\varepsilon = 0$

Nesse primeiro caso, ou seja, quando  $\varepsilon = 0$  a partícula se movimenta com energia  $H_0 = E_0$ . Quando  $E_0 < 0$  ela fica presa em um dos dois poços, pois não pode ultrapassar a barreira entre os poços. Quando  $E_0 > 0$  ela pode ir de um lado para o outro ultrapassando a barreira.

#### (A) Partícula aprisionada ( $E_0 < 0$ ).

Quando  $E_0 < 0$  o momento  $p$  da partícula é dado por

$$p = \pm [2m(E_0 + kx^2/2 - x^4)]^{1/2} = \pm [2m(f^2 - x^2)(x^2 - e^2)]^{1/2} \quad , (Z.2)$$

onde  $f^2 = k/4 + (k^2/16 + E_0)^{1/2}$  e  $e^2 = k/4 - (k^2/16 + E_0)^{1/2}$ . É fácil vermos que  $x_1 = e$  e  $x_2 = f$  são os pontos entre os quais a **partícula oscila** dentro do poço onde está aprisionada.

A variável de ação  $J$  é dada por ([z.1] ; vide Apêndice Z)

$$\begin{aligned} J &= (1/2\pi) \oint p dx = (1/\pi) \int_e^f dx [2m(f^2 - x^2)(x^2 - e^2)]^{1/2} \\ &= 2(2m)^{1/2} f [kE(\kappa)/4 - e^2 K(\kappa)]/(3\pi), \quad (Z.3) \end{aligned}$$

onde  $\kappa^2 = (f^2 - e^2)/f^2$ ,  $K(\kappa)$  e  $E(\kappa)$  são as integrais elípticas de primeira e segunda espécie, respectivamente. Em princípio a Eq.(Z.3) poderia ser revertida para obter  $E_0$  como função de  $J$ ,  $E_0 = E_0(J)$ , entretanto, isso é

impraticável. Porém, caso haja interesse, essa dependência pode ser determinada numericamente.

Não podemos escrever explicitamente a energia  $E_0$  como uma função de  $J$  mas, podemos obter a derivada da energia em relação a  $J$  e, portanto, obter a *variável angular*  $\Theta$  [z.1] :

$$d\Theta/dt = \partial E_0/\partial J = (\partial E_0/\partial \kappa^2)(\partial \kappa^2/\partial J) = (2/m)^{1/2} f\pi/K(\kappa) ,$$

ou seja,

$$\Theta(t) = (2/m)^{1/2} f\pi t /K(\kappa) + \Theta(0), \quad (Z.4)$$

onde  $\Theta(0)$  é o ângulo inicial que suporemos igual a zero.

A transformação canônica de  $(p,x)$  para  $(J,\Theta)$  [z.1] é obtida a partir da integração da relação  $p = m(dx/dt)$  dada pela Eq.(Z.2):

$$\int_x^f dx /[(f^2-x^2)(x^2-e^2)]^{1/2} = (2/m)^{1/2} \int_0^t dt = (2/m)^{1/2} t = K(\kappa)\Theta/f\pi . \quad (Z.5)$$

Desta equação deduzimos,

$$x = f \operatorname{dn}(\pm f(2/m)^{1/2} t, \kappa) = f \operatorname{dn}(\pm K(\kappa)\Theta/\pi, \kappa) . \quad (Z.6)$$

Substituindo a Eq.(Z.6) na Eq.(Z.2) ficamos com,

$$p = \pm (2m)^{1/2} f^2 \kappa^2 \operatorname{sn}(K(\kappa)\Theta/\pi, \kappa) \operatorname{cn}(K(\kappa)\Theta/\pi, \kappa). \quad (Z.7)$$

Nas Eqs.(Z.6) e (Z.7) as funções  $\operatorname{dn}$ ,  $\operatorname{sn}$  e  $\operatorname{cn}$  são as funções elípticas de Jacobi [z.2]. Com essas funções  $p$  e  $x$ , dadas pelas Eqs.(Z.6) e (Z.7), respectivamente, podemos construir as trajetórias da partícula no espaço de fase  $(p,x)$  no caso  $E_0 < 0$ , **conhecendo os valores de  $(J,\Theta)$** , conforme figura a ser vista no próximo parágrafo.

