



UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA
INSTITUTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Vinícius Mendonça Conceição

**Caos em Sistemas de Espalhamento
Átomo-Superfície via Dimensão de Incerteza e
“Smaller Alignment Index”**

Salvador

2015

Vinícius Mendonça Conceição

Caos em Sistemas de Espalhamento Átomo-Superfície via Dimensão de Incerteza e “Smaller Alignment Index”

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física, Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia, como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Física.

Universidade Federal da Bahia – UFBA

Instituto de Física

Programa de Pós-Graduação em Física

Orientador: Prof. Dr. Thiago Albuquerque de Assis

Salvador

2015

Vinícius Mendonça Conceição

Caos em Sistemas de Espalhamento Átomo-Superfície via Dimensão de Incerteza e “Smaller Alignment Index”

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física, Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia, como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Física.

Aprovado em 13 de Agosto de 2015:

Prof. Dr. Thiago Albuquerque de Assis

Orientador – Universidade Federal da Bahia/UFBA

Prof. Dr. Roberto Fernandes Silva Andrade

Convidado 1 – Universidade Federal da Bahia/UFBA

Prof. Dr. Bismarck Vaz da Costa

Convidado 2 – Universidade Federal de Minas Gerais/UFMG

Salvador

*Dedico esta dissertação, especialmente a meus pais Sergio e Edinalva, e aos meus irmãos
Anderson e Viviane.*

Agradecimentos

Eis que chego ao texto mais complicado desta dissertação, os agradecimentos. Muitas são as pessoas, entre colegas, amigos e familiares, que tenho a agradecer por todo apoio oferecido, porém essa seria uma tarefa árdua, pois demandaria diversas páginas, tomando um bom espaço desta dissertação. Então, peço de antemão desculpas caso, eu esqueça de citar alguém. Mas, vamos lá.... Inicialmente, devo agradecer aos meus familiares, em especial, aos meus pais Sergio e Edinalva, a minha tia Tete, e aos meus irmãos, Anderson e Viviane, pois mesmo que distantes, sempre estiveram presentes me apoiando e incentivando durante os diversos momentos desse mestrado. Não poderia deixar de agradecer também aos meus tios Ronaldo (“In Memoriam”) e Teresa, e além claro, do meu primo Rodrigo, que me acolheram e ofereceram todo o suporte nesta cidade até então para mim desconhecida. Em especial, dedico também esta dissertação ao Ronaldo, que apesar de não estar mais entre nós, ficaria feliz com o término desse trabalho. Agradeço a todos os amigos que fiz na Pós-graduação do IF, em especial, ao seu Antônio, Lafa, Iuri, Wallas, Marcelo, Sergio Floquet, Tenilsson, Willian, Miralvo, Caio Porto, Elenilson, Caio Guimarães, Roni, Mariana, Rosana, Ariadne, Maroivo, Alessandro, Harlison, Vinícius (mestre) e Eric. Deixo aqui uma frase bastante construtiva de autoria do jovem Wallas, “Essa é a minha galera.” Agradeço também ao mestre e Eric, pelas correções sugeridas em minha dissertação e desculpe pelos transtornos e pelo tempo gasto durante esse processo, haha.... Dedico também esses agradecimentos a todos os amigos que fiz em Salvador, em especial, a Élide e a Rebeca. Além disso, não devo esquecer de agradecer aos amigos que sempre me apoiaram, mesmo distantes, no decorrer deste árduo trabalho, em especial, ao Bruno, a Ana, a Sheila, ao Coutinho, ao Raphael (Arapiraca), ao Adriano, ao Jonathas, a Liz, a Stephanie, a Isabelle e a Andressa. Para finalizar, agradeço à Pós-graduação do IF, ao grupo de pesquisa Gsuma, ao meu orientador Thiago pelo apoio dado na realização deste trabalho de pesquisa e a CAPES pelo apoio financeiro.

Resumo

Neste trabalho, apresenta-se a caracterização da dinâmica clássica do espalhamento átomo-superfície com dois graus de liberdade através da aplicação do método da dimensão de incerteza e das medidas do *Smaller Alignment Index (SALI)*. São estudadas as colisões elásticas entre os átomos de hélio e as superfícies de cobre [$Cu(11x)$], considerando-se diferentes índices de Miller ($x = 0, 3, 5, 7$). Quando considerado o regime caótico do espalhamento, são observadas singularidades sobre a função de espalhamento (função esta que relaciona as variáveis de saída com respeito às variáveis de entrada). Para a caracterização das regiões da função de espalhamento que exibem singularidades, foi utilizado o método da dimensão de incerteza. Neste caso, demonstra-se que, quando consideradas as superfícies menos vicinais (ou seja, para $x = 0, 3$), as medidas das dimensões de incerteza exibem valores que se aproximam da unidade caracterizando, portanto, um espalhamento caótico não hiperbólico em que se observa a presença de toros “Kolmogorov-Arnold-Moser” (KAM) no espaço de fases. Para as dinâmicas hiperbólicas e não hiperbólicas foi considerada a medida do *SALI*. Para as dinâmicas hiperbólicas, os resultados claramente indicam um decaimento exponencial para a evolução temporal do *SALI* de trajetórias aprisionadas por curtos intervalos de tempo. Este mesmo decaimento pôde ser observado para as dinâmicas não hiperbólicas. Contudo, quando consideradas as trajetórias que permanecem aprisionadas por longos intervalos de tempo, estas inclinações são comparativamente menores e podem mudar no tempo, indicando a presença de toros KAM no espaço de fases.

Palavras-chaves: Sistemas hamiltonianos. Espalhamento classicamente caótico. Indicador de caos.

Abstract

At this present work, we have shown the characterization of the classical dynamics scattering atom-surface with two degrees freedom using the uncertainty dimension method and the Smaller Alignment Index's (*SALI*) measure. We have studied the elastic collisions between helium atom and a copper surface [*Cu*(11*x*)], considering different Miller's index ($x = 0, 3, 5, 7$). When considering the chaotic scattering regime, are observed singularities on the corresponding scattering function (function that relates the output and input variables). For the characterization of the regions of scattering function exhibiting singularities, it was used the uncertainty dimension measurements. In that case, it was demonstrated that considering less vicinal surfaces (i.e. for $x = 0, 3$), the uncertainty dimension exhibit values close to the unity, suggesting a non-hyperbolic chaotic scattering characterized by the existence of Kolmogorov-Arnold-Moser's torus in the phase space. *SALI*'s has been measured considering both hyperbolic and non-hyperbolic dynamics. For hyperbolic dynamics, the results clearly indicated an exponential decay of the *SALI* as a function of the time. This decay has been also observed for the non hyperbolic dynamics. However, as considering trapped trajectories time intervals, these slopes are comparatively smaller and may change in the time, suggesting the presence of KAM's torus in the phase space.

Keywords: Hamiltonian systems. Classical chaotic scattering. Chaos indicator.

Sumário

| | | |
|------------|--|-----------|
| 1 | INTRODUÇÃO | 1 |
| 2 | ASPECTOS GERAIS DOS SISTEMAS DINÂMICOS CONSERVATIVOS | 6 |
| 2.1 | A Formulação Hamiltoniana | 6 |
| 2.1.1 | Notação Simplética | 10 |
| 2.2 | Espaço de Fases e Superfície de Energia | 11 |
| 2.2.1 | Oscilador Harmônico Bidimensional | 13 |
| 2.2.2 | Seção de Poincaré | 14 |
| 2.3 | Transformações Canônicas | 17 |
| 2.4 | Teoria de Hamilton-Jacobi | 20 |
| 2.5 | Estabilidade em Pontos de Equilíbrio e Órbitas Periódicas | 23 |
| 2.6 | Noção de Integrabilidade | 28 |
| 2.7 | Perturbação de Sistemas Integráveis | 30 |
| 2.7.1 | O Teorema KAM | 30 |
| 2.7.2 | Teorema de Poincaré-Birkhoff | 36 |
| 2.8 | Emaranhamento Homoclínico | 40 |
| 3 | ESPALHAMENTO CLASSICAMENTE CAÓTICO | 43 |
| 3.1 | O Caos Transiente | 43 |
| 3.2 | Caracterização do Caos Transiente | 49 |
| 3.2.1 | Taxa de Escape | 49 |
| 3.2.2 | Expoentes de Lyapunov | 50 |
| 3.2.3 | Dimensão Fractal | 52 |
| 3.3 | Aspectos do Espalhamento Classicamente Caótico | 54 |
| 3.3.1 | Regimes para o Espalhamento | 55 |
| 3.3.2 | Ocorrência do Espalhamento Caótico | 56 |
| 3.3.3 | Espalhamento Átomo-Superfície Metálica (hélio-cobre) | 56 |
| 3.4 | Indicadores de Caos | 66 |
| 3.5 | Método da Dimensão de Incerteza | 67 |
| 3.6 | Método do “Smaller Alignment Index” (<i>SALI</i>) | 68 |
| 4 | RESULTADOS E DISCUSSÕES | 70 |
| 4.1 | Funções Espalhamento e Espaço de Fases para o Sistema de Espalhamento Hélio-Cobre | 70 |

| | | |
|-------|---|------------|
| 4.2 | Aplicação do Método de Dimensão de Incerteza no Sistema de Espalhamento Hélio-Cobre | 74 |
| 4.3 | Aplicação do <i>SALI</i> no Sistema de Espalhamento Hélio-Cobre | 87 |
| 4.3.1 | Aplicação do <i>SALI</i> nas Dinâmicas de Espalhamento sobre as Superfícies Espalhadoras <i>Cu</i> (110) e <i>Cu</i> (113) | 93 |
| 4.3.2 | Análise das Trajetórias Regulares nas Dinâmicas de Espalhamento sobre as Superfícies Espalhadoras <i>Cu</i> (110) e <i>Cu</i> (113) | 108 |
| 4.3.3 | Aplicação do <i>SALI</i> nas Dinâmicas de Espalhamento sobre as Superfícies Espalhadoras <i>Cu</i> (115) e <i>Cu</i> (117) | 110 |
| 5 | CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS | 115 |
| | A – EQUAÇÃO DE MOVIMENTO PARA O PAR DE VETORES DESVIO | 119 |
| | REFERÊNCIAS | 122 |

1 Introdução

O fenômeno do espalhamento pode ser analisado através de uma função que relaciona as variáveis de saída, que caracterizam o estado final do sistema, com as variáveis de entrada, que caracterizam as condições iniciais do sistema [1]. Esta função é denominada função de espalhamento. Na figura 1 é exemplificado o fenômeno do espalhamento, em que considera-se uma partícula arbitrária (que pode ser, por exemplo, um átomo ou uma molécula), cuja condição inicial é caracterizada através das variáveis de entrada, incidindo em uma região denominada de região de espalhamento, ou também denominada região de interação. Eventualmente, após um determinado intervalo de tempo interagindo na região de espalhamento, é definida a saída da partícula e caracterizado o seu ângulo final, ou o ângulo de saída θ_f .

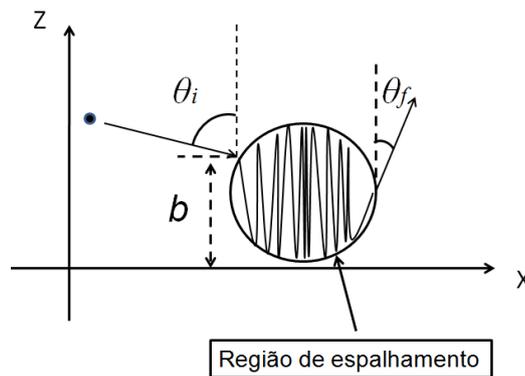


Figura 1: Figura ilustrativa para uma partícula arbitrária com variáveis de entrada b (o parâmetro de impacto) e θ_i (o ângulo de incidência), incidindo sobre a região de espalhamento. É possível observar também o ângulo de saída θ_f .

Para dinâmicas regulares no fenômeno do espalhamento, a função de espalhamento é tipicamente suave e contínua. No entanto, para as dinâmicas caóticas é observado o surgimento de singularidades que formam um conjunto fractal na função de espalhamento [2] [3]. Quando considerada uma condição inicial arbitrária associada a uma singularidade na função de espalhamento, pequenas alterações nas variáveis de entrada podem levar a mudanças significativas nas variáveis de saída. Com isso, quantidades físicas mensuráveis (como o tempo de saída das partículas da região de interação) podem atingir valores infinitos. Portanto, esse comportamento pode estar associado a sensibilidade às condições iniciais [4].

Um aspecto observado nos sistemas de espalhamento classicamente caótico, refere-se à classificação do regime associado ao espalhamento. Nesse caso, são verificados dois regimes: hiperbólico e não hiperbólico. No regime não hiperbólico é observada a presença

de toros no espaço de fases, o que implica, em geral, em uma taxa de permanência (ou sobrevivência) para as partículas na região de espalhamento que decai algebricamente, ou em lei de potência, com o decorrer do tempo [5]. Em contrapartida, o espaço de fases para o regime hiperbólico é “completamente caótico”, caracterizando-se assim a ausência dos toros e um decaimento exponencial na taxa de sobrevivência das partículas [6].

Outro aspecto observado no espalhamento classicamente caótico, refere-se à associação entre a dimensão fractal calculada para a região de singularidades e o regime do espalhamento. Foi conjecturado por Lau *et al.* [7] uma associação entre o regime não hiperbólico do espalhamento e o valor exibido pela dimensão fractal próximo da unidade. Tal tendência contrasta com o regime hiperbólico em que a dimensão fractal apresenta valores tipicamente entre 0 e 1.

O fenômeno do espalhamento classicamente caótico pode ser observado nos mais distintos campos da física:

(1) na astronomia, Poincaré [8] previu a existência de trajetórias caóticas para a dinâmica entre dois corpos de massas m_1 e m_2 , movendo-se ao redor de um corpo de massa M , tal que $m_1, m_2 \ll M$;

(2) na dinâmica de reações químicas, uma assinatura visível do caos clássico no espalhamento é o comportamento descontínuo das funções de espalhamento, observado por Wolken [9] em seu estudo de colisões entre moléculas diatômicas sobre uma superfície;

(3) a dimensão fractal em sistema ópticos pôde ser analisada a partir das observações dos padrões fractais presentes no espalhamento caótico de luz por estruturas poliédricas de espelhos esféricos nos trabalhos realizados por Amano *et al.* [10] e Sweet *et al.* [11]. Nesse caso, ao injetar um feixe de luz na região de interação, são observados os padrões fractais no espalhamento do feixe, que apresentam as propriedades de bacia Wada¹ [12] [13];

(4) na física atômica e molecular, as dinâmicas caóticas para o espalhamento foram inicialmente observadas em meados da década de 70 por Rankin e Miller [14], a partir da descrição teórica de reações químicas simples. Posteriormente, Eckhardt e Jung [15] publicaram trabalhos envolvendo sistemas de espalhamento classicamente caóticos, demonstrando a presença de dinâmicas caóticas. A presença do caos também foi relatada no trabalho realizado por Davis e Gray [16], quando consideradas as dinâmicas clássicas de reações unimoleculares, e no trabalho realizado por Noid *et al.* [17], ao detectar o comportamento fractal no sistema de espalhamento entre átomos de hélio e uma superfície formada por moléculas de I_2 .

¹ O termo “Wada” foi introduzido pelo topologista Kunizo Yoneyama após estender a notação de regiões para conjuntos abertos, atribuindo o exemplo a seu professor Takeo Wada: “Lakes of Wada”. Na matemática, “Lakes of Wada” são três conjuntos abertos disjuntos conectados no plano com a propriedade contra-intuitiva de que todos eles têm a mesma fronteira.

Ainda enfatizando-se o campo da física atômica e molecular, o espalhamento de átomos sobre superfícies metálicas é uma ferramenta experimental que permite a obtenção de informações estruturais da superfície do material analisado. O uso desta técnica é largamente utilizada em diversos trabalhos. Por exemplo, pode-se citar o trabalho realizado por Gorse *et al.* [18], o qual considerou-se o estudo sistemático das colisões elásticas entre átomos de hélio e uma superfície de cobre irregular (ou, enrugada)^{2 3 4}. Ainda considerando-se o sistema hélio-cobre, foi observado por Borondo *et al.* [19] a presença de singularidades que formam uma estrutura fractal e que são exibidas sobre a função de espalhamento. Nesse trabalho, em especial, as propriedades do sistema de espalhamento, como a presença de órbitas periódicas instáveis e a presença de selas caóticas com as suas variedades instáveis e estáveis, foram determinadas com o uso do método da seção de Poincaré. Outro aspecto observado com a seção de Poincaré é a presença de dois regimes para o espalhamento caótico: i) um regime não hiperbólico, este, por sua vez, associado ao espalhamento sobre as superfícies com índices de Miller $x = 0, 3$; ii) um regime hiperbólico, que é associado ao espalhamento sobre superfícies espalhadoras com índices de Miller $x = 5, 7$.

Além do uso da técnica de espalhamento de átomos de hélio sobre a superfície de cobre, também foram utilizados diferentes materiais para a superfície espalhadora. Neste caso, foram realizados trabalhos com as superfícies de níquel $Ni(110)$ [20] e de paládio $Pd(110)$ [21].