### (B) Partícula não-aprisionada ( $E_0 > 0$ ).

Quando  $E_0 > 0$  o momento  $p$  da partícula não-aprisionada fica dada por

$$p = \pm [2m(E_0 + kx^2/2 - x^4)]^{1/2} = \pm [2m(h^2 - x^2)(x^2 + g^2)]^{1/2} , \quad (Z.8)$$

onde  $h^2 = k/4 + (k^2/16 + E_0)^{1/2}$  e  $g^2 = -k/4 + (k^2/16 + E_0)^{1/2}$ .

Os pontos de inversão do movimento são agora dados por  $x_{\pm} = h_{\pm}$  e a ação  $J$  dada por:

$$J = (1/2\pi) \oint p dx = (1/\pi) \int_{-h}^h dx [2m(f^2 - x^2)(x^2 - e^2)]^{1/2} =$$

$$= 2(2m)^{1/2} (h/\kappa)^3 \{ \kappa'^2 (K(\kappa) - E(\kappa)) - \kappa^2 K(\kappa) \} / 3\pi, \quad (\text{Z.9})$$

onde  $\kappa'^2 = 1 - \kappa^2$  e o módulo,  $\kappa$ , é definido por  $\kappa^2 = h^2 / (h^2 + g^2)$ .

Usando um procedimento semelhante ao adotado nas Eqs.(Z.4)-(Z.7) obtemos,

$$x = h \operatorname{cn}(2K(\kappa)\Theta/\pi, \kappa), \quad (\text{Z.10})$$

$$p = \pm (2m)^{1/2} (h^2/\kappa) \operatorname{sn}(2K(\kappa)\Theta/\pi, \kappa) \operatorname{dn}(K(\kappa)\Theta/\pi, \kappa).$$

Na Fig.(Z.2) vemos o gráfico de  $p(x)$  em função de  $x$  para casos com  $E_0 < 0$ ,  $E_0 = 0$  e  $E_0 > 0$ .

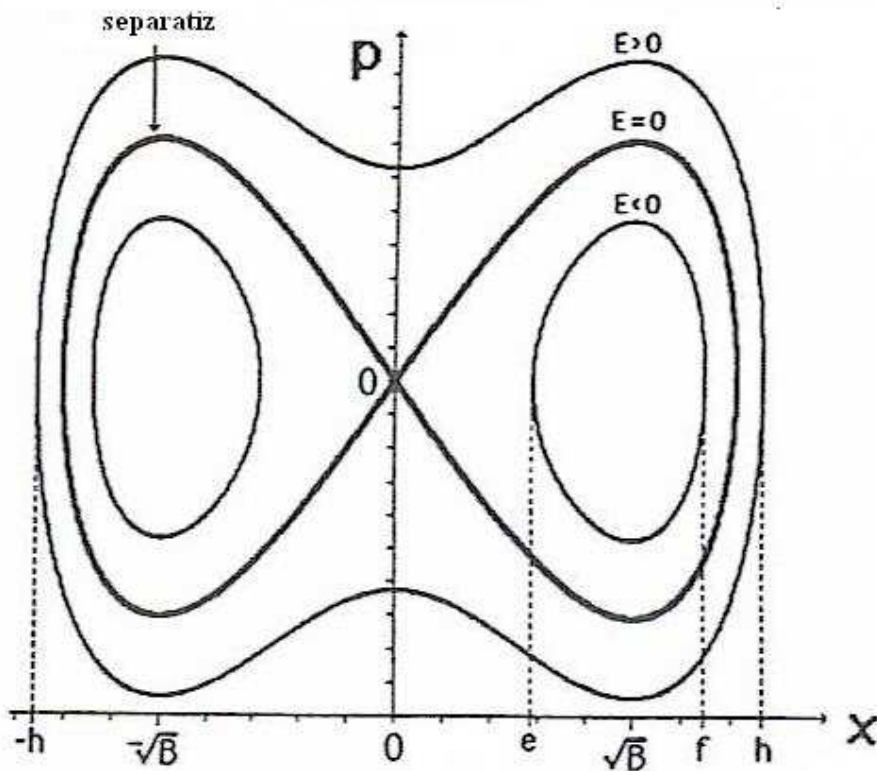


Fig.(Z.2). Gráfico do *espaço de fase*  $(p,x)$  de um sistema com poço duplo de potencial anarmônico (*poço quártico duplo*) no caso integrável  $\varepsilon = 0$  para  $E_0 < 0$ ,  $E_0 = 0$  e  $E_0 > 0$ . A curva com  $E_0 = 0$  é denominada de *separatriz* e  $B^2 = k/2$ .