Um fato de bastante relevância em sistemas dinâmicos que exibem espalhamento caótico é a caracterização do comportamento das dinâmicas regulares e caóticas. Faz-se então necessário o uso de medidas (ou indicadores) que forneçam informações sobre o comportamento da dinâmica das trajetórias, bem como o comportamento da dinâmica do sistema como um todo. Neste caso, toma-se como exemplo a aplicação do método da seção de Poincaré, o expoente de Lyapunov, o método da dimensão de incerteza e a dinâmica simbólica.

No entanto, apesar da vasta disponibilidade de indicadores de caos, muitos desses indicadores apresentam limitações na detecção do caos em sistemas dinâmicos. Por exemplo, o método da seção de Poincaré limita-se a detecção de caos em sistemas dinâmicos com até dois graus de liberdade. O expoente de Lyapunov é usado na detecção de dinâ-

² Para definir a irregularidade da superfície foram considerados distintos índices de Miller $Cu(11x)$, com $x = 0, 3, 5, 7$.

³ O índice de Miller é uma notação utilizada na cristalografia para definir uma família de planos em uma rede de Bravais. Assim, são indicadas as coordenadas de um vetor no espaço recíproco, que é normal à família de planos. Em três dimensões, os índices são representados por $(h k l)$, em que h , k e l são números inteiros com maior divisor comum igual a 1. Neste trabalho, utilizou-se o índice x , na superfície $Cu(11x)$, para indicar o termo denotado pela letra l da notação usual dos índices de Miller.

⁴ Neste caso, as distintas superfícies de cobre são obtidas a partir de cortes em um cristal de cobre ao longo do plano paralelo à direção (110) , formando ângulos de 25.24° , 15.79° e 11.42° , com o plano (100) , respectivamente para as faces cristalográficas $Cu(113)$, $Cu(115)$ e $Cu(117)$.

micas caóticas, quando considerados longos intervalos de tempo, não sendo aplicável em sistemas dinâmicos que exibem caos transiente, como, por exemplo, os sistemas dinâmicos que exibem espalhamento caótico. Logo, com o objetivo de suprir tais limitações, foi sugerido neste trabalho a utilização do “Smaller Alignment Index” (*SALI*) em sistemas de espalhamento classicamente caóticos. Como proposto por Skokos [22], o uso deste indicador em sistemas dinâmicos se apresenta como um método capaz de caracterizar dinâmicas caóticas ou regulares, independente da dimensão apresentada no espaço de fases.

Neste trabalho, através de simulações numéricas, analisamos as colisões elásticas do espalhamento classicamente caótico entre átomos de hélio e uma superfície de cobre enrugada, com dois graus de liberdade, a partir do método da dimensão de incerteza e do *SALI*. Nesse caso, em cada uma das colisões, foram considerados os seguintes parâmetros ou variáveis de entrada: os índices de Miller ($x = 0, 3, 5, 7$) para a superfície espalhadora, a energia de incidência para os átomos fixada em 21 e 63 meV, os parâmetros de impacto, normalizados, escolhidos no intervalo $0 \leq b \leq 1$ e o ângulo de incidência fixado em 89.999° .

Em um primeiro momento, a fim de se verificar a estrutura do espaço de fases destes sistemas dinâmicos, foi revisitada a aplicação do método da seção de Poincaré. Ademais, com o objetivo de visualizar as regiões de singularidades, foram construídas as funções de espalhamento correspondentes as dinâmicas de espalhamento sobre as distintas superfícies espalhadoras (ou as faces cristalográficas), sendo estas: a função deflexão $\theta(b)$ e a função tempo de atraso $T(b)$.

As regiões de singularidades que surgem na função de espalhamento foram então caracterizadas a partir do método da dimensão de incerteza [7]. Demonstrou-se, assim, uma relação entre o valor da dimensão de incerteza e o regime observado para a dinâmica do espalhamento, que, para o regime hiperbólico, aproxima-se da unidade.

Finalmente, foi sugerida a aplicação do *SALI* como um método alternativo na caracterização do comportamento caótico das trajetórias. Deve-se enfatizar, porém, que a caracterização das dinâmicas do espalhamento caótico neste trabalho está centrada em sistemas dinâmicos com dois graus de liberdade. O intuito da seguinte análise é a viabilização do método de *SALI*, em conjunto com o método da dimensão de incerteza, na caracterização de dinâmicas caóticas em sistemas dinâmicos com mais de dois graus de liberdade no espaço de fases que apresentam espalhamento classicamente caótico.

Além da introdução, esta dissertação é composta de três capítulos e um apêndice, que estão dispostos do seguinte forma: no **capítulo 2**, é apresentada uma breve introdução sobre os aspectos e propriedades dos sistemas hamiltonianos, descrevendo-os através da formulação hamiltoniana. Ademais, são apresentados a notação simplética, a construção do mapa de Poincaré, a estabilidade de órbitas periódicas e a noção de integrabilidade, em que será explicitado o teorema Kolmogorov-Arnold-Moser (KAM). Posteriormente, revisitando a ideia do mapa de Poincaré, será discutido o teorema de Poincaré-Birkhoff

(PB) e o emaranhamento homoclínico; no **capítulo 3**, é apresentado o fenômeno do espalhamento classicamente caótico, que com auxílio de exemplos simples (o espalhamento de partículas no interior de uma caixa contendo um disco localizado em seu centro) é demonstrado o comportamento das dinâmicas caóticas e regulares no espalhamento. Com isso, são apresentados métodos que auxiliem na visualização e no estudo do comportamento das dinâmicas do espalhamento, a saber, a taxa de escape, o expoente de Lyapunov (para longos tempos de aprisionamento), a dimensão de incerteza e o método do *SALI*; no **capítulo 4**, são discutidos os resultados obtidos através da aplicação do método da seção de Poincaré, do cálculo da dimensão de incerteza e da aplicação do *SALI* no sistema de espalhamento caótico entre átomos de hélio e a superfície de cobre enrugada; o **capítulo 5**, é dedicado a apresentação das conclusões e perspectivas. Finalmente, no apêndice **A**, são descritas as equações de movimento que definem a evolução temporal do par de vetores desvio utilizados no cálculo do *SALI*.

2 Aspectos Gerais dos Sistemas Dinâmicos Conservativos

Neste capítulo, será apresentada uma importante subclasse de sistemas dinâmicos conservativos, os sistemas hamiltonianos. Essa subclasse de sistema dinâmico, em especial, apresenta propriedades que os diferem de outros sistemas, como, por exemplo, a presença de estruturas não atratoras em seu espaço de fases. Assim, em um primeiro momento, as equações de movimento dos sistemas hamiltonianos são descritas a partir da formulação hamiltoniana. A importância do uso do formalismo hamiltoniano reside no fato de que ele se constitui como um método poderoso na investigação das questões estruturais do sistema. O seu uso também exhibe diversas vantagens, como a unicidade de soluções no espaço de fases, a possibilidade de introduzir as transformações canônicas, o uso da notação simplética e a teoria canônica da perturbação. Ademais, introduz-se a notação simplética, que é uma forma mais elegante e compacta de se escrever as equações de movimento do sistema. Neste caso, será utilizado como exemplo, o estudo de um sistema hamiltoniano simples como o oscilador harmônico com dois graus de liberdade, introduzindo a ideia do método da seção de Poincaré. Posteriormente, serão apresentados alguns conceitos importantes para sistemas hamiltonianos, como a estabilidade de órbitas periódicas e a noção de integrabilidade, em que será discutido o teorema KAM. Finalmente, revisitando a aplicação do mapa de Poincaré em sistemas dinâmicos, serão discutidos o teorema PB e o emaranhamento homoclínico, destacando-se o surgimento de estruturas complexas no espaço de fases, que estão associadas à presença de dinâmicas caóticas. Como base para este capítulo, foram utilizadas as referências [23–28].

2.1 A Formulação Hamiltoniana

A partir da formulação da mecânica desenvolvida por Newton, pode-se dizer que um sistema com n graus de liberdade composto por n partículas com coordenadas x_1, x_2, \dots, x_n , movendo-se sob ação de forças externas, é descrito pelas equações $d\vec{p}_i/dt = \vec{F}_i$, onde a função \vec{F}_i é uma força arbitrária e \vec{p}_i é o momento, com $i = 1, \dots, n$. Se a massa m do corpo se mantém constante, são obtidas n equações diferenciais de primeira ordem para as componentes da velocidade \vec{v}_i , dadas por $d\vec{v}_i/dt = \vec{F}_i/m$; ou ainda podendo ser escrita como uma equação diferencial de segunda ordem para as suas posições x_i , dadas por $d^2\vec{x}_i/dt^2$, com $\vec{v}_i = d\vec{x}_i/dt$. Neste caso, as soluções das $2n$ equações diferenciais determinam completamente a dinâmica do sistema durante a sua evolução temporal. Assim, é preciso especificar as $2n$ condições iniciais para encontrar uma solução única, a saber: as n posições iniciais e as n velocidades iniciais.

Entretanto, a formulação newtoniana não é a mais adequada para a descrição de sistemas dinâmicos, quando nestes sistemas são observados acoplamentos nas equações diferenciais (ou as equações de movimento do sistema), que podem dificultar a sua resolução. A partir daí, Lagrange introduziu outra forma de escrever as equações de movimento do sistema, sem a necessidade do uso de grandezas vetoriais, como, por exemplo, a força. Com isso, foi introduzido um conjunto de coordenadas generalizadas q_i responsáveis por especificar a posição das partículas do sistema. Também foi introduzido as velocidades generalizadas $\dot{q}_i \equiv dq_i/dt$, ou seja, a taxa que define a mudança das coordenadas generalizadas. Assim, Lagrange introduziu a energia cinética $T(\dot{q}_i, q_i)$ e a energia potencial $U(q_i)$ do sistema, relacionando-as da seguinte forma:

$$L(\dot{q}_i, q_i, t) = T(\dot{q}_i, t) - U(q_i, t). \quad (2.1)$$

O sistema é então caracterizado pela função escalar L , que depende das n coordenadas generalizadas q_i , das n velocidades generalizadas \dot{q}_i e do tempo t . Porém, deve-se enfatizar que a dinâmica de Lagrange não constitui uma teoria nova, qualquer que seja o sentido da palavra, pois os resultados obtidos a partir da formulação de Lagrange ou pela formulação de Newton, devem ser os mesmos para qualquer sistema dinâmico, diferindo apenas o método para a obtenção dos resultados. A vantagem no uso da formulação lagrangiana, frente a formulação newtoniana, está no uso de coordenadas generalizadas para a descrição da dinâmica do sistema.

A formulação de Lagrange pode ser obtida a partir de um princípio variacional escrito numa forma integral, denominado como princípio da ação mínima ou também denominado de princípio de Hamilton. O princípio de Hamilton estabelece que para todas as trajetórias $q(t)$ definidas no espaço de configuração de um sistema físico, a trajetória real é aquela em que extremiza a integral da ação S . Assim, dada uma configuração inicial $q_1(t)$ e uma configuração final $q_2(t)$, a trajetória seguida pelo sistema é aquela em que a integral da ação, dada por

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(q_i, \dot{q}_i, t) dt, \quad (2.2)$$

é um mínimo, fixando $q_1(t)$ e $q_2(t)$.

Ainda é possível dizer que a trajetória real seguida pelo sistema tem a ação estacionária. Neste caso, por estacionária, entende-se que a ação não varia em primeira ordem para deformações infinitesimais da trajetória, de modo que

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} L(q_i, \dot{q}_i, t) dt = 0. \quad (2.3)$$

O problema em questão é resumido em obter as equações de movimento $q_i(t)$ para as coordenadas generalizadas e as equações $\dot{q}_i(t)$, estas, por sua vez, caracterizando a ação S . Um método capaz de resolver o problema exposto é o método variacional. Sendo assim, através de sua aplicação na equação (2.3), tem-se que

$$\begin{aligned}\delta S &= \int_{t_1}^{t_2} \delta L(q_i, \dot{q}_i, t) dt \\ &= \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta \dot{q}_i \right) dt = 0\end{aligned}\quad (2.4)$$

em que

$$\delta \dot{q}_i = \delta \left(\frac{dq_i}{dt} \right) = \frac{d}{dt} \delta q_i. \quad (2.5)$$

Substituindo a equação (2.5) na equação (2.4), chega-se a

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{d(\delta q_i)}{dt} \right) dt. \quad (2.6)$$

Dessa forma, utilizando-se do método de integração por partes

$$\int u dv = uv - \int v du \quad (2.7)$$

no segundo termo do lado direito da equação (2.6), em que

$$u = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \text{ e } dv = \frac{d}{dt} \delta q_i dt, \quad (2.8)$$

chega-se a

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} + \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \right) \delta q_i dt = 0. \quad (2.9)$$

Como a variação $\delta q_i(t)$ nos pontos de extremo é nula, o resultado obtido é a equação de Euler-Lagrange

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) = 0. \quad (2.10)$$

As equações de Euler-Lagrange formam, para um sistema com n graus de liberdade, um conjunto de n equações diferenciais ordinárias de segunda ordem no tempo. Assim, a dinâmica do sistema é completamente determinada desde que sejam especificadas as $2n$ condições iniciais, ou seja, os valores de todas as coordenadas generalizadas q_i e das velocidades generalizadas \dot{q}_i num determinado instante t_0 . Neste caso, na formulação

lagrangiana, a dinâmica pode ser representada por uma curva no espaço de configurações, em que as coordenadas generalizadas são q_1, \dots, q_n .

Posteriormente, Hamilton introduziu outra forma de escrever as equações de movimento do sistema, através da formulação hamiltoniana. Esse formalismo é uma reformulação da mecânica clássica que foi elaborado originalmente pelo matemático irlandês William Rowan Hamilton a partir da formulação lagrangiana. No formalismo hamiltoniano, as n equações diferenciais ordinárias de segunda ordem no tempo do formalismo lagrangiano, são substituídas por um conjunto de $2n$ equações diferenciais ordinárias de primeira ordem no tempo para $2n$ variáveis independentes. A partir daí, a dinâmica do sistema é representada pelo movimento de um ponto ao longo de sua trajetória no espaço de fases. Em contraposição, ao espaço de configurações, o qual um ponto define apenas a configuração do sistema, um ponto no espaço de fases determina o estado do sistema. Nesse caso, é especificada a configuração do sistema e a taxa de variação temporal da configuração em um determinado instante (os momentos das partículas).

A função hamiltoniana $H(q, p, t)$ é obtida através de uma transformada de Legendre na função lagrangiana $L(\dot{q}, q, t)$, o qual envolve a substituição das velocidades \dot{q}_i pelos momentos conjugados $p_i = \partial L / \partial \dot{q}_i$, de modo que

$$H(q, p, t) = \sum_i^n p_i \dot{q}_i - L(\dot{q}, q, t). \quad (2.11)$$

A partir da equação (2.11), as equações de movimento de Euler-Lagrange podem ser reescritas em termos de H . Para isso, será calculado o diferencial em ambos os lados da equação (2.11), como também será usada a convenção de soma sobre os índices repetidos (ver referência [26]). Desta forma, obtém-se que

$$\begin{aligned} dH &= \frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial H}{\partial t} dt = \dot{q}_i dp_i + p_i d\dot{q}_i - \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt \\ &= \dot{q}_i dp_i - \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt, \end{aligned} \quad (2.12)$$

com

$$-\frac{\partial L}{\partial q_i} = -\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = -\dot{p}_i. \quad (2.13)$$

Ao igualar os termos em ambos os lados da equação (2.12), são obtidas as equações de Hamilton ou também denominado equações de movimento do sistema

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad (2.14)$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}. \quad (2.15)$$

Assim, a evolução temporal do sistema é completamente descrita se a dependência temporal dos q 's e p 's é conhecida.

Uma importante consequência observada a partir das equações de hamilton é a invariância temporal da hamiltoniana H . Em outras palavras, o valor da hamiltoniana representa uma quantidade conservada. A hamiltoniana é uma constante de movimento e, então, as trajetórias definidas no espaço de fases estão dispostas sobre as variedades que tenham o valor de H constante, ou seja, dispostas sobre as superfícies com energia constante. Logo, para cada par de equações canônicas, o campo vetorial hamiltoniano é dado por $(\partial H/\partial p_i, -\partial H/\partial q_i)$. Apesar disso, há casos excepcionais em que H se conserva sem coincidir com a energia total, ou o contrário, H coincidir com a energia total do sistema, mas não se conservar.

2.1.1 Notação Simplética

As equações de Hamilton para um sistema de n graus de liberdade podem ser compactadas e reescritas ao introduzir uma notação que as resumam numa forma matricial. Essa notação é denominada notação simplética. A partir daí, é construído um vetor de $2n$ componentes contendo as coordenadas generalizadas, os momentos conjugados e o correspondente operador gradiente, de modo que

$$\chi = \begin{pmatrix} q_1 \\ \vdots \\ q_n \\ p_1 \\ \vdots \\ p_n \end{pmatrix}, \quad \nabla_\chi = \begin{pmatrix} \partial/\partial q_1 \\ \vdots \\ \partial/\partial q_n \\ \partial/\partial p_1 \\ \vdots \\ \partial/\partial p_n \end{pmatrix}. \quad (2.16)$$

A matriz simplética \mathbf{J} é definida como

$$J = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ -\mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad (2.17)$$

em que \mathbf{J} tem dimensão $2n \times 2n$, e cada um dos seus elementos $\mathbf{0}$ e $\pm\mathbf{1}$ são matrizes $n \times n$. Além disso, a matriz simplética \mathbf{J} possui as seguintes propriedades:

- $\mathbf{J}^2 = -\mathbf{I}$ onde \mathbf{I} é a matriz identidade;
- $\mathbf{J}^T \cdot \mathbf{J} = \mathbf{J} \cdot \mathbf{J}^T = \mathbf{I}$, ou seja, $\mathbf{J}^T = \mathbf{J}^{-1} = -\mathbf{J}$ e (\mathbf{J} é uma matriz ortogonal);

- $\det \mathbf{J} = 1$.