### Caso não integrável $\varepsilon \neq 0$ .

Quando  $\varepsilon \neq 0$  o Hamiltoniano  $H$ , denominado de *Hamiltoniano de Duffing*, é dado por  $H(p,x,t) = H_0 + \varepsilon x \cos(\omega_0 t)$  onde  $H_0 = p^2/2m - kx^2/2 + x^4$ . Nessas condições a Hamiltoniana sendo uma função do tempo ela não é constante;  $E_0$  e  $J$  não são constantes do movimento. Como neste caso o sistema é não integrável temos de resolver numericamente as equações de Hamilton:

$$dx/dt = \partial H/\partial p \quad e \quad dp/dt = -\partial H/\partial x, \quad (Z.11)$$

Usando as variáveis canônicas  $(J, \Theta)$  e escrevendo  $H = H(J, \Theta, t)$  temos as seguintes equações para integrar ao invés das Eqs.(Z.1):

$$dJ/dt = \partial H/\partial \Theta \quad e \quad d\Theta/dt = -\partial H/\partial J, \quad (Z.12)$$

lembrando que como agora a Hamiltoniana é uma função do tempo,  $E_0$  e  $J$  não são mais constantes do movimento como tínhamos no caso de  $\varepsilon = 0$ . Notemos que  $H(J, \Theta, t)$  é obtida a partir de  $H(p, x, t)$  colocando as variáveis  $p$  e  $x$  como funções de  $J$  e  $\Theta$ , conforme Eqs.(Z.10).

Resolvendo numericamente as Eqs.(Z.12) determinamos  $J(t)$  e  $\Theta(t)$ ; substituindo  $J$  e  $\Theta$  nas Eqs.(Z.10) obtém-se as variáveis  $x$  e  $p$  com as quais se constrói os espaços de fase  $(p, x)$  mostrados nas Figs.(Z.1)-(Z.3) (vide Reichl e Zheng [z.1]). Para obter essas figuras, esses autores assumiram que  $\omega_0 = 1.92$  e que a partícula estava inicialmente dentro do poço direito com  $x_0 = x(t=0) = 0.24$ ,  $p_0 = p(t=0) = 0$  e energia  $E_0 = -0.112$ . Os cálculos numéricos são feitos para tempos discretizados  $t_k = 2\pi k / \omega_0$  onde  $k = 0, 1, 2, \dots$ . Notemos que o primeiro ponto  $(x_1, p_1)$  a ser graficado é obtido através da integração numérica usando a condição inicial  $(x_0, p_0)$ ; o segundo ponto  $(x_2, p_2)$  é obtido usando  $(x_1, p_1)$  como condição inicial e assim, sucessivamente.

O nome *gráfico* ou *mapa estroboscópico* vem do fato de se observar o sistema em instantes discretos  $t_k$ . Notemos que esse mapa corresponde a um *mapa de Poincaré*.