A partir dessas definições, as equações de Hamilton (ou as equações de movimento do sistema) podem ser escritas em sua forma compacta

$$\dot{\chi} = \mathbf{J} \cdot \nabla_{\chi} H. \quad (2.18)$$

Uma das propriedades das equações de Hamilton é a preservação de seu volume no espaço de fases. Para verificar essa propriedade, considere uma superfície fechada arbitrária $S(t)$ de volume $V(t)$ no espaço de fases e a evolução temporal dessa superfície $S(t+dt)$. Dessa forma, em um intervalo de tempo infinitesimal dt , a evolução infinitesimal da área dS cria um volume $(\vec{n} \cdot \vec{f} dt) dS$, em que n representa o módulo de um vetor unitário que aponta na direção perpendicular e para fora do volume $V(t)$, e \vec{f} é a velocidade instantânea do sistema em um ponto arbitrário da superfície. Então, o novo volume é dado pelo volume antigo mais a evolução infinitesimal da superfície em todas as n direções

$$V(t+dt) = V(t) + \int_S (\vec{n} \cdot \vec{f} dt) dS. \quad (2.19)$$

Neste caso, considerando-se que a evolução temporal do volume $V(t+dt) - V(t)$ é infinitesimal e que a superfície $S(t)$ é fechada, ao multiplicar os dois lados da equação (2.19) por $1/dt$, chega-se a

$$\frac{V(t+dt) - V(t)}{dt} \equiv \frac{dV}{dt} = \oint_S (\vec{n} \cdot \vec{f}) dS. \quad (2.20)$$

Utilizando-se do teorema da divergência $\oint_S (\vec{n} \cdot \vec{f}) dS = \int_V (\vec{\nabla} \cdot \vec{f}) dV$, a equação (2.20) é reescrita como

$$\frac{dV}{dt} = \int_V (\vec{\nabla} \cdot \vec{f}) dV. \quad (2.21)$$

O sistema é conservativo quando $(\vec{\nabla} \cdot \vec{f}) = 0$, se contrai caso $(\vec{\nabla} \cdot \vec{f}) < 0$ e é expansivo para $(\vec{\nabla} \cdot \vec{f}) > 0$. Uma consequência em particular da conservação do volume no espaço de fases de sistemas hamiltonianos é que não são observados atratores neste espaço.

2.2 Espaço de Fases e Superfície de Energia

Em um sistema hamiltoniano com n graus de liberdade, as $2n$ equações diferenciais de primeira ordem no tempo podem ter as suas soluções representadas por um único ponto

marca ponto contido nesse espaço pode ser representado por uma matriz coluna, isto é,

$$\chi = \begin{pmatrix} q_1 \\ \vdots \\ q_n \\ p_1 \\ \vdots \\ p_n \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

Neste caso, as equações de movimento são tratadas em sua forma simplética obedecendo a relação $\dot{\chi} = J \cdot \frac{\partial H}{\partial \chi}$.

Como as equações de Hamilton são de primeira ordem no tempo, o teorema de “Cauchy-Lipschitz” (ref) garante que, por cada ponto do espaço de fases passe apenas uma trajetória, ou seja, as trajetórias nunca se cruzam em um ponto do espaço de fases. Ao tratar inicialmente cada ponto do espaço de fases como uma condição inicial, pode-se imaginar a dinâmica gerada por H como um fluxo que propaga temporalmente as condições iniciais ao longo de suas trajetórias. Para sistemas dinâmicos com hamiltonianas independentes do tempo, é definida a superfície de energia

$$\Sigma_E = \{\chi \in F^{2n} \mid H(\chi) = E\}, \quad (2.23)$$

o qual possui dimensão $\dim(\Sigma_E) = 2n - 1$.

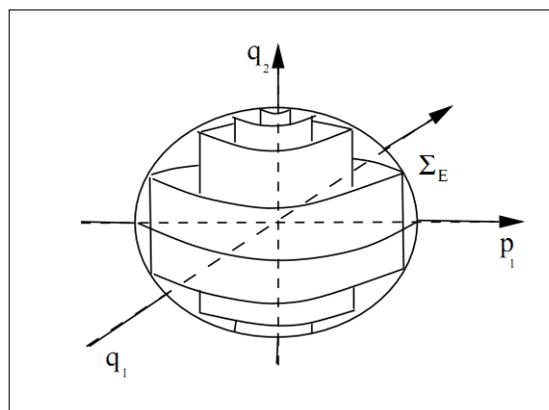


Figura 2: Superfície de energia tridimensional projetada no espaço $q_1 - p_1 - q_2$, obtida para um sistema dinâmico com dois graus de liberdade, em especial, considerando-se o oscilador harmônico bidimensional. Figura retirada de [26].

Na figura 2, é ilustrada a superfície de energia de um sistema hamiltoniano com dois graus de liberdade. Neste caso, como o valor de H sobre qualquer trajetória é constante, as suas condições iniciais definem uma superfície de energia. Uma característica dessa superfície é que, como todo o ponto da superfície de energia é transportado pela dinâmica

hamiltoniana a outro ponto também contido na superfície de energia, esta superfície é invariante pela dinâmica.

2.2.1 Oscilador Harmônico Bidimensional

Para introduzir alguns conceitos fundamentais da teoria dos sistemas hamiltonianos, será discutido um sistema simples, o oscilador harmônico bidimensional. Deste modo, considere-se o oscilador harmônico bidimensional [28] cujo hamiltoniano é dado por

$$H(q_1, q_2, p_1, p_2) = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{m\omega_1^2 q_1^2}{2} + \frac{m\omega_2^2 q_2^2}{2}. \quad (2.24)$$

A solução geral das equações de movimento para o oscilador harmônico bidimensional podem ser reescritas a partir da notação simplética, de modo que

$$\chi(t) = A(t)\chi_0, \quad (2.25)$$

em que $\chi_0 \equiv \chi(0)$ é a condição inicial tomada sobre o tempo inicial $t = 0$, e a matriz propagação $A(t)$ dada por

$$A(t) = \begin{pmatrix} \cos(\omega_1 t) & 0 & \frac{1}{m\omega_1} & 0 \\ 0 & \cos(\omega_2 t) & 0 & \frac{1}{m\omega_2} \\ -m\omega_1 \sin(\omega_1 t) & 0 & \cos(\omega_1 t) & 0 \\ 0 & -m\omega_2 \sin(\omega_2 t) & 0 & \cos(\omega_2 t) \end{pmatrix}, \quad (2.26)$$

contém todas as informações sobre a dinâmica do sistema. Assim, a condição inicial χ_0 é propagada pela matriz propagação $A(t)$, do mesmo modo que partículas são arrastadas por um fluido.

A matriz propagação, em particular, envolve as frequências de oscilação do sistema, ω_1 e ω_2 . Com isso, é possível considerar duas situações para a matriz $A(t)$, periódica e quase periódica. Essas duas situações, neste caso, dependem somente do valor da razão entre as frequências $\alpha \equiv \omega_1/\omega_2$ (ou, também denominado número de rotação) resultar em um número racional ou irracional. Se o valor do número de rotação resulte em um número racional, do tipo $\alpha = r/s$, com r e s inteiros, pode-se escrever:

$$\omega_1 = r\omega_0 \quad \text{e} \quad \omega_2 = s\omega_0. \quad (2.27)$$

É possível então verificar que $A\left(t + \frac{2\pi}{\omega_0}\right) = A(t)$, ou seja, todas as soluções são periódicas e com período $T = 2\pi/\omega_0$. Para o caso irracional, não há periodicidade, e as soluções são quase periódicas.

Outro aspecto do oscilador bidimensional é que o seu espaço de fases apresenta dimensão 4, de modo que a superfície de energia com $H = E$ pode ser escrita como

$$\frac{p_1^2}{2mE} + \frac{p_2^2}{2mE} + \frac{q_1^2}{2E/m\omega_1^2} + \frac{q_2^2}{2E/m\omega_2^2} = 1. \quad (2.28)$$

A equação (2.28) representa um elipsóide inserido no espaço de quatro dimensões, cujo hamiltoniano pode ser reescrito como

$$H(q, p) = \left(\frac{p_1^2}{2m} + \frac{m\omega_1^2 q_1^2}{2} \right) + \left(\frac{p_2^2}{2m} + \frac{m\omega_2^2 q_2^2}{2} \right) \equiv H_1 + H_2. \quad (2.29)$$

A energia total do sistema é então distribuída em duas partes independentemente conservadas que são constantes de movimento e estão associadas aos graus de liberdade do oscilador. Assim, as duas constantes de movimento são dadas por

$$E_1 = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{m\omega_1^2 q_1^2}{2} \quad (2.30)$$

e

$$E_2 = \frac{p_2^2}{2m} + \frac{m\omega_2^2 q_2^2}{2}. \quad (2.31)$$

Uma consequência da presença de constantes de movimento é que o movimento global restringe-se a uma superfície menor do que a superfície de energia \sum_E e, então, as equações (2.30) e (2.31) definem elipses em cada uma dos planos conjugados (q_i, p_i) . O movimento no espaço de fases ocorre sobre uma superfície de dimensão dois, que é o resultado do produto direto das duas elipses. Essa superfície é denominada como toro T^2 , e a sua forma análoga a um pneu pode ser observada na figura 3. Logo, manter o valor da energia total E fixo e variar a sua distribuição entre E_1 e E_2 , equivale a uma mudança de toro. Na figura 2, é observado a projeção cilíndrica dos toros na superfície de energia \sum_E , o qual forma uma estrutura semelhante a uma cebola.

2.2.2 Seção de Poincaré

Como pôde ser observado na seção 2.2.1, fazer uma simples descrição da dinâmica de um sistema hamiltoniano com dois graus de liberdade é uma tarefa dispendiosa, devido à alta dimensionalidade apresentada em seu espaço de fases. As trajetórias de um sistema hamiltoniano com dois graus de liberdade se movem na superfície de energia $\sum_E \subset F^4$, pois o vínculo $H = E$ é obedecido. Contudo, representar e parametrizar a superfície de energia ainda é uma tarefa tediosa.

Uma forma de visualizar a dinâmica de tais sistemas é através do uso do método da seção de Poincaré. A partir desse método, a dinâmica de sistemas hamiltonianos com

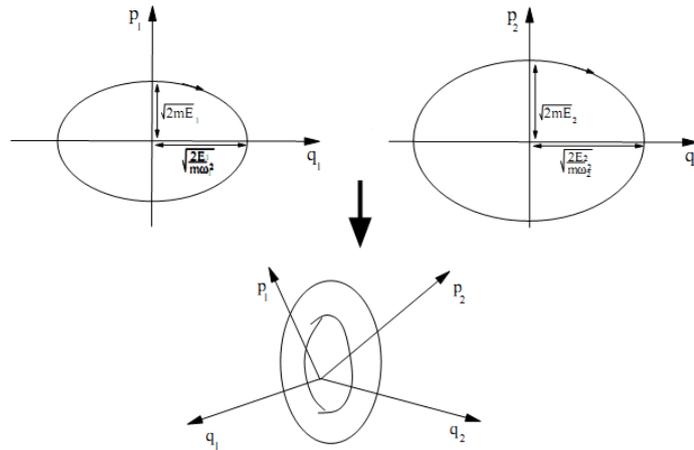


Figura 3: Trajetória do oscilador bidimensional projetada nos planos conjugados $q_1 - p_1$ e $q_2 - p_2$. O toro T^2 mostrado na parte inferior é formado pelo produto direto das duas elipses que estão imersas em um espaço de fases quadridimensional. Figura retirada de Aguiar [26].

até dois graus de liberdade pode ser reduzida e tratada como se tais sistemas fossem unidimensionais. Logo, a construção da seção de Poincaré consiste na escolha de um segundo vínculo, tal que $f(q_1, q_2, p_1, p_2) = 0$, o que torna possível a visualização da dinâmica, pois a dinâmica do sistema passa a ocorrer em uma região de dimensão dois no espaço de fases. Uma possível escolha para o segundo vínculo é fazer o valor $q_2 = 0$, criando uma superfície \sum_{q_2} que intersecciona a superfície \sum_E . Com isso, é formada a seção \sum_P denominada como seção de Poincaré, como pode ser visualizado na figura 4.

Escolhendo um ponto $\chi_0 = (q_{10}, q_{20} = 0, p_{10}, p_{20})$ sobre a superfície de Poincaré e fazendo dele uma condição inicial, pode-se observar que ao propagá-lo, o valor de $q_2(t)$ deixa de ser zero e o vínculo $q_2 = 0$ é desfeito. Entretanto, para longos intervalos de tempo, tem-se novamente o valor de $q_2 = 0$ e, então, é marcando o próximo da seção de Poincaré. Assim, é formada uma dinâmica discreta denominada como mapa de Poincaré P , que leva os pontos da superfície \sum_P a pontos também definidos sobre ela mesma. Deve-se enfatizar, que a escolha do vínculo ocorre de forma arbitrária, de tal modo que a escolha de outro vínculo qualquer depende apenas da conveniência do problema.

Para finalizar a construção da seção de Poincaré, deve-se considerar os valores dos pontos q_1 e p_1 sobre a superfície de Poincaré, pois o vínculo $q_2 = 0$ e os valores dos pontos p_2 podem ser obtidos a partir da condição $H = E$. Deve-se notar também que, como o hamiltoniano geralmente é quadrático em p_2 , então, por conveniência, são considerados apenas os pontos que retornam à $q_2 = 0$ com momento conjugado p_2 de mesmo sinal que p_{20} . Portanto, a partir da construção da seção de Poincaré, um ponto $\chi_0 \in \sum_P$ é levado a um próximo ponto $\chi_1 \in \sum_P$ propagado pela dinâmica hamiltoniana e, então, é formado o

mapa $\chi_1 = P\chi_0$ como descrito na figura 4.

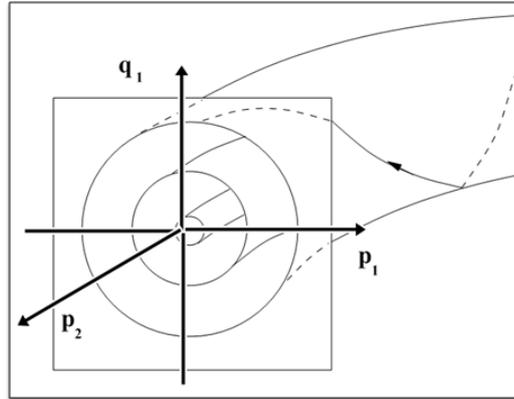


Figura 4: Figura ilustrativa representando uma trajetória interceptando o plano (p_1, q_1) . Neste caso, é marcado um ponto na seção de Poincaré criada a partir do vínculo $q_2 = 0$. Figura adaptada de Aguiar [26].

Um exemplo que ilustra a construção da seção de Poincaré é o oscilador harmônico bidimensional demonstrado na seção 2.2.1. Na construção da seção de Poincaré, é utilizado o mesmo vínculo explicitado anteriormente, $q_2 = 0$. Assim, quando considerada a matriz propagação $A(t)$ (ver seção 2.2.1) tem-se como resultado, com $q_{20} = 0$,

$$q_2(t) = \frac{p_{20}}{m\omega_2} \sin(\omega_2 t) \quad (2.32)$$

e

$$p_2(t) = p_{20} \cos(\omega_2 t), \quad (2.33)$$

Para $t > 0$, $q_2(t)$ se anula com $t = n\pi/\omega_2$. Entretanto, para se ter o valor de $p_2 > 0$, é necessário que n seja par, ou seja, $n = 2k$ com $k \in \mathbb{Z}$. Logo, apenas com $t = 2k\pi/\omega_2$ a trajetória retorna a superfície de Poincaré, pois

$$\frac{p_{20}}{m\omega_2} \text{sen}(\omega_2 t) = 0. \quad (2.34)$$

Para o valor $k = 1$, ou seja, quando tem-se a primeira interseção entre a trajetória e a superfície de Poincaré, os valores de q_1 e p_1 podem ser determinados através da seguinte expressão

$$\begin{pmatrix} q_{11} \\ p_{11} \end{pmatrix} = P_\alpha \begin{pmatrix} q_{10} \\ q_{10} \end{pmatrix}, \quad (2.35)$$

com

$$P_\alpha = \begin{pmatrix} \cos(2\pi\alpha) & \frac{1}{m\omega} \sin(2\pi\alpha) \\ -m\omega \sin(2\pi\alpha) & \cos(2\pi\alpha) \end{pmatrix},$$

em que $\alpha = \omega_1/\omega_2 = r/s$.

A expressão acima conecta duas interseções sucessivas de uma mesma trajetória na seção de Poincaré, de tal forma que quando designados os pontos $\chi = (q, p)$ e $\chi_1 = (q_1, p_1)$ é obtido o mapa de Poincaré $\chi_1 = P_\alpha \chi_0$. Esse processo pode ser generalizado para um número i de iterações, produzindo o mapa $\chi_i = P_\alpha^i \chi_0$.