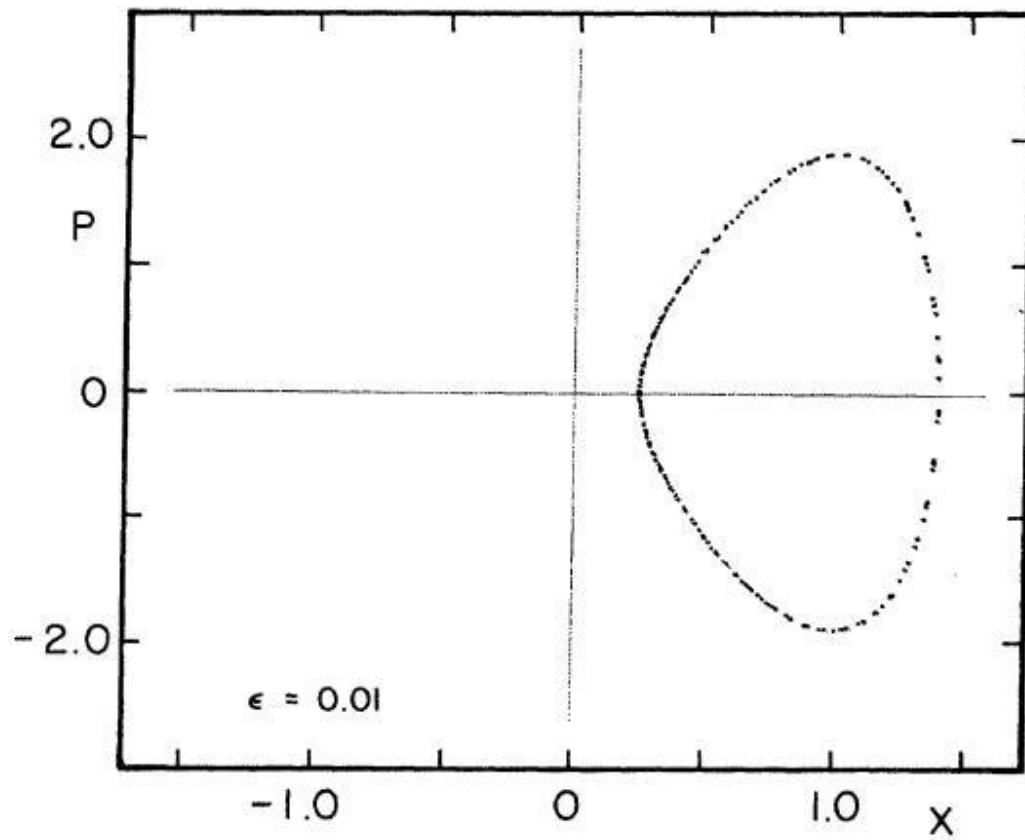


Fig.(Z.3). Gráfico estroboscópico no espaço de fase  $(p,x)$  para  $\epsilon = 0.01$ . Vemos pontos distribuídos nas vizinhanças da trajetória da partícula confinada no poço direito mostrada na Fig.(Z.1.2).

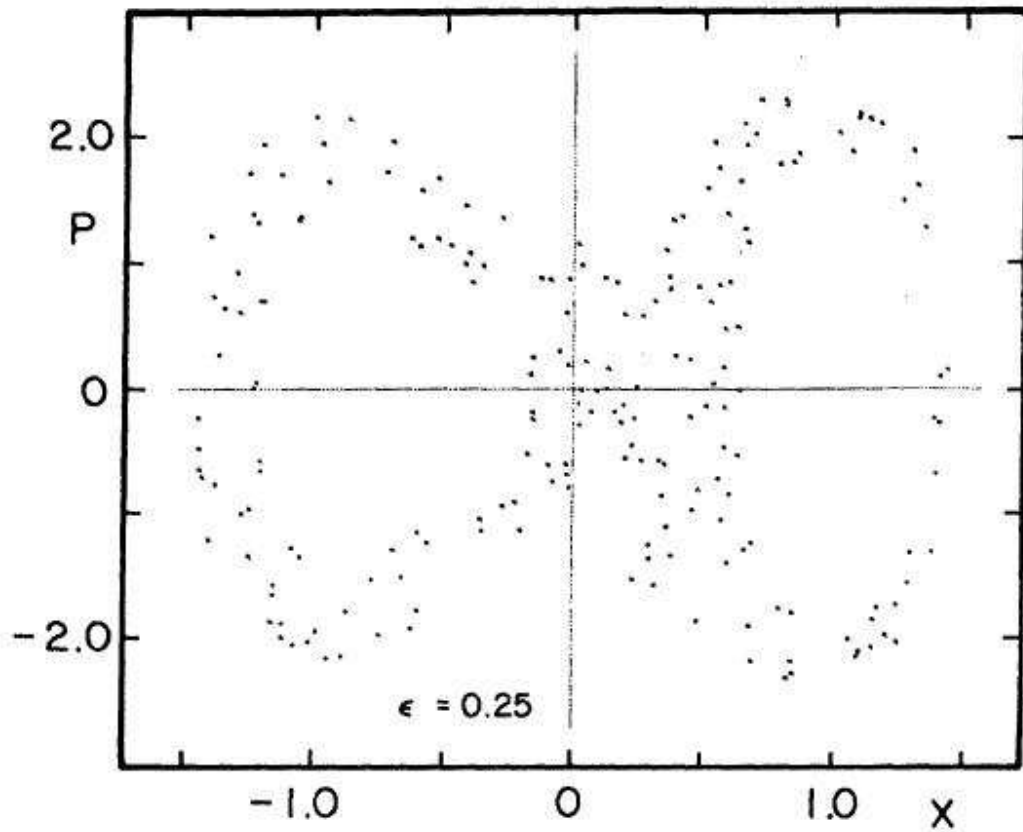


Fig.(Z.4). Gráfico estroboscópico no espaço de fase  $(p,x)$  para  $\epsilon = 0.25$ . A partícula oscila entre os dois poços passando por pontos distribuídos nas vizinhanças da separatriz.

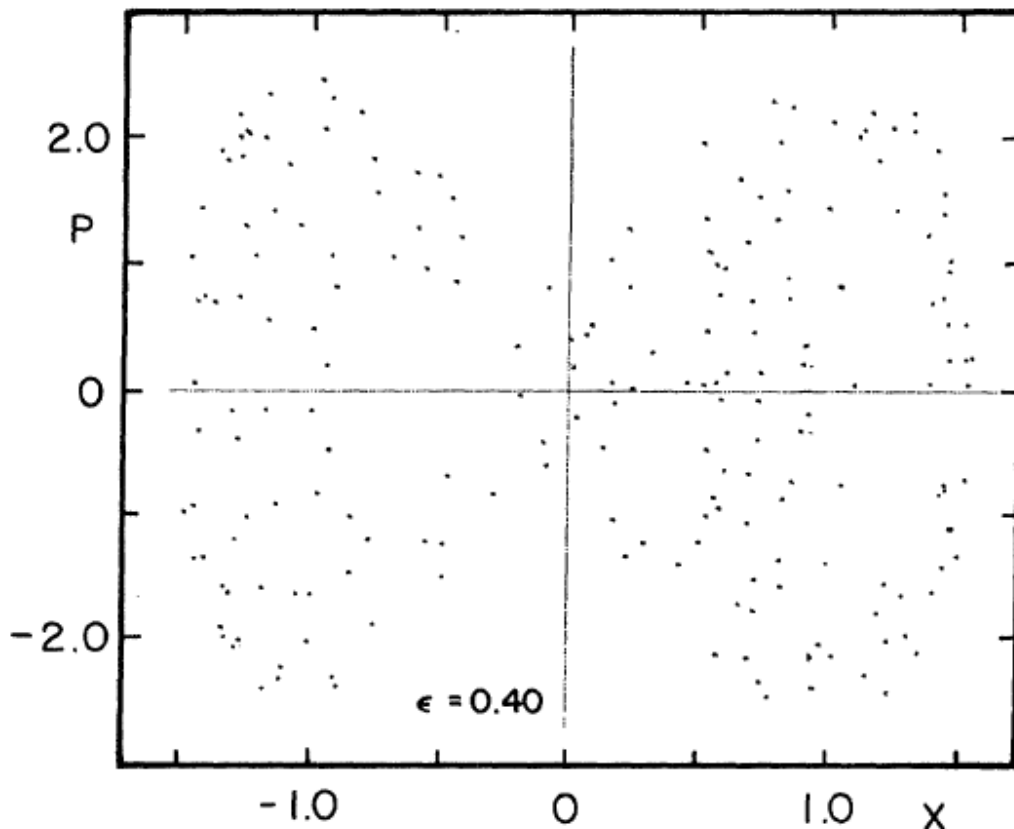


Fig.(Z.5). Gráfico estroboscópico no espaço de fase (p,x) para  $\epsilon = 0.40$ . A partícula agora passa por pontos muito dispersos entre os dois poços.