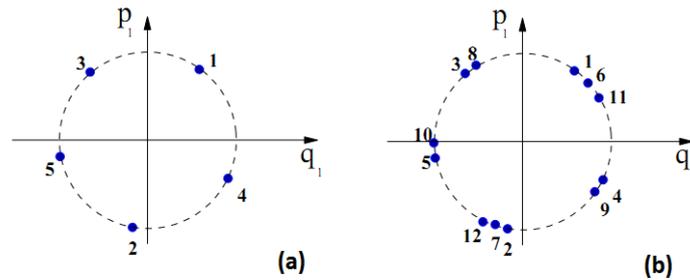


Figura 5: Seção de Poincaré para o oscilador harmônico bidimensional. (a) Representação para uma órbita periódica (b) Representação para uma órbita não periódica. Sendo assim, o mapa de Poincaré é definido para o vínculo $q_2 = 0$ e plano $q_1 - p_1$. Figura retirada de Aguiar [26].

As trajetórias que se propagam continuamente sobre a superfície dos toros constituem a superfície de energia que intercepta o mapa de Σ_P , como pode ser visto na figura 4. Assim, é possível observar que o valor da razão α determina se a trajetória é periódica (formando toros racionais) ou não-periódica (formando toros irracionais). Na figura 5, é ilustrada a seção de Poincaré para duas órbitas, uma com razão de frequência racional $\alpha = 2/5$ (figura 5.(a)) e outra com razão de frequência irracional com um valor de α próximo de $2/5$ (figura 5.(b)). Nesse exemplo, para o caso racional, qualquer trajetória perfura o plano de Poincaré 5 vezes, repetindo indefinidamente a mesma sequência de pontos. Nesse mesmo toro existem infinitas outras trajetórias, cada uma perfurando o plano 5 vezes, porém em pontos distintos do toro. Para o caso irracional, uma única trajetória perfura o mapa de Poincaré em posições ligeiramente distintas das anteriores. Dessa forma, uma única trajetória preenche totalmente o toro após um intervalo de tempo suficientemente longo.

2.3 Transformações Canônicas

Na formulação hamiltoniana, sabe-se que as variáveis canônicas q e p são independentes, o que torna possível uma mudança de variáveis para o sistema. Neste caso, é possível considerar mudanças de variáveis no espaço de fases, de modo que a forma canônica das equações de movimento seja preservada. Assim, sejam conhecidas as variáveis

canônicas e o hamiltoniano do sistema, busca-se uma transformação inversível do tipo

$$Q = Q(q, p, t); \quad P = P(q, p, t). \quad (2.36)$$

As novas variáveis estão definidas não somente em função das antigas coordenadas, mas também, em função dos antigos momentos generalizados e do tempo. Assim, para que as novas variáveis Q e P sejam consideradas variáveis canônicas deve existir uma função $K(Q, P, t)$, tal que as equações de movimento do novo sistema preservem a forma das equações Hamilton, isto é,

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i}; \quad \dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i}. \quad (2.37)$$

A função K desempenha o papel de um novo hamiltoniano para o novo sistema de coordenadas escolhido de modo que a validade das equações (2.37) ocorre através da preservação de sua forma canônica. Ou seja, a forma canônica das equações de Hamilton para as novas variáveis é satisfeita quando obedecido o princípio de Hamilton

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \left[\sum_i P_i \dot{Q}_i - K \right] dt = 0. \quad (2.38)$$

Do mesmo modo, segue para as variáveis antigas

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \left[\sum_i p_i \dot{q}_i - H \right] dt = 0. \quad (2.39)$$

Deve-se enfatizar, porém, que a validade simultânea das equações (2.38) e (2.39) não implica necessariamente que os integrandos sejam iguais em ambas as expressões. Como a ação S tem variação nula nos extremos é imposto que os integrandos sejam proporcionais e, então,

$$\sum_i^n P_i \dot{Q}_i - K = \lambda \left[\sum_i^n p_i \dot{q}_i - H \right]. \quad (2.40)$$

A constante multiplicativa λ está associada com um tipo de transformação canônica conhecida como transformação de escala. Logo, com auxílio de uma transformação de escala adequada pode-se concentrar a atenção em transformações canônicas para as quais $\lambda = 1$.

Em particular, é possível acrescentar na equação (2.40) uma função geratriz do tipo $F = F(q, p, t)$, desde que

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \frac{dF(q, p, t)}{dt} dt = \delta [F(q(t_2), p(t_2), t_2) - F(q(t_1), p(t_1), t_1)] = 0. \quad (2.41)$$

A variação da função F nas variáveis antigas deve ser nula nos extremos, de modo que $\delta q_i(t_2) = \delta q_i(t_1) = 0$ e $\delta p_i(t_2) = \delta p_i(t_1) = 0$.

A vantagem de exigir que a variação em seus extremos seja nula é a obtenção de uma forma mais generalizada para as equações de movimento. Assim, a equação (2.40) preserva o formato hamiltoniano das equações de movimento se

$$\left(\sum_i^n p_i \dot{q}_i - H \right) = \left(\sum_i^n P_i \dot{Q}_i - K \right) + \frac{dF}{dt}, \quad (2.42)$$

ou, escrito em sua forma diferencial

$$\sum_i^n (p_i dq_i - P_i dQ_i) + (K - H) dt = dF. \quad (2.43)$$

Posteriormente, mediante uso das equações de transformação (2.36) e suas inversas, a função F pode ser expressa em função das antigas variáveis, assim como em função das novas. Em geral, pode-se fazer uma escolha para a função F tal que as coordenadas (q, Q) sejam escolhidas como um conjunto de $2n$ variáveis independentes. Supondo então que $F = F_1(q, Q, t)$, tem-se que

$$dF_1 = \frac{\partial F_1}{\partial q} dq + \frac{\partial F_1}{\partial Q} dQ + \frac{\partial F_1}{\partial t} dt. \quad (2.44)$$

Ao igualar a equação (2.44) à equação (2.43), chega-se às expressões que relacionam as antigas e as novas variáveis

$$p_i = \frac{\partial F_1}{\partial q_i}, \quad P_i = -\frac{\partial F_1}{\partial Q_i} \quad \text{e} \quad K(Q, P, t) = H(q, p, t) + \frac{\partial F_1}{\partial t}. \quad (2.45)$$

As equações (2.45) constituem um sistema de equações diferenciais parciais de modo que quando conhecida a função F_1 são fornecidas as n relações entre p , q e Q e o Hamiltoniano K . No entanto, a escolha de uma função geratriz do tipo $F_1(q, Q, t)$ nem sempre é a mais adequada para descrever a transformação canônica. Em alguns casos, por exemplo, a transformação canônica pode ser tal que não é possível escrever os momentos conjugados p_i em função das coordenadas generalizadas q_i , ou ainda as coordenadas Q_i em função de q_i . Neste caso, é de interesse obter uma função geratriz que seja função das antigas coordenadas generalizadas q_i e dos novos momentos conjugados P_i . Para isso, considera-se uma função geratriz do tipo

$$F = F_2(q_i, P_i, t) - Q_i P_i. \quad (2.46)$$

Substituindo (2.46) em (2.43) obtém-se

$$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i}, \quad Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i}, \quad \text{com} \quad K(q, P, t) = H(q, p, t) + \frac{\partial F_2}{\partial t}. \quad (2.47)$$

Além das funções geratrizes do tipo F_1 e F_2 , existem duas outras possibilidades de funções geratrizes: $F_3 = F_3(p, Q, t)$ e $F_4 = F_4(Q, P, t)$ (para mais detalhes verificar a referência [24]).

2.4 Teoria de Hamilton-Jacobi

A teoria de Hamilton-Jacobi é um método que quando utilizado permite a obtenção de uma transformação canônica capaz de simplificar as equações de movimento do sistema. Uma forma de tornar as equações de movimento do sistema em equações solúveis (ou seja, que possam ser resolvidas por operações como inversão e quadratura) é através da introdução de uma transformação canônica que leva as antigas variáveis (q_i, p_i) a um novo conjunto de variáveis (Q_i, P_i) , de tal modo que o novo hamiltoniano K dependa somente dos novos momentos P_i .

Uma possível escolha de transformação canônica é a própria constante de movimento, por exemplo, as n componentes do momento conjugado $P_i = F_i(q, p)$. Logo, as novas variáveis são dadas por

$$\dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i} = 0; \quad \dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i} \equiv \Omega_i(P), \quad (2.48)$$

em que a sua solução é $P_i = P_{i0} = \text{constante}$ e $Q_i(t) = Q_{i0} + \Omega_i t$.

Outro modo de tornar as equações de movimento “triviais” é através da introdução de uma transformação canônica dependente do tempo, gerada, por exemplo, por uma função geratriz do tipo $F_2 = (q, P, t)$, de tal modo que a nova hamiltoniana seja dada por

$$K(Q_i, P_i, t) = H(q_i, p_i, t) + \frac{\partial F}{\partial t} \equiv 0. \quad (2.49)$$

A função geratriz do tipo F_2 é usualmente escrita como sendo a ação S , ou também denominado como função principal de Hamilton. Nesse caso, com o uso das equações de transformações $p_i = \partial S / \partial q_i$, provenientes das equações (2.47), chega-se à equação de Hamilton-Jacobi, que é dada por

$$H\left(q_1, \dots, q_n; \frac{\partial S}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial S}{\partial q_n}\right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0. \quad (2.50)$$

A equação (2.50) é uma equação diferencial parcial de primeira ordem nas $n + 1$ variáveis, as n coordenadas q_i e o tempo t . A solução dessa equação requer $n + 1$ constantes de integração. No entanto, uma das constantes é aditiva de modo que pode ser desconsiderada, pois envolve apenas as derivadas de S , não modificando a transformação gerada pelo própria ação. Deste modo, as n constantes de integração $(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ devem

possuir alguma ligação com os n valores das constantes P_i . Sendo assim, é possível escolher $\alpha_i = P_i$, e reescrever o momento p_i e a coordenada generalizada Q_i como,

$$p_i = \frac{\partial S(q, \alpha, t)}{\partial q_i} \quad (2.51)$$

e

$$Q_i \equiv \beta_i = \frac{\partial S(q, \alpha, t)}{\partial \alpha_i}, \quad (2.52)$$

em que os β 's também são constantes (assim como os α 's). A partir das equações (2.52) e (2.51), é deduzido que as coordenadas generalizadas e os momentos conjugados são escritos em função dos valores de α e β e, então, $q_i = q_i(\alpha, \beta, t)$ e $p_i = p_i(\alpha, \beta, t)$.

Como foi observado, há uma certa liberdade na definição do conjunto de variáveis, Q_i e P_i . Uma escolha, em particular, leva às variáveis ação-ângulo. Essa é uma transformação canônica que leva (q_i, p_i) a (ϕ_i, I_i) , onde cada ϕ_i varia ao longo de um circuito irreduzível γ_i sobre o toro entre 0 e 2π . A ideia que envolve esse tipo de transformação ocorre da seguinte forma: seja um conjunto de n constantes $F_i(q_i, p_i)$ independentes em involução, tal que possa-se definir novas variáveis (Q_i, P_i) de forma que $P_i = F_i(q_i, p_i)$. Como os P_i são constantes do movimento, o hamiltoniano H não depende dos Q_i , pois $\dot{Q}_i = \partial H / \partial P_i \equiv \Omega_i(P_i) = \text{constante}$.

No entanto, tornar os valores dos P_i em função dos F_i acaba não sendo a melhor escolha possível, pois as funções F_i geram fluxos que necessariamente já se encontram ao longo dos circuitos irreduzíveis γ_i . É então definido um novo conjunto de momentos I_i em função dos F_i , que, por sua vez, são associados as ϕ_i .

O conjunto de variáveis (I_i, ϕ_i) são chamadas de variáveis ação-ângulo, em que a ação I_i é definida a partir de:

$$I_i = 1/2\pi \oint_{\gamma_i} p \cdot dq_i, \quad \text{para } i = 1, \dots, n, \quad (2.53)$$

em que γ_i denota n circuitos irreduzíveis sobre os toros T^n .

Para cada γ_i são designadas as n direções dos ângulos sobre o toro. Essas direções podem ser usadas para parametrizar os pontos sobre o toro, como mostrado na figura 6.

Em um caso especial é de interesse uma transformação canônica que leve a hamiltoniana a depender somente dos I 's e não somente dos ϕ 's. Neste caso, para todo $i = 1, 2, \dots, n$ tem-se que

$$\dot{I}_i = 0, \quad (2.54)$$

e as variáveis ação são constantes de movimento.

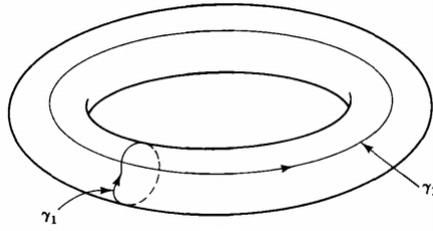


Figura 6: Órbita sobre um toro T^2 , com seus respectivos circuitos irredutíveis γ_1 e γ_2 .
Figura retirada de [27].

Dessa forma, é obtida uma mudança de variáveis $(p_i, q_i) \rightarrow (I_i, \phi_i)$ em termos da função geratriz S

$$\phi = \frac{\partial S(I, q)}{\partial I}, \quad (2.55)$$

e

$$p = \frac{\partial S(I, q)}{\partial q}. \quad (2.56)$$

A variação de ϕ sobre um circuito γ_1 é denotada por $\Delta\gamma_1$ e a variação da função geratriz sobre um circuito é denotada por ΔS_i , e estes são dados por

$$\Delta S_i = \oint_{\gamma_i} p \cdot dq = 2\pi I_i, \quad (2.57)$$

$$\begin{aligned} \Delta\phi_i &= \frac{\partial}{\partial I} \Delta S_i = 2\pi \frac{\partial}{\partial I} I_i \\ \Delta\phi_i &= 2\pi \delta_{ij}, \end{aligned} \quad (2.58)$$

com $\delta_{ij} = 1$ se $i = j$ e $\delta_{ij} = 0$ se $i \neq j$.

O novo hamiltoniano $K = H = \alpha_1(I_1, \dots, I_n)$ é então construído em termos das variáveis ação-ângulo, independentemente da variável ϕ . Logo, as equações de movimento podem ser reduzidas a

$$\frac{dI}{dt} = 0, \quad \frac{d\phi}{dt} = \frac{\partial K(I)}{\partial I} \equiv \omega(I), \quad (2.59)$$

As soluções do conjunto de equações 2.59 são

$$I(t) = I(0) \quad \text{e} \quad \phi(t) = \phi(0) + \omega(I)t, \quad (2.60)$$

em que o termo $\omega(I)$ nas equações (2.60) é interpretado como um vetor velocidade angular, especificando as trajetórias sobre os toros.

A matemática envolvida no procedimento realizado para encontrar as trajetórias das variáveis ação-ângulo é denominada teoria canônica da perturbação, em que as variáveis originais q 's e p 's são escritas como uma série de potências que estão em função das novas variáveis I e ϕ .

2.5 Estabilidade em Pontos de Equilíbrio e Órbitas Periódicas

O conceito de estabilidade linear é amplamente utilizado para caracterizar tanto pontos de equilíbrio quanto órbitas periódicas. Nesse caso, as órbitas periódicas são tratadas como ponto fixos nos mapas de Poincaré. A determinação da natureza dos pontos de equilíbrio e de órbitas periódicas compreende uma análise sobre o comportamento dinâmico de suas vizinhanças.

Seja definido um ponto de equilíbrio $\chi_0 = (q_0, p_0)$ de um sistema de equações diferenciais. O ponto de equilíbrio é assintoticamente estável se a resposta do sistema a uma perturbação arbitrária se aproxima de (q_0, p_0) quando $t \rightarrow \infty$. Logo, considere-se como exemplo um pêndulo amortecido com um ângulo θ entre o fio que sustenta a massa m e o eixo vertical. O pêndulo se encontra em estado de repouso quando $\theta = 0$, ou seja, no ponto de equilíbrio determinado sobre a origem do gráfico. Supondo que o pêndulo seja ligeiramente afastado da origem e, então, seja alterado o seu estado de repouso, observa-se uma oscilação em torno da origem até que o pêndulo retorne ao ponto de equilíbrio. Neste caso, o ponto $(\theta, p_\theta) = (0, 0)$ é classificado como um ponto de equilíbrio assintoticamente estável ou, comumente chamado de atrator¹.

No caso em que o ponto de equilíbrio é instável, a resposta do sistema a uma pequena perturbação arbitrária cresce quando $t \rightarrow \infty$. Então, considere-se o mesmo exemplo do pêndulo descrito anteriormente, porém o pêndulo estará suspenso por uma barra rígida de massa desprezível. Para um ângulo de $\theta = \pi$ formado entre a barra e o eixo vertical é verificado que qualquer que seja a perturbação conduz a um afastamento do ponto de equilíbrio, o que garante a instabilidade do ponto de equilíbrio.

Para um ponto de equilíbrio neutramente estável, considere-se o exemplo de um pêndulo simples (neste caso, não forçado e sem atrito) esteja em repouso sobre o ponto $\theta = 0$. A ausência do atrito fará com que a energia transferida ao pêndulo se conserve e, então, quando o pêndulo é ligeiramente afastado da sua posição de equilíbrio permanece oscilando indefinidamente em torno do ponto de equilíbrio. Para $t \rightarrow \infty$, o pêndulo em média nem se afasta nem se aproxima do ponto de equilíbrio. Assim, o ponto de equilíbrio é classificado como neutramente estável se a resposta do sistema a pequenas perturbações permanece inalterada quando $t \rightarrow \infty$.

¹ Os sistemas dinâmicos conservativos, bem como os sistemas hamiltonianos, não exibem estruturas atratoras devido à propriedade de conservação de seu volume no espaço de fases.

Seguindo a classificação de um ponto de equilíbrio, definida a partir da analogia com o movimento de um pêndulo, considere-se um ponto de equilíbrio $\chi_0 = (q_0, p_0)$ de um sistema hamiltoniano com um grau de liberdade, de tal modo que o campo hamiltoniano $\Phi = \nabla_{\chi} H$ seja nulo sobre este ponto, i.e.,

$$\left. \frac{\partial H}{\partial p} \right|_{p_0} = \frac{\partial H}{\partial p_0} = 0, \quad (2.61)$$

$$\left. \frac{\partial H}{\partial q} \right|_{q_0} = \frac{\partial H}{\partial q_0} = 0. \quad (2.62)$$

A determinação da estabilidade de χ_0 é feita a partir da análise do comportamento dinâmico no em torno de sua vizinhança. Considere-se então o ponto $\chi = (q, p)$, diferindo do ponto de equilíbrio por uma pequena variação $(\delta q, \delta p)$, de modo que

$$q = q_0 + \delta q \quad \text{e} \quad p = p_0 + \delta p. \quad (2.63)$$

Deste modo, ao substituir as equações (2.63) nas equações de Hamilton (2.14) e (2.15), e expandir o resultado obtido em primeira ordem nos desvios δp e δq , tem-se que

$$\dot{q} = \delta \dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p_0} + \frac{\partial H^2}{\partial q_0 \partial p_0} \delta q + \frac{\partial H^2}{\partial p_0^2} \delta p, \quad (2.64)$$

$$\dot{p} = \delta \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q_0} - \frac{\partial H^2}{\partial q_0^2} \delta q - \frac{\partial H^2}{\partial q_0 \partial p_0} \delta p. \quad (2.65)$$

Essas equações podem ainda ser reescritas em sua forma matricial, de modo que

$$\begin{pmatrix} \delta \dot{q} \\ \delta \dot{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} H_{qp} & H_{pp} \\ -H_{qq} & -H_{pq} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \delta q \\ \delta p \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} \delta q \\ \delta p \end{pmatrix}, \quad (2.66)$$

em que $H_{qp} = \frac{\partial H^2}{\partial q_0 \partial p_0}$, $H_{pp} = \frac{\partial H^2}{\partial p_0^2}$, $H_{qq} = \frac{\partial H^2}{\partial q_0^2}$ e $H_{pq} = \frac{\partial H^2}{\partial q_0 \partial p_0}$.

Os elementos da matriz propagação A são coeficientes constantes, neste caso, a equação (2.66) pode ser reescrita em sua forma simplética

$$\delta \dot{\chi} = A \delta \chi = J H'' \chi, \quad (2.67)$$

em que $H''_{ij} \equiv \partial^2 H(q_0, p_0) / \partial \chi_i \partial \chi_j$. Ao encontrar os autovalores de H'' a estabilidade do ponto de equilíbrio pode ser determinada como

$$\lambda = \pm \sqrt{-\det H''}. \quad (2.68)$$

Ao analisar os autovalores da matriz H , pode-se observar a existência de duas possibilidades: *I*) o caso real ($\det H'' < 0$) quando seus autovalores λ e $-\lambda$ são reais; *II*) o

caso imaginário puro ($\det H'' > 0$) seus autovalores λ são imaginários puros, o que implica em $\lambda^* = -\lambda$. Assim, a partir da definição das duas possibilidades para os autovalores de H'' , o caso real e o caso imaginário, segue-se a seguinte análise:

Para o caso real: sejam os dois autovetores de A , v_1 e v_2 , pode-se considerar uma pequena variação $\delta\chi$ na direção de v_1 ou v_2 , em que são obtidos

$$\dot{v}_1 = Av_1 = \lambda v_1 \longrightarrow v_1(t) = v_{10}e^{\lambda t} \quad (2.69)$$

e

$$\dot{v}_2 = Av_2 = \lambda v_2 \longrightarrow v_2(t) = v_{20}e^{-\lambda t}. \quad (2.70)$$

Um deslocamento arbitrário pode ser escrito como uma combinação linear dos autovetores v_1 e v_2 , de tal forma que

$$\begin{aligned} \delta\chi(t) &= \alpha_1 v_1(t) + \alpha_2 v_2(t) \\ &= \alpha_1 v_{10}e^{\lambda t} + \alpha_2 v_{20}e^{-\lambda t}. \end{aligned}$$

Essas equações podem ser reescritas na forma matricial em termos de (q, p) , ou seja,

$$\begin{pmatrix} \delta q(t) \\ \delta p(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_1 v_{10q}e^{\lambda t} + \alpha_2 v_{20q}e^{-\lambda t} \\ \alpha_1 v_{10p}e^{\lambda t} + \alpha_2 v_{20p}e^{-\lambda t} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} v_{10q} & v_{20q} \\ v_{10p} & v_{20p} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} e^{\lambda t} & 0 \\ 0 & e^{-\lambda t} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} = V_0 S(t) \alpha, \quad (2.71)$$

$$\text{em que } V_0 = \begin{pmatrix} v_{10q} & v_{20q} \\ v_{10p} & v_{20p} \end{pmatrix}, S(t) = \begin{pmatrix} e^{\lambda t} & 0 \\ 0 & e^{-\lambda t} \end{pmatrix} \text{ e } \alpha = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix}.$$

Neste caso, para o valor $t = 0$ na equação (2.71) tem-se que $\alpha = V_0^{-1} \delta\chi(0)$. Então, a evolução temporal das trajetórias vizinhas ao ponto χ_0 é

$$\delta\chi(t) = V_0 S(t) V_0^{-1} \delta\chi(0). \quad (2.72)$$

O comportamento das trajetórias no entorno do ponto de equilíbrio corresponde a uma mistura de afastamentos e aproximações exponenciais. Dessa forma, as trajetórias se aproximam do ponto de equilíbrio a partir de uma das direções (correspondendo a direção do autovetor associado ao autovalor negativo) e se afastam pela outra direção (este, por sua vez, correspondendo a direção do autovetor associado ao autovalor positivo) a uma mesma taxa. O ponto de equilíbrio é classificado como instável (ou ponto de sela hiperbólico), pois quaisquer deslocamentos recaem sobre as trajetórias que se afastam do ponto de equilíbrio χ_0 .

Para o caso imaginário puro: são dois os autovetores, v e seu complexo conjugado v^* , além dos seus respectivos autovalores, $\lambda \equiv \pm i\theta$. Logo, ao escolher um deslocamento $\delta\chi$ na direção de v , tem-se

$$\dot{v} = Av = i\theta v \implies v(t) = v_0 e^{i\theta t}. \quad (2.73)$$

Como o autovetor v é complexo, o comportamento na vizinhança de χ_0 deve ser escrita como

$$\delta\chi(t) = \beta v(t) + \beta^* v^*(t) \equiv \alpha_1 u_1(t) + \alpha_2 u_2(t), \quad (2.74)$$

em que $\alpha_1 = 2Re(\beta)$, $\alpha_2 = 2Im(\beta)$ e

$$\begin{aligned} u_1(t) &= \frac{v_0 e^{i\theta t} + v_0^* e^{-i\theta t}}{2} \\ &= Im(v_0) \cos(\theta t) + Im(v_0) i \sen(\theta t) \end{aligned} \quad (2.75)$$

$$\begin{aligned} u_2(t) &= \frac{v_0 e^{i\theta t} - v_0^* e^{-i\theta t}}{2} \\ &= Im(v_0) \cos(\theta t) + Re(v_0) i \sen(\theta t) \end{aligned} \quad (2.76)$$

com, $u_1(0) = Re(v_0)$ e $u_2(0) = Im(v_0)$

Substituindo as equações (2.75) e (2.76) na equação (2.74), e reescrevendo-o em sua forma simplética, tem-se que

$$\begin{pmatrix} \delta q(t) \\ \delta p(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_{1q} & u_{2q} \\ u_{1p} & u_{2p} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \cos(\theta t) & i \sen(\theta t) \\ i \sen(\theta t) & \cos(\theta t) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \end{pmatrix} \equiv U_0 R(t) \alpha \quad (2.77)$$

em que $U_0 = \begin{pmatrix} u_{1q}(0) & u_{2q}(0) \\ u_{1p}(0) & u_{2p}(0) \end{pmatrix}$ e $R(t) = \begin{pmatrix} \cos(\theta t) & i \sen(\theta t) \\ i \sen(\theta t) & \cos(\theta t) \end{pmatrix}$.

A partir da equação (2.77), com $\delta\chi(0) = U_0 \alpha$, segue-se então que

$$\delta\chi(t) = U_0 R(t) U_0^{-1} \delta\chi(0). \quad (2.78)$$

O comportamento das trajetórias nas vizinhanças do ponto de equilíbrio corresponde a uma série de rotações no sistema de coordenadas $\delta\beta = U_0^{-1} \delta\chi$. Assim, o ponto de equilíbrio é classificado como estável ou elíptico, pois quaisquer deslocamentos permanecem rotacionando em torno de χ_0 .

Para uma melhor compreensão do comportamento das trajetórias nas vizinhanças de um ponto de equilíbrio, volta-se novamente a atenção ao pêndulo simples. Porém, desta vez, será analisado o comportamento das trajetórias no espaço de fases definido para esse pêndulo (ver figura 7).

Em um primeiro momento é observado na figura 7 o ponto 0, marcado sobre a origem do gráfico $\dot{\theta}$ em função de θ . Esse ponto corresponde a solução trivial ($\theta = 0$), onde o pêndulo permanece em repouso na vertical. Com isso, é definido um ponto de equilíbrio estável no espaço de fases, pois o comportamento das trajetórias nas vizinhanças deste ponto corresponde a uma série de rotações. Esse comportamento está associado ao movimento de oscilação do pêndulo. Já a família de curvas fechadas que circundam o

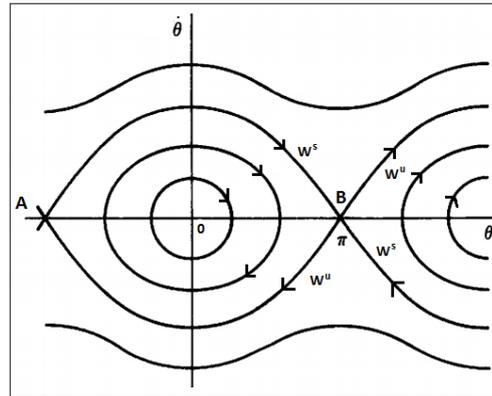


Figura 7: Espaço de fase para um pêndulo não linear.

ponto de equilíbrio estável representam os possíveis movimentos de oscilação do pêndulo para distintos valores de energia.

Os pontos A e B , descritos na figura 7, são definidos como pontos de equilíbrio instáveis do sistema. Logo, as duas curvas que passam pelos pontos A e B separam duas regiões que apresentam comportamentos qualitativamente distintos. No entorno do ponto de equilíbrio estável, na origem, a dinâmica é periódica e corresponde ao movimento de oscilação do pêndulo. Enquanto, no entorno dos pontos de equilíbrio instáveis, os pontos A e B , a dinâmica é ilimitada e corresponde ao movimento de rotação do pêndulo. Sendo assim, as curvas que separam essas duas regiões no espaço de fases são denominadas de separatrizes.

Seguindo essa análise, pode-se dizer que, as definições de variedades estáveis e instáveis são uma generalização do conceito de separatriz. As variedades de um sistema dinâmico são superfícies no espaço de fases que possuem a propriedade de que trajetórias que nela se iniciem, permaneçam nessa região durante a evolução do sistema. Assim, um conjunto invariante M é uma coleção de órbitas que formam essa superfície, de modo que as órbitas que se aproximam assintoticamente no tempo de uma variedade invariante são chamadas de variedades estáveis W^s . Analogamente, as órbitas que se afastam de M são ditas variedades instáveis W^u . Com isso, as variedades estáveis W^s e instáveis W^u de um conjunto invariante são definidas como:

1. a variedade estável W^s de um ponto de equilíbrio instável é o conjunto invariante² de pontos χ do espaço de fases, tal que à trajetória associada a evolução temporal de χ tende assintoticamente a esse ponto.

2. a variedade instável W^u de um ponto de equilíbrio instável é o conjunto invariante de pontos χ do espaço de fases, tal que a trajetória associada à evolução temporal de χ , quando propagada para trás no tempo, tende assintoticamente a esse ponto. Em

² Um conjunto (W^s ou W^u) é dito invariante quando todos os pontos $\chi \in W^s$ (ou W^u) são transportados pela dinâmica a outros pontos que também pertencem às variedades W^s (ou W^u).

outras palavras, os pontos estavam anteriormente próximos do ponto de equilíbrio.

2.6 Noção de Integrabilidade

Uma questão de grande importância em sistemas hamiltonianos refere-se a sua integrabilidade. A noção de integrabilidade de um sistema mecânico reside na possibilidade de resolução de suas equações de movimento. Para o oscilador harmônico com dois graus de liberdade, por exemplo, a energia total do sistema se distribui em duas partes que são conservadas independentemente. Nesse caso, são obtidas duas constantes de movimento independentes, o que possibilita reduzir a dimensão do espaço de fases até que o sistema possa ser resolvido via integração por quadraturas.

Em geral, um sistema hamiltoniano com dois graus de liberdade será integrável se existir uma segunda quantidade conservada além da energia. Embora, sistemas hamiltonianos com dois graus de liberdade não são, em geral, separáveis, pois existem acoplamentos entre os graus de liberdade. Logo, em sua maioria, sistemas com dois ou mais graus de liberdade não são integráveis. Parece, portanto, que a questão da integrabilidade dos sistemas hamiltonianos no n graus de liberdade está associada à existência de n constantes de movimento em involução, isto é,

- $\{F_i, H\} \equiv \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) = 0;$
- $\{F_i, F_j\} \equiv \sum_{i,j=1}^n \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_j} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_j} \right) = 0;$
- ∇F_i são vetores linearmente independentes.

Definição 1 (Involução). *As n variáveis dinâmicas $F_1(q, p), \dots, F_n(q, p)$ estão em involução se os colchetes de Poisson de quaisquer duas delas resulta nulo.*

Definição 2 (Colchetes de Poisson). *O colchete de Poisson $\{F, G\}$ de duas variáveis dinâmicas quaisquer F e G é definido por*

$$\{F, G\} \equiv \sum_{i=1}^n \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial G}{\partial q_i} \right). \quad (2.79)$$

A presença de constantes de movimento é de extrema importância para a resolução das equações de movimento do sistema, pois elas representam uma relação explícita entre as variáveis do problema, permitindo a redução do número de variáveis independentes. Em outras palavras, caso o sistema hamiltoniano possua um número suficiente de constantes de movimento, a dimensão do espaço de fases pode ser reduzida e as suas equações de movimento podem ser resolvidas.

O fato do sistema ser não-integrável implica na não existência de soluções para as suas equações de movimento em termos das condições iniciais e do tempo. Neste caso, a impossibilidade de encontrar soluções para as equações de movimento está intimamente ligada ao fato do sistema vir a exibir dinâmicas caóticas.

A integrabilidade de sistemas hamiltonianos é garantida através do teorema de Liouville-Arnold (para mais detalhes consultar o livro do Arnold [23]). Em linhas gerais, esse teorema fornece garantias de que um sistema hamiltoniano integrável com n graus de liberdade possa ter as suas equações de movimento resolvidas via operações algébricas e por quadraturas (cálculo de integrais conhecidas).

Em muitos casos as constantes de movimento podem ser expressas como função das variáveis canônicas q 's e p 's. Usualmente, essas constantes são denominadas de variáveis ação-ângulo. Neste caso, tem-se a ação como I_i , em que $i = 1, 2, \dots, n$, e associado a cada I_i existe outra variável denominada de variável ângulo, ϕ_i . Então, os \dot{I} 's e os $\dot{\phi}$'s são escolhidos como as novas equações de Hamilton (as equações de movimento), de modo que a sua forma matemática é expressa da seguinte forma:

$$\dot{\phi}_i = \frac{\partial H(I, \phi)}{\partial I_i} \quad (2.80)$$

e

$$\dot{I}_i = \frac{\partial H(I, \phi)}{\partial \phi_i}. \quad (2.81)$$

Se as equações (2.80) e (2.81) são satisfeitas, as variáveis I_i e ϕ_i são relacionadas as variáveis q_i e p_i por uma transformação canônica.