Notemos que como  $\epsilon \neq 0$  a energia não perturbada  $E_0$  depende do tempo e oscila caoticamente. Ao invés das antigas trajetórias bem definidas que existiam no caso  $\epsilon = 0$  temos agora uma distribuição de pontos mostrando órbitas caóticas. Quando maior  $\epsilon$  mais difusamente estão distribuídos os pontos no espaço (p,x), ou seja, maior é o caos. Isto pode ser visto nas Figs.(Z.3)-(Z.5) onde temos  $\epsilon = 0.01$ ,  $\epsilon = 0.25$  e  $\epsilon = 0.40$ , respectivamente.

Conforme vemos na Fig.(Z.3), quando  $\epsilon = 0.01$  é muito pequeno o campo externo tem um efeito muito pequeno sobre a partícula: ela oscila dentro do poço direito seguindo aproximadamente a trajetória não-caótica vista na Fig.(Z.2). Ela não escapa do poço direito. Quando a perturbação é relativamente grande, ou seja,  $\epsilon = 0.25$  e  $\epsilon = 0.40$ , a partícula escapa do poço direito, circulando pelos dois poços.



### **Equação de Duffing.**

Vejam agora como determinar o movimento de uma partícula submetida a um *potencial quártico duplo*  $V(x) = -kx^2/2 + x^4$ , a uma força harmônica  $\varepsilon \cos(\omega_0 t)$  e a uma força dissipativa  $-\beta(dx/dt) = -\beta v$ .

Optamos por analisar esse processo dissipativo pelo fato dele não poder ser descrito por um formalismo hamiltoniano como vimos acima no caso da hamiltoniana conservativa de Duffing.

Assim, devido ao termo  $-\beta v$  o estudo do movimento é feito diretamente a partir da equação de Newton que é dada por

$$m (d^2x/dt^2) = kx - 3x^3 - \beta(dx/dt) + \varepsilon \cos(\omega_0 t),$$

ou ainda,

(Z.13)

$$d^2x/dt^2 + ax + bx^3 + c(dx/dt) = d \cos(\omega_0 t),$$

que é denominada de *Equação de Duffing* [z.3].

Para descrever o movimento resolvemos a Eq.(Z.1.13) numericamente levando em conta as condições iniciais  $x(t=0) = x_0$  e  $v(t=0) = v_0$ . As posições  $x(t)$  para os instantes seguintes são calculadas para tempos discretizados  $t_k = 2\pi k / \omega_0$  onde  $k = 0, 1, 2, \dots$ . Desse modo, o primeiro ponto  $(x_1, v_1)$  a ser graficado é obtido através da integração numérica da Eq.(Z.13) usando a condição inicial  $(x_0, v_0)$ ; o segundo ponto  $(x_2, v_2)$  é obtido usando  $(x_1, v_1)$  como condição inicial e assim, sucessivamente. Na Fig.(Z.6) vemos o *mapa estroboscópico* do espaço  $(x, v)$  que foi obtido no caso em que  $\omega_0 = 0,20$ ,  $a = -1/5$ ,  $b = 8/15$ ,  $c = 1/25$  e  $d = 2/5$  (vide referência [z.3]). **É importante observarmos que os pontos mostrados nessa figura são os que foram obtidos após o transiente. Devido ao efeito dissipativo, pontos iniciais escolhidos ao acaso muito longe dos vistos na figura evoluem concentrando-se na região que é mostrada na figura.**