Teorema 1 (Teorema de Liouville-Arnold). *Considere um sistema hamiltoniano integrável com n graus de liberdade. Então,*

1. *Existem variáveis canônicas $(\phi_1, \dots, \phi_n, I_1, \dots, I_n)$ tais que $H = H(I_1, \dots, I_n)$, de modo que as equações de movimento possam ser solucionadas em termos das novas variáveis*

$$I_k = \text{constante}, \quad \phi_k = \phi_k(0) + \omega_k t, \quad k = 1, \dots, n; \quad \omega_k = \partial H / \partial I_k; \quad (2.82)$$

2. *As equações canônicas podem ser resolvidas por quadraturas;*

3. *A superfície n -dimensional M_c , definida por*

$$M_c = \{(q, p) \mid F_k(q, p) = C_k, \quad k = 1, \dots, n\}, \quad (2.83)$$

é um conjunto compacto e conexo³. Com isso, é possível fazer uma mudança nas variáveis canônicas, de modo a escolher as variáveis de ação-ângulo. Sendo assim, o movimento é dito multiperíodico e suas frequências são dadas por $\omega_k = \partial H / \partial I_k$.

³ O termo compacto, neste texto, tem o mesmo sentido do que fechado e limitado. Um espaço é dito conexo caso se permita passar de um ponto do espaço para qualquer outro ponto distinto por um movimento contínuo, sem sair dele.

As trajetórias de um sistema hamiltoniano integrável estão limitadas a uma região finita do espaço de fases, M_c , sendo esta uma variedade limitada e conexa, definida como o produto direto de n -círculos. A variedade, neste caso, pode ser descrita por n ângulos e coincide com um toro n -dimensional (T^n). Assim, dependendo do sistema ser ou não integrável, pequenos desvios tomados nas condições iniciais podem acarretar em grandes mudanças em seus estados finais.

Em determinados casos, o sistema hamiltoniano não integrável pode apresentar sensibilidade às condições iniciais. Logo, quando tomadas às evoluções temporais de duas condições iniciais arbitrárias, as trajetórias correspondentes podem apresentar desvios que aumentam exponencialmente após um intervalo de tempo característico. Contudo, se o sistema hamiltoniano é integrável, os desvios entre as trajetórias tendem a aumentar linearmente no decorrer do tempo. Portanto, a não integrabilidade do sistema parece estar intimamente ligada ao fato do sistema vir a exibir dinâmicas caóticas ou não. Deve-se salientar que apesar de exibir uma relação com o surgimento de dinâmicas caóticas no sistema hamiltoniano, a não integrabilidade não deve ser usada como um fator preponderante na indicação do caos.

2.7 Perturbação de Sistemas Integráveis

2.7.1 O Teorema KAM

Um questionamento que pode ser feito sobre a dinâmica de um sistema hamiltoniano integrável é o que ocorre com a integrabilidade do sistema quando adicionado um pequeno efeito perturbativo. Com isto, pode-se imaginar que a integrabilidade seja completamente destruída, de modo que não existam mais toros no espaço de fases. Contudo, deve-se tomar cuidado com tal afirmação, pois em certas condições, uma fração dos toros sobrevive aos efeitos de pequenas perturbações adicionadas ao sistema. Considere-se então o hamiltoniano de um sistema dinâmico conservativo com dois graus de liberdade

$$H(q_1, q_2, p_1, p_2) = H_0(q_1, q_2, p_1, p_2) + \varepsilon H_1(q_1, q_2, p_1, p_2). \quad (2.84)$$

O hamiltoniano (2.84) é composto por dois termos: um termo não perturbado e integrável H_0 e outro termo correspondente a uma pequena perturbação εH_1 . Como discutido na seção 2.2.1, em um sistema hamiltoniano integrável cada superfície de energia é decomposta por uma família de toros, e cada um desses toros é caracterizado por um número de rotação α .

Ao considerar a atuação do pequeno efeito perturbativo εH_1 , presume-se que todas as constantes de movimento com exceção da energia constante ($H = E$) sejam destruídas para $\varepsilon \neq 0$. Neste caso, se o sistema não é mais integrável nada se pode afirmar a

priori sobre quais os toros sobrevivem e quais são destruídos frente à adição da pequena perturbação.

A resposta dos toros racionais e irracionais frente à adição do pequeno efeito perturbativo no sistema ocorre de forma completamente distinta. Com a adição da perturbação é esperado que um tipo de ressonância⁴ ocorra sobre os toros, especificadamente sobre os toros racionais. Como será apresentado posteriormente, quaisquer perturbações aplicadas ao sistema, leva a destruição dos toros racionais, bem como a destruição dos toros situados em sua vizinhança. Assim, a estabilidade de um toro diante à ação de pequenas perturbações, depende somente do quão os toros sejam aperiódicos, ou seja, para uma razão α suficientemente irracional.

Uma forma de se analisar o efeito dessas pequenas perturbações aplicadas ao sistema é a partir do desenvolvimento de uma teoria perturbativa, uma delas é a teoria canônica da perturbação. As teorias da perturbações podem ser divididas em três regimes, dependendo somente das frequências não perturbadas do sistema ω_i e da frequência da perturbação ω_p . Neste caso, são observados os seguintes casos:

- i) $\omega_p \ll \omega_i$, para altas frequências de perturbações;
- ii) $\omega_p \gg \omega_i$, para baixas frequências de perturbações;
- iii) $\omega_p \sim \omega_i$, para teorias ressonantes.

Como pôde ser observado, a teoria canônica da perturbação funciona naqueles regimes onde $\omega_p \sim \omega_i$. Com isso, o hamiltoniano (2.84) do sistema sob efeito da pequena perturbação pode ser reescrito da seguinte forma

$$H(I, \phi) = H_0(I) + \varepsilon H_1(I, \phi) + \varepsilon^2 H_2(I, \phi) + \dots \quad (2.85)$$

em que $(I, \phi) = (I_1, I_2, \phi_1, \phi_2)$ são as variáveis ação-ângulo.

O hamiltoniano H na equação (2.85) depende das variáveis I e θ' . Portanto nem H nem I são constantes quando o sistema está sob efeito da pequena perturbação, o que leva o sistema a não ser mais integrável. Neste caso, busca-se a existência de uma nova ação S que seja constante. Isto é equivalente a introduzir uma nova transformação canônica $(I, \phi) \rightarrow (J, \theta')$, de modo que o novo hamiltoniano K dependa somente da variável J . Seja $S(J, \phi)$ a função geratriz do tipo F_2 para essa transformação, é assumido que, para valores de $\varepsilon \ll 1$, a transformação canônica deve ser aproximada por uma transformação

⁴ Neste caso, a ressonância esta relacionada com o fato da razão entre as frequências naturais do sistema “ α ” resultar em um número racional (do tipo $\alpha \equiv r/s$) ou irracional. Assim, os toros irracionais, ou seja, os toros não ressonantes, cujo valor de α seja próximo da razão r/s também são destruídos pela ação da perturbação.

identidade, de forma que a serie perturbativa pode ser escrita como

$$S(J, \phi) = J \cdot \phi + \varepsilon S_1(J, \phi) + \varepsilon^2 S_2(J, \phi) + \cdots, \quad (2.86)$$

em que $J \cdot \phi \equiv J_1 \phi_1 + \cdots + J_n \phi_n$.

A função S_1 na equação (2.86) deve ser escolhida de forma a eliminar a dependência angular do novo hamiltoniano K , (a fim de tornar o valor de θ' em uma constante). Com isso, as equações que definem a transformação canônica são dadas por

$$I_i = \frac{\partial S(J, \phi)}{\partial \phi_i} = J_i + \varepsilon \frac{\partial S_1(J, \phi)}{\partial \phi_i} + O(\varepsilon^2), \quad \text{e} \quad \theta'_i = \frac{\partial S(J, \phi)}{\partial J_i} = \phi_i + \varepsilon \frac{\partial S_1(J, \phi)}{\partial J_i} + O(\varepsilon^2). \quad (2.87)$$

O conjunto de equações (2.87) podem ser resolvidas em termos das coordenadas originais e em primeira ordem para ε , de modo que se tenha

$$I_i = J_i + \varepsilon \frac{\partial S_1(J, \theta')}{\partial \theta'_i} + O(\varepsilon^2) \quad \text{e} \quad \phi = \theta'_i - \varepsilon \frac{\partial S_1(J, \theta')}{\partial J} + O(\varepsilon^2). \quad (2.88)$$

Assim, a equação de Hamilton-Jacobi pode ser escrita como

$$K(J, \theta') = H \left(\frac{\partial S}{\partial \phi}, \phi \right). \quad (2.89)$$

Utilizando a equação (2.86) e substituindo-a na equação de Hamilton-Jacobi (2.89), chega-se a

$$K(J, \theta') = H_0 \left(J + \varepsilon \frac{\partial S_1}{\partial \theta'} + \varepsilon^2 \frac{\partial S_2}{\partial \theta'} + \cdots \right) + \varepsilon H_1 \left(J + \varepsilon \frac{\partial S_1}{\partial \theta'} + \varepsilon^2 \frac{\partial S_2}{\partial \theta'} + \cdots \right). \quad (2.90)$$

Com isso, a expressão (2.90) é expandida em série de Taylor, em primeira ordem de ε , de modo que

$$\begin{aligned} K(J, \theta') &= H_0(J) + \varepsilon \frac{\partial H_0}{\partial J} \frac{\partial S_1}{\partial \theta'} + \varepsilon H_1(J, \theta') + O(\varepsilon^2) \\ &= H_0(J) + \varepsilon \left[\omega(J) \frac{\partial S_1}{\partial \theta'} + H_1(J, \theta') \right] + O(\varepsilon^2) \\ &= K_0(J) + \varepsilon K_1(J, \theta') + O(\varepsilon^2) \end{aligned} \quad (2.91)$$

em que $\omega(J) = (\omega_1(J), \cdots, \omega_2(J))$ são as frequências do movimento perturbado, $K_0(J) = H_0(J)$ e $K_1 = \omega(J) \partial S_1 / \partial \phi + H_1(J, \phi)$.

A partir daí, é determinado o termo S_1 tal que se tenha a seguinte relação $K_1 = K_1(J)$. Para isso, a dependência angular será explicitada ao expandir S_1 e H_1 em série de Fourier, ou seja,

$$S_1(J, \theta') = \sum_{m=-\infty}^{\infty} S_{1m}(J) e^{im \cdot \theta'} \quad (2.92)$$

e

$$H_1(J, \theta') = \sum_{m=-\infty}^{\infty} H_{1m}(J) e^{im \cdot \theta'}, \quad (2.93)$$

onde $m = (m_1, m_2, \dots, m_n)$.

Posteriormente, as expressões (2.92) e (2.93) são substituídas no termo K_1 , e então chega-se a

$$K_1 = \sum_{m=-\infty}^{\infty} [im \cdot \omega(J) S_{1m} + H_{1m}] e^{im \cdot \theta'}. \quad (2.94)$$

e

$$S_{1m}(J) = i \frac{H_{1m}(J)}{m \cdot \omega(J)}. \quad (2.95)$$

O problema com a série em S_1 é em afirmar se os termos do somatório convergem. Em particular, a equação (2.95) se anula para a seguinte situação:

$$m \cdot \omega = (m_1 \omega_1 + m_2 \omega_2) = 0. \quad (2.96)$$

Dessa forma, é observada a condição de ressonância, em que os toros racionais são destruídos para qualquer perturbação ε .

Contudo, antes mesmo de fazer a escolha para as componentes de S_1 , deve ser observado se o movimento encontra-se em ressonância ou não. Como o valor das frequências ω_i depende dos valores de J , ou seja, o valor que especifica os toros do sistema não perturbado, deve-se especificar se o toro é ressonante (para um valor de $\alpha = r/s$, quando tem-se um toro racional) ou não-ressonante (para um valor de $\alpha = \omega_1/\omega_2$, quando tem-se um toro irracional).

Para o caso ressonante, é observado que o valor de m na expressão (2.96) não se anula apenas quando $m_1 = m_2 = 0$, mas também quando $m_1 = ps$ e $m_2 = -pr$, para qualquer valor inteiro positivo ou negativo de p . Com isso, o termo S_1 deve ser inteiramente modificado, de modo que o novo hamiltoniano K é substancialmente modificado (para maiores detalhes o leitor deve-se dirigir à referência [26]). O novo formato para o hamiltoniano está intimamente relacionado ao surgimento de ilhas ressonantes cercadas por regiões predominantemente caóticas, quando consideradas pequenas perturbações aplicadas ao sistema dinâmico.

Entretanto, para o caso não-ressonante é observado que

$$S_{1m}(J) = \begin{cases} i \frac{H_{1m}(J)}{m \cdot \omega(J)}, & m \neq 0 \\ 0, & m = 0 \end{cases} \quad (2.97)$$

Assim, para a escolha $m = 0$, todos os termos de K_1 são anulados, exceto H_{1m} .

Quando considerado um sistema dinâmico com dois graus de liberdade, por exemplo, o denominador que aparece em S_1 é do tipo

$$m \cdot \omega = m_1 \omega_1 + m_2 \omega_2 = m_1 \omega_2 \left(\frac{\omega_1}{\omega_2} - \frac{-m_2}{m_1} \right). \quad (2.98)$$

No caso não-ressonante, o número de rotação (α) é um número irracional. Apesar disso, é sabido que o conjunto dos números racionais é denso no conjunto dos números irracionais, de modo que qualquer número irracional pode ser tão bem aproximado por um número racional. Logo, existem números inteiros do tipo r e s , tal que a relação $|\omega_1/\omega_2 - r/s| < \delta$ seja satisfeita para qualquer valor de δ . Assim, conforme os valores dos m_i são somados, o denominador de S_1 pode ficar arbitrariamente pequeno e a série pode não convergir.

A convergência da série S_1 , neste caso, depende do quão rápido os termos de H_1 se aproximem de zero comparativamente a aproximação de α pelo número racional (m_1/m_2). Em outras palavras, a convergência ou não convergência da série S_1 depende do quão “distante” os toros irracionais estão dos toros racionais vizinhos. A convergência da série perturbativa, ou seja, a condição de sobrevivência para o toro após a adição da perturbação no sistema é precisamente fornecida através do teorema KAM. Esse teorema foi apresentado por Vladimir I. Arnold e Jurgen Moser, independentemente, em 1962 – 1963, a partir de sugestões feitas pelo matemático russo Andrei Kolmogorov em 1954, tornando-se assim o conhecido teorema Kolmogorov-Arnold-Moser ou simplesmente o teorema KAM.

A sua demonstração aponta que a série perturbativa converge para os toros irracionais, cujo número de rotação α é suficientemente distante de um número racional. Contudo, o teorema KAM apenas assegura a sobrevivência dos toros irracionais (ou seja, a permanência das trajetórias que estão dispostas sobre os toros irracionais) frente à adição de pequenas perturbações no sistema, de modo que nada se pode afirmar sobre o comportamento dos toros racionais que foram destruídos⁵.

No entanto, apesar da ideia de distância entre números racionais e irracionais possa parecer estranha, pois o conjunto dos racionais é denso no conjuntos dos irracionais de

⁵ Quando o termo “toro destruído” é utilizado, refere-se ao fato de que a trajetória não é mais propagada sobre a superfície do toro, porém ocupa um pequeno volume em torno do antigo toro.

modo que, todo número irracional pode ser tão bem aproximado o quanto se queira por um número racional. Seja um número irracional arbitrário, escrito como

$$\alpha = d_0.d_1d_2\cdots, \quad (2.99)$$

em que os termos d_i são inteiros entre 0 e 9, é possível reescrevê-lo como uma sequência de números racionais

$$d_0, \frac{d_0d_1}{10}, \frac{d_0d_1d_2}{100}, \cdots. \quad (2.100)$$

Nessa sequência, a distância entre o número irracional e sua aproximação racional é

$$(\alpha - r/s) < 1/s. \quad (2.101)$$

Contudo, existe outra forma mais precisa de formular uma aproximação racional para um número irracional. Esse método é conhecido como frações contínuas, e a partir dele um número irracional α pode ser escrito na seguinte forma

$$\alpha = a_0 + \frac{1}{a_1 + \frac{1}{a_2 + \frac{1}{\dots + \frac{1}{a_n}}}}, \quad (2.102)$$

em que os coeficientes a_i são inteiros maiores ou iguais a um se $i > 1$ e $a_0 \equiv \alpha$ é a parte inteira de α (que pode ser positiva, negativa ou nula).

O valor de α para um determinado número irracional converge rapidamente se a sequência a_1, a_2, \dots diverge rapidamente. Desse modo, o número mais irracional de todos é aquele cuja aproximação por um número racional é a mais lenta o possível, ou seja, quando todos os a_i forem iguais a 1.

O teorema KAM, neste caso, diz somente a respeito da série perturbativa, que converge para os toros irracionais cujo número de rotação α é o suficientemente distante de um número racional, ou seja, quando a seguinte relação é satisfeita

$$\left| \alpha - \frac{r}{s} \right| > \left| \frac{k(\varepsilon)}{s^{5/2}} \right|, \quad (2.103)$$

em que a constante k depende somente de ε , que tende a zero no limite $\varepsilon \rightarrow 0$.

O fator $k(\varepsilon)/s^{5/2}$ da equação (2.103) segue o formato $k(\varepsilon)/s^\beta$, com o valor de β dependendo do termo de H_0 . Então, quanto maior o valor de β menor a vizinhança removida próxima ao toro racional e o sistema é mais resistente a pequenas perturbações. Por outro lado, quanto menor for o valor de β , qualquer perturbação destrói uma grande fração dos toros, sendo esses os toros racionais e as suas vizinhanças.