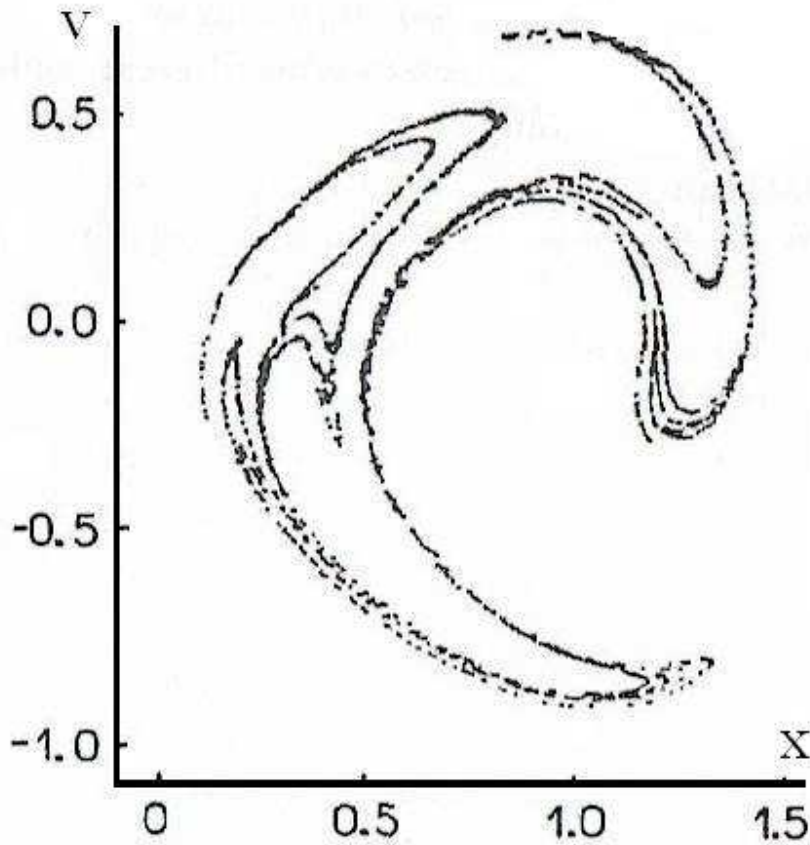


Fig.(Z.6). Mapa estroboscópico da Equação de Duffing com  $\omega_0 = 0,20$ ,  $a = -1/5$ ,  $b = 8/15$ ,  $c = 1/25$  e  $d = 2/5$ .

O mapa visto na Fig.(Z.6) representa um atrator denominado de “atrator estranho” ou “atrator caótico” [z.3]. Segundo a definição de Ruelle e Takens, um atrator é denominado *estranho* quando as linhas de fluxo evoluem por um processo de alongamentos e dobras. Lembramos que [z.3] o *ponto* para o qual convergem as trajetórias no espaço de fase depois de um tempo suficientemente longo é dito um *atrator*. Atratores só são possíveis em sistemas dissipativos. Essas linhas dependem sensitivamente das condições iniciais [z.3]: num atrator estranho pontos inicialmente arbitrariamente próximos estarão macroscopicamente (exponencialmente) separados após um intervalo de tempo suficientemente longo. É evidente a estrutura complexa do atrator. Com efeito, fosse a figura ampliada poder-se-ia perceber que cada uma das “linhas” é na verdade constituída por uma série de sublinhas.

Teoricamente existe uma infinidade de sublinhas. Apenas teoricamente, porque os erros inerentes ao processo de cálculo (por exemplo, ruído ou limitações na precisão do cálculo computacional) acabam por impor limites à visualização dessa estrutura hiper-fina infinita.

A dependência sensitiva às condições ou valores iniciais tem conseqüências práticas. Uma vez que pequenos desvios nas condições iniciais estão sempre presentes, seja devido a imprecisões inerentes ou pela existência de ruído experimental, a posição de uma trajetória dentro do atrator estranho não é previsível de maneira trivial. Com efeito, sistemas que exibem atratores estranhos podem apresentar oscilações irregulares ou *caóticas*. É importante enfatizarmos que o comportamento caótico observado resulta da própria dinâmica (determinística) do sistema, não sendo produzido por perturbações de natureza estocástica.

### **REFERÊNCIAS(Z)**

- [z.1] L.E. Reichl. “The Transition to Chaos”, Springer-Verlag (1987).
- L.E.Reichl and W.M.Zheng, Phys.Rev.A29(1984).
- [z.2] P.F.Byrd and M.D. Friedman. “Handbook of Elliptic Integrals for Engineers and Scientists”, Springer-Verlag(1971).
- [z.3] “Caos, uma Introdução”, N.F.Ferrara e C.P.C.do Prado. Editora Edgard Blücher (1994).