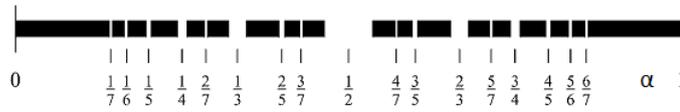


Figura 8: Intervalo de valores de α (número de rotação) definidos entre 0 e 1. Neste caso, cada valor de α , racional ou irracional, correspondente as trajetórias periódicas e quase-periódicas dispostas sobre os toros. O intervalo restante, denotado pelos intervalos em preto, correspondem aos toros que sobrevivem ao pequeno efeito perturbativo.

Como uma forma de estimar a fração de toros que sobrevivem frente à adição do pequeno efeito perturbativo no sistema, deve-se supor, como analogia, que os toros em uma determinada camada de energia tenham a razão α variando entre 0 e 1. Nesse caso, como observado na figura 8, são retirados todos os valores de α que correspondem à um número racional, bem como todos os valores de sua vizinhança que estejam compreendidos no intervalo de comprimento $k(\varepsilon)/s^{5/2}$. Neste caso, estendendo essa analogia para um sistema hamiltoniano, tem-se como resultado que os toros irracionais cujo número de rotação é mais distante de um número racional sobrevivem à uma pequena perturbação aplicada ao sistema.

2.7.2 Teorema de Poincaré-Birkhoff

De acordo com o teorema KAM, a maior parte dos toros irracionais de um sistema integrável acaba sobrevivendo frente à adição de uma pequena perturbação no sistema. Porém, esse teorema nada afirma sobre o comportamento das trajetórias que estão dispostas sobre os toros racionais, ou seja, os toros cuja razão α entre as frequências do sistema resultam em um número racional.

A resposta do que vem a ocorrer às trajetórias que estão dispostas sobre os toros racionais, frente à adição da perturbação, pode ser obtida através do teorema de Poincaré-Birkhoff. Para isso, considere-se um sistema hamiltoniano integrável com dois graus de liberdade, de tal modo que a sua dinâmica pode ser descrita através do mapa $M_0(\alpha)$ (o índice subscrito 0 indica um mapa não perturbado).

O mapa $M_0(\alpha)$ surge a partir das sucessivas intersecções das trajetórias com a seção de Poincaré. Ao supor uma simples mudança de coordenadas, os toros construídos a partir das sucessivas intersecções das trajetórias com a seção são tomados como circunferências concêntricas. É possível assim representá-las através das coordenadas polares ρ e θ , de modo que se tenha

$$\rho_{n+1} = \rho_n \quad (2.104)$$

$$\theta_{n+1} = \theta_n + 2\pi\alpha(\rho_n), \quad (2.105)$$

Ou ainda reescrevendo-o em sua forma matricial:

$$\begin{pmatrix} \rho_{n+1} \\ \theta_{n+1} \end{pmatrix} = M_0(\alpha) \begin{pmatrix} \rho_n \\ \theta \end{pmatrix}. \quad (2.106)$$

O mapa descrito pela expressão (2.106) é então aplicado “ s ” vezes sobre a circunferência de raio $\rho = \hat{\rho}(r/s)$ retornando todos os pontos em sua posição inicial. Dessa forma, os círculos são ditas curvas invariantes. Logo, quando aplicado o mapa M_0^s , todo o ponto marcado sobre a interseção de um toro ressonante $\hat{\rho}(r/s)$ com a superfície de energia é considerado um ponto fixo.

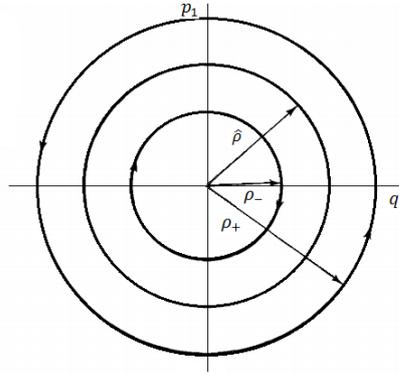


Figura 9: Curvas invariantes do mapa não-perturbado. Figura adaptada de Ott [27].

Considere-se então um sistema não perturbado, de modo que a uma circunferência definida por $\rho = \rho_+ > \hat{\rho}$ é rotacionada pelo mapa $M_0^s(\alpha)$ no sentido anti-horário. Ademais, tomando uma segunda circunferência sobre o raio $\rho = \rho_- < \hat{\rho}$, a aplicação do mapa rotaciona os pontos no sentido horário. A partir da aplicação do mapa $M_0^s(\alpha)$, as curvas fechadas são deformadas em circunferências, porém, o ângulo de rotação $\alpha(\rho_n)$ continua dependendo do raio ρ . A partir da periodicidade observada para as trajetórias que estão dispostas sobre o toro de raio ρ é definido o mapa denominado de mapa de torção $M_0(\alpha) = M_0^s(\alpha) = M_0(s\alpha)$.

Considerando-se agora a aplicação de uma pequena perturbação no sistema hamiltoniano integrável, de modo que é definida a aplicação do mapa $M_\varepsilon(\alpha)$ sobre o sistema. Assim, é esperado que toros ainda permaneçam invariantes. Entretanto, é de se imaginar que para pequenos valores de ε os pontos sobre a circunferência de raio $\rho_+ > \hat{\rho}$ sejam mapeados por $M_\varepsilon^s(\alpha)$ no sentido anti-horário, enquanto os pontos sobre a circunferência de raio $\rho_- < \hat{\rho}$ sejam mapeados por $M_\varepsilon^s(\alpha)$ no sentido horário, embora ρ não permaneça mais constante.

Os pontos que estão sobre a circunferência de raio $\rho_+ > \hat{\rho}$ são mapeados por $M_\varepsilon^s(\alpha)$ a esquerda, enquanto os pontos que estão sobre a circunferência de raio $\rho_- < \hat{\rho}$ são mapeados por $M_\varepsilon^s(\alpha)$ à direita. Então, deve existir um conjunto de pontos definidos em ρ que são invariantes sobre rotação.

Após a obtenção do conjunto de pontos que são invariantes sobre rotação, quando aplicado o mapa $M_\varepsilon^s(\alpha)$ sobre os pontos que estão distribuídos ao longo da circunferência definida pelo ângulo θ_1 (ver figura 10), é gerada a curva invariante ρ_ε . Assim, ao aplicar o mapa $M_\varepsilon^s(\alpha)$ os pontos marcados ao longo da circunferência definida pelo ângulo θ_1 são marcados sobre a nova curva invariante, apenas ao longo da direção radial.

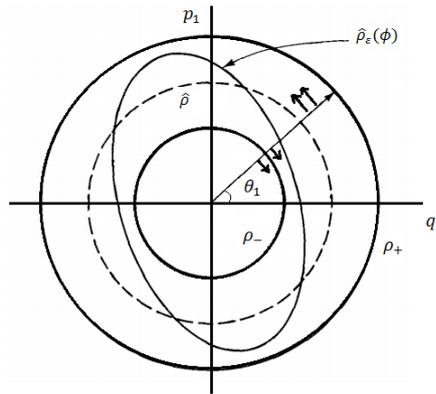


Figura 10: Mapa de torção do sistema perturbado: os círculos invariantes do mapa. As setas presentes nesta figura indicam a direção do movimento radial sobre a curva. Figura adaptada de Ott [27]

A partir da aplicação do mapa $M_\varepsilon^s(\alpha)$ sobre os pontos pertencentes à curva ρ_ε , é gerada uma nova curva ρ'_ε , como pode ser visto na figura 11. Logo, de acordo com a preservação de áreas, as áreas envolvidas pelas curvas ρ_ε e ρ'_ε são iguais, de modo que, caso seja observada uma compressão em determinados trechos da curva ρ_ε a partir da aplicação do mapa $M_\varepsilon^s(\alpha)$, tantos outros devem se esticar a fim de preservar a área inicial.

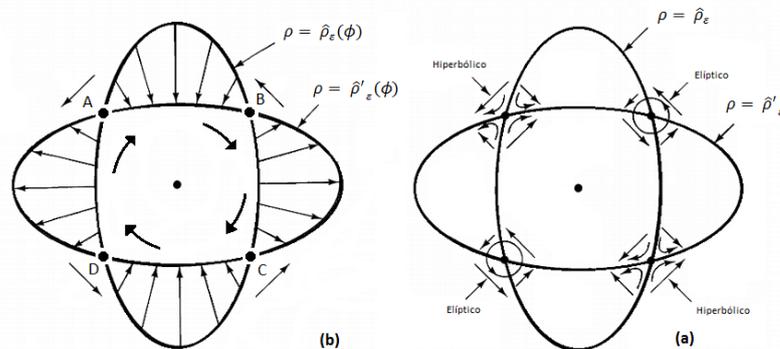


Figura 11: (a) Pontos sobre a curva $\rho = \hat{\rho}$ mapeadas sobre $M_\varepsilon^s(\alpha)$ radialmente para $\rho = \hat{\rho}'_\varepsilon$. (b) Ilustração do teorema de Poincaré-Birkhoff. Figura adaptada de Ott [27].

Na figura 11.(a), as intersecções das curvas $\rho = \hat{\rho}_\varepsilon$ e $\rho = \hat{\rho}'_\varepsilon$ correspondem aos pontos fixos obtidos pela aplicação do mapa $M_\varepsilon^s(\alpha)$, pois não sofrem nenhum tipo de movimento radial. Com isso, para o mapa não perturbado, apresentado na figura 10, conclui-se que o círculo $\rho = \hat{\rho}(r/s)$, que contém os pontos fixos do sistema, é substituído por um número par de pontos fixos quando o sistema é perturbado. Em outras palavras, em um sistema integrável, os toros racionais antes cobertos por órbitas periódicas são substituídos por um número par de órbitas periódicas, em que metade das órbitas são estáveis e metade são instáveis. Esse resultado é destacado na figura 11.b, e é essencialmente conhecido como o teorema de Poincaré-Birkhoff.

Em uma análise mais detalhada sobre a estabilidade dessas órbitas, pode-se observar o comportamento das trajetórias no entorno dos pontos de equilíbrio, como indicado pelas setas na figura 11. Dessa forma, é possível visualizar um fluxo rotacional nas vizinhanças dos pontos fixos estáveis B e D , pois as órbitas vizinhas permanecem no entorno dos dois pontos fixos. Por outro lado, o fluxo na vizinhança dos pontos fixos instáveis A e C tende a afastar as órbitas periódicas do entorno desses dois pontos.

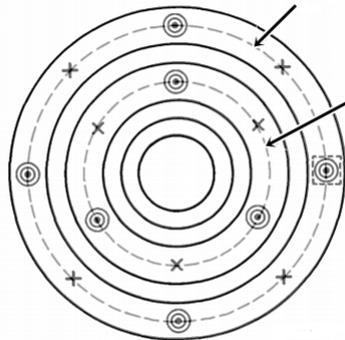


Figura 12: A partir da aplicação de uma pequena perturbação no sistema, pode-se observar a destruição dos toros racionais no espaço de fases do sistema dinâmico, como indicado pelas setas. Na região demarcada pelo quadrado é representada uma ilha de regularidade. Figura adaptada de Ott [27].

A teoria da perturbação desenvolvida na seção 2.7 prevê que o comportamento nas vizinhanças de um toro racional é modificado. Tal fato pode ser visualizado com mais detalhes na figura 12. Assim, o conjunto de órbitas periódicas que antes cobria o toro é substituído por uma cadeia de ilhas que possui, em geral, apenas duas órbitas periódicas: uma estável no centro da ilha e outra instável nos extremos da ilha.

O comportamento das trajetórias nas vizinhanças do centro de umas dessas ilhas é constituído por uma série de curvas elípticas. As ilhas que rodeiam os pontos fixos estáveis são também toros, denominados de toros secundários, pois surgem devido ao efeito da perturbação. Dentro dessas ilhas estáveis há uma repetição do procedimento,

de modo que surgem novos toros terciários circundando o ponto central da ilha e assim sucessivamente.

Como resultado tem-se uma estrutura extremamente rica em detalhes constituída por um conjunto de ilhas fractais, ou seja, forma-se uma estrutura fractal de ilhas dentro de ilhas. A largura dessas ilhas não apenas diminui com o valor de ε , mas também com a ordem da ressonância (ver seção 2.7.1), ficando cada vez menores à medida que se altera a escala observada. No entanto, a estrutura representada na figura 12 é apenas uma aproximação de um fractal, pois a repetição de ilhas ocorre de uma forma complexa e a autossimilaridade não é exata.

2.8 Emaranhamento Homoclínico

Até então, o que fora observado é que quando adicionado um pequeno efeito perturbativo no sistema os toros racionais são destruídos e substituídos por um número par de órbitas periódicas (pontos fixos estáveis e instáveis). A presença de pontos fixos instáveis, ou hiperbólicos, é vista como de grande influência sobre a dinâmica, pois eles tipicamente resultam em pontos homoclínicos e heteroclínicos. Contudo, antes mesmo de definir o que vem a ser esses pontos e o comportamento das trajetórias em suas vizinhanças, faz-se necessário redefinir os conceitos de variedades estáveis e instáveis, neste caso, quando considerada a aplicação do mapa $M_\varepsilon(\alpha)$ (como apresentado na seção 2.7.2) num sistema não perturbado.

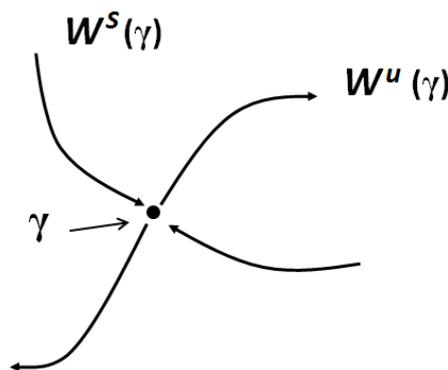


Figura 13: Variedades estáveis e instáveis de um ponto de equilíbrio instável γ . Figura retirada de Ott [27].

A variedade estável W^s de um ponto de equilíbrio instável γ é definida como o conjunto invariante de pontos no espaço de fases que tende assintoticamente ao ponto fixo instável. Enquanto a variedade instável W^u de um ponto de equilíbrio instável é definida como o conjunto de pontos invariantes que, se aplicada uma reversão temporal, tende ao ponto de equilíbrio, como visto na figura 13. Uma propriedade importante das variedades

estáveis e instáveis é que elas não podem interseccionar consigo mesma, devido à unicidade das soluções. Na figura 14.(a) é observado o ponto homoclínico O no cruzamento das variedades estáveis e instáveis de um ponto fixo hiperbólico γ . Já na figura 14.(b) é observado um ponto heteroclínico que é definido pelo cruzamento das variedades instáveis e estáveis de dois pontos fixos hiperbólicos quaisquer, γ_1 e γ_2 .

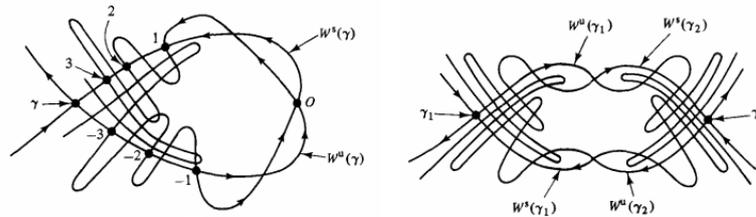


Figura 14: Variedades estáveis e instáveis de um ponto fixo γ de um mapa bidimensional. Figura adaptada de Ott [27].

Considere-se a aplicação do mapa $M_\varepsilon(\alpha)$ sobre o ponto O situado sobre a intersecção entre as variedades instáveis e estáveis. Como as variedades são invariantes, o ponto O é mapeado novamente sobre o cruzamento das variedades W_s e W_u , tornando-o em um novo ponto homoclínico. Esse mesmo efeito é observado com a aplicação do mapa $M_\varepsilon(\alpha)$ sobre os novos pontos gerados a partir do ponto homoclínico O . Assim, ao mapear o ponto O para frente no tempo é observada uma aproximação ao ponto fixo hiperbólico γ ao longo da variedade estável, respectivamente pelo pontos 1, 2 e 3, como denotado na figura 14.(a). Da mesma forma, esse procedimento é repetido, porém o ponto O é mapeado para trás no tempo, o que ocasiona em uma aproximação ao ponto fixo hiperbólico γ , através dos pontos -1 , -2 e -3 ao longo da variedade instável, tal como denotado na figura 14.(a).

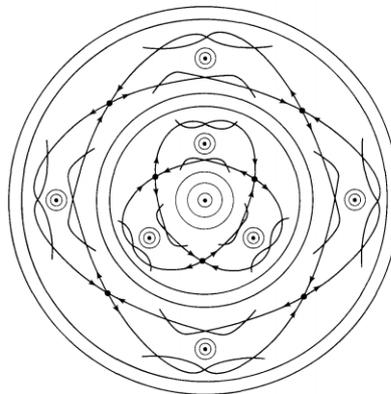


Figura 15: Variedades estáveis e instáveis de órbitas periódicas hiperbólicas, onde pode-se visualizar o emaranhamento. Figura adaptada de Ott [27].

A partir da aplicação do mapa $M_\varepsilon(\alpha)$ é formada uma figura bastante complexa, em que suas formas ficam cada vez mais alongadas e retorcidas, pois os pontos localizados sobre os cruzamentos das variedades estáveis e instáveis ficam cada vez mais próximos. O efeito de alongar e esticar observado no cruzamento das variedades faz com que pontos inicialmente próximos sejam conduzidos a posições ora distantes ora muito próximos, e isso pode ser traduzido como o surgimento da sensibilidade às condições iniciais.

Como pode ser observado na figura 15, a variedade instável, assim como a variedade estável, formam emaranhamentos homoclínicos em seus pontos de cruzamento, sendo que esses são os responsáveis pelo surgimento de dinâmicas irregulares ou caóticas. Nesse caso, é visto que a partir da adição de um pequeno efeito perturbativo em sistemas hamiltonianos integráveis, parte da integrabilidade é destruída, o que pode levar ao surgimento de uma dinâmicas caóticas. A partir dessa nova perspectiva, pode-se dar um maior enfoque ao estudo do comportamento do caos em sistemas dinâmicos, e esse será o objeto de estudo nos próximos capítulos, mais especificadamente quando considerada a análise de sistemas dinâmicos que exibem espalhamento classicamente caóticos.

3 Espalhamento Classicamente Caótico

Neste capítulo, serão apresentadas e analisadas as características de sistemas que exibem espalhamento classicamente caótico. Em especial, nesse tipo de sistema, pode-se presenciar um tipo de manifestação do caos denominada de caos transiente. Com isso, os métodos utilizados na caracterização do caos podem também ser estendidos a tal sistema. A análise de dinâmicas caóticas por meio desses métodos permite a sua caracterização como caótica ou regular [29]. Posteriormente, são apresentados alguns desses métodos, tais quais: a taxa de escape, o expoente de Lyapunov (para longos intervalos de tempo) e a dimensão fractal. Além disso, tomando como exemplo o lançamento de partículas no interior de uma caixa bidimensional contendo ou não um obstáculo localizado em seu centro e o espalhamento de átomos de hélio em uma superfície de cobre [18] [19], são apresentados os regimes e aspectos de sistemas dinâmicos que apresentam espalhamento caótico. Finalizando este capítulo, será descrita a caracterização do espalhamento entre átomos de hélio e uma superfície de cobre, através dos métodos da dimensão de incerteza [7] e do “Smaller Alignment Index” (*SALI*) [22].

3.1 O Caos Transiente

Um sistema pode ser definido a partir de um conjunto de objetos agrupados que interajam mutuamente. Logo, o sistema é dinâmico se alguma das grandezas que caracterizam os objetos que o constitui variam no decorrer do tempo. Os sistemas dinâmicos podem ser definidos através de uma descrição matemática determinística que envolve as variáveis dependentes do tempo e a variável independente, o tempo [30] [31] [32] [27]. Nesse caso, o tempo em sistemas dinâmicos pode ser uma variável contínua ou discreta. Se o tempo for uma variável discreta é assumido que t é um número inteiro e sua evolução é governada por um conjunto de equações de diferenças finitas, também denominada de mapa. Caso o tempo seja uma variável contínua, t é um número real e a sua evolução é dada por um conjunto de equações diferenciais.

Um modo de classificar um sistema dinâmico é quanto a sua linearidade ou não linearidade. Para um sistema dinâmico linear, a resposta obtida a partir de perturbações aplicadas ao sistema pode ser construída separadamente e depois combinada linearmente, de modo que esta característica venha a constituir o princípio de superposição. Em outras palavras, as equações diferenciais de ordem n podem ser reescritas como uma combinação linear dos termos $q(t)$, $dq(t)/dt$, \dots , $d^n q(t)/dt^n$. A vantagem de se trabalhar com sistemas dinâmicos lineares é que o modelo matemático que caracteriza o sistema é descrito por um conjunto de equações lineares que geralmente são resolvidas analiticamente. Portanto,

é possível determinar o comportamento futuro do sistema de forma exata.

A análise sobre o comportamento das soluções de sistemas dinâmicos lineares é de grande importância para o estudo de sistemas não lineares. Para os sistemas dinâmicos não lineares, diferentemente dos sistemas dinâmicos lineares, não é possível obter as soluções do sistema de forma analítica. Porém, sob determinadas condições, um sistema não linear pode ser aproximado em torno de um ponto de equilíbrio por um sistema linear. Este procedimento é conhecido como linearização. Ao realizar o estudo de sistemas dinâmicos não-lineares através da linearização, pode-se, às vezes, prever o comportamento de suas soluções nas vizinhanças do ponto de equilíbrio. Apesar disso, nenhum comportamento não-local, muito menos global do sistema, pode ser predito pelo modelo de linearização.

A vantagem do uso de sistemas não lineares é que eles se apresentam como uma descrição mais próxima da realidade, caracterizando-se como uma melhor adequação para os fenômenos da natureza. De um modo geral, a não linearidade das equações diferenciais de um sistema dinâmico pode ser geométrica ou física. A não linearidade geométrica está associada a restrições implícitas ao movimento, enquanto a não linearidade física é associada ao comportamento do sistema.

A não linearidade das equações de movimento de um sistema dinâmico é uma condição necessária, mas não suficiente, para o surgimento do caos no sistema. O caos, neste caso, é determinístico, ou seja, pode ser visto como resultado da natureza determinística das leis de evolução temporal das condições iniciais no espaço de fases. Assim, um sistema caótico determinístico é entendido como um sistema regido por regras bem definidas para sua evolução temporal. Essas regras, sejam elas equações diferenciais ou mapas (equações de diferenças finitas), permitem determinar o valor das variáveis que descrevem o sistema a partir de um conjunto de condições iniciais [33].

As trajetórias obtidas a partir da evolução temporal do sistema dinâmico são instáveis, de modo que pequenas incertezas nas condições iniciais levam, após um intervalo de tempo característico, as trajetórias a divergirem exponencialmente no espaço de fases. Esse tipo de comportamento pode ser ilustrado na figura 16, no qual pode-se observar às evoluções temporais das coordenadas espaciais z de dois átomos de hélio que incidem sobre uma superfície de cobre. Os átomos inicialmente estão próximos, contudo após um intervalo de tempo interagindo com a superfície espalhadora passam a exibir trajetórias distintas. Esse comportamento observado na evolução temporal da coordenada espacial z sugere a divergência das trajetórias no espaço de fases e a sensibilidade do sistema as condições iniciais [26] [28] [34]. Em razão disso, um sistema caótico determinístico pode apresentar imprevisibilidade em seu comportamento quando considerado um intervalo de tempo suficientemente longo [35].

Para a determinação teórica da evolução temporal das grandezas que caracterizam um sistema dinâmico, faz-se necessário conhecer as regras que governam essa evolução.

Nesse caso, é observada a existência de três técnicas que possibilitam a investigação do comportamento de um sistema dinâmico:

1) na técnica analítica, as equações são integradas analiticamente e determina-se a solução em termos de fórmulas gerais. A vantagem dessa técnica é que são obtidas expressões que valem para quaisquer condições iniciais. A desvantagem é que nem sempre é possível realizar a integração analítica;

2) na técnica numérica, as equações são integradas numericamente, e os valores para as variáveis dependentes do tempo são calculadas em pontos pré-selecionados da variável independente t . A principal vantagem dessa técnica é que os cálculos podem ser feitos através da computação numérica. Porém, a desvantagem está no fato de que a solução obtida para as equações é sempre aproximada, valendo apenas para determinados valores de condições iniciais. Uma simples mudança nesses valores e é necessário integrar novamente as equações diferenciais do sistema;

3) a técnica qualitativa se baseia na descrição do estado do sistema, os seus resultados são representados no espaço de fases. A vantagem de utilizar essa técnica é que se tem uma ideia qualitativa da evolução temporal do sistema. Enquanto a desvantagem do seu uso, é que parte da informação da evolução temporal das condições iniciais é perdida.

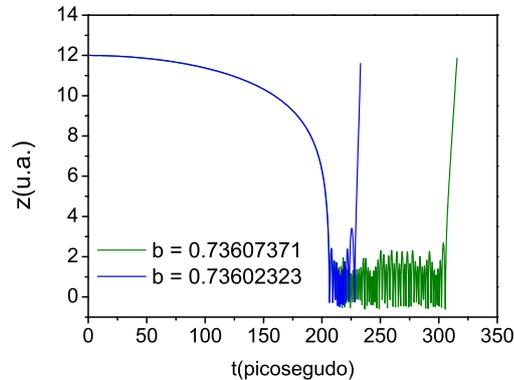


Figura 16: Evolução temporal de duas condições iniciais vizinhas, considerando-se um problema de espalhamento hélio-cobre ($Cu(110)$) a uma energia fixa de incidência de 21 meV e ângulo de incidência próximo de 90° (ver seção 3.3.3).

As principais diferenças entre as dinâmicas regulares e caóticas em um sistema dinâmico são apresentadas com auxílio do modelo físico proposto por Blümel *et al.* [36]. Nesse modelo são consideradas as colisões elásticas de partículas massivas no interior de uma caixa bidimensional quadrada, contendo ou não um disco localizado em seu centro. Como pode ser visto na figura 17, uma partícula de massa M é lançada no interior da caixa na posição inicial L , definida na parede nomeada pelo índice “ d ”, com coordenadas $x = 0$ e $y = 1/2$, velocidade \vec{v} e um ângulo de incidência φ tomado com respeito ao eixo x .

Com a ausência do disco no processo de interação entre a partícula e as paredes internas da caixa, após sucessivas colisões a partícula tem registrada a sua saída ao retornar à parede “ d ”, tal como pode ser visualizado na figura 17. Logo, é possível determinar o intervalo de tempo de interação entre a partícula e as paredes internas da caixa e a sua respectiva posição final, relacionando-os com o ângulo de incidência através da função de espalhamento. Como visto na introdução dessa dissertação, a função de espalhamento pode ser obtida através de uma relação entre as variáveis de saída (caracterizando o estado final do sistema) e as variáveis de entrada (estas, por sua vez, caracterizando as condições iniciais do sistema).

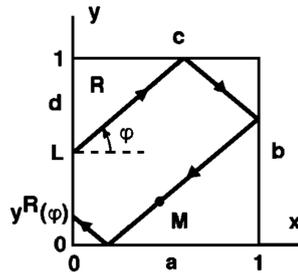


Figura 17: Representação da dinâmica regular de uma partícula de massa M , obtida a partir de suas interações com as paredes internas da caixa bidimensional quadrada. Tendo a sua respectiva trajetória iniciada a partir da posição L , definida na parede nomeada pelo índice “ d ”, com coordenadas $x = 0$ e $y = 1/2$, velocidade \vec{v} e um ângulo de incidência arbitrário φ . Figura retirada de Blümel *et al.* [36].

Uma consequência das sucessivas colisões entre a partícula e as paredes da caixa é que a função de espalhamento para o caso regular pode ser obtida analiticamente, levando-se em consideração apenas a geometria do problema. Para este caso, a função de espalhamento é apresentada no gráfico $Y^R \times \varphi$, na figura 18. Esse gráfico exibe picos que ocorrem para $\varphi = \arctan\left(\frac{2n-1}{4}\right)$, com $n = 1, 2, \dots$, e que se acumulam em uma região próxima a $\varphi = \pi/2$. A acumulação dos picos pode ser claramente observada a partir da magnificação (ou ampliação) do fator de escala da região entre os valores $\varphi = 1.4 \text{ rad}$ e $\varphi = 1.52 \text{ rad}$, como representada na figura 18.(b).

Considere agora a situação apresentada na figura 19, em que será utilizada a mesma caixa do exemplo acima, porém equipada com um disco localizado em seu centro. Com a inclusão do disco, deve-se notar que as colisões não ocorrem somente entre a partícula e as paredes internas da caixa, mas também ocorrem entre a partícula e o disco. Na figura 19.(a) é observado o lançamento de uma partícula arbitrária com um ângulo de incidência de $\varphi = 0.69 \text{ rad}$, enquanto na figura 19.(b) é observado o lançamento de uma segunda partícula, porém considerando-se um ângulo de incidência diferente do lançamento anterior. Com isso, é possível notar que o comportamento distinto observado para os dois lançamentos ilustrados na figura 19.(a) e (b) está relacionado a sensibilidade as condições iniciais.

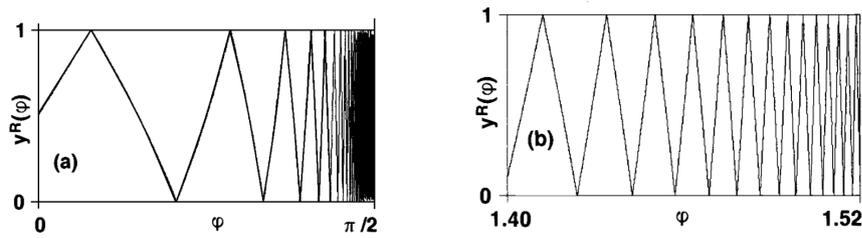


Figura 18: Função de espalhamento $Y^R(\varphi)$ correspondente as colisões regulares entre a partícula e as paredes internas da caixa. (a) Intervalo completo de ângulos $0 < \varphi < \pi/2$. (b) Magnificação (ampliação) da região do intervalo entre $1.4 \text{ rad} \leq \varphi \leq 1.52 \text{ rad}$. Figura retirada de Blümel *et al.* [36].

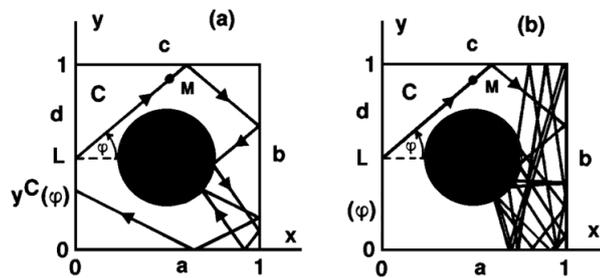


Figura 19: Representação da dinâmica irregular de uma partícula de massa M , obtida a partir de suas interações com as paredes internas da caixa bidimensional quadrada contendo um disco localizado em seu centro. (a) Lançamento de uma partícula com um ângulo de incidência $\varphi = 0.69 \text{ rad}$. (b) Lançamento de uma partícula com ângulo de incidência $\varphi \approx 0.692 \text{ rad}$. Figura retirada de Blümel *et al.* [36].

Considerando-se o espalhamento entre a partícula, as paredes internas da caixa e o disco, a dinâmica do espalhamento é caótica e a função de espalhamento não pode mais ser deduzida analiticamente como no caso regular. Neste caso, é observado o surgimento de regiões de singularidades na função de espalhamento. Uma particularidade dessas regiões é que quando ampliadas mostram a repetição de suas estruturas, ou seja, uma repetição das regiões de singularidades sobre diversas escalas. A princípio, devido a essa complexidade, as regiões de singularidades da função de espalhamento não podem ser analisadas. Logo, a presença desses aspectos indicam uma possível característica fractal dessa região.

Na figura 20 é possível observar o gráfico da função de espalhamento obtida para as dinâmicas caóticas entre as partículas, o disco e as paredes internas da caixa. Com isso, é possível observar nessa figura, a presença de singularidades somente em determinadas regiões da função de espalhamento. Neste caso, na figura 20.(b) é destacada a magnificação de uma determinada região da figura 20.(a), mais especificadamente, o intervalo $0.44 < \varphi < 0.60$, em que é observada a repetição das regiões de singularidades.

O surgimento de regiões de singularidades S está associado a existência de deter-

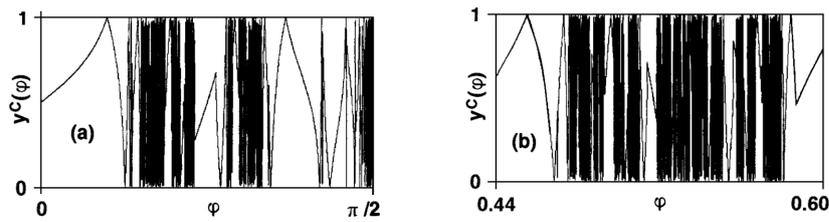


Figura 20: Função de espalhamento $Y^C(\varphi)$ correspondente as colisões irregulares entre a partícula, as paredes internas da caixa e o disco localizado em seu centro. (a) Função de espalhamento obtida para ângulos de incidência situados no intervalo de $0 < \varphi < \pi/2$. (b) Magnificação (ou ampliação) de uma determinada região da função de espalhamento, em destaque o intervalo $0.44 \text{ rad} \leq \varphi \leq 0.6 \text{ rad}$. Figura retirada de Blümel *et al.* [36].

minados valores de ângulos de incidência φ^S , isto é, depende implicitamente das variáveis de entrada do sistema. Como visto anteriormente, a visualização das regiões de singularidade pode ser feita através da função de espalhamento. Uma função desse tipo, que relaciona as variáveis de saída com as variáveis de entrada, pode ser construída também através do gráfico relacionando o tempo médio de permanência das partículas na região de interação l com o ângulo de saída φ das partículas. Nesse gráfico, como ilustrado na figura 21, é possível observar uma alternância entre as regiões suaves (correspondente as regiões contínuas) e às regiões de singularidades (correspondentes as regiões descontínuas). Um aspecto observado a partir da função $l(\varphi)$ é que as regiões de singularidades estão associadas ao fenômeno do aprisionamento de partículas na região de interação [37], [3], ou seja, enquanto a partícula permanece colidindo entre as paredes internas da caixa e o disco (exceto a parede com índice “ d ”).

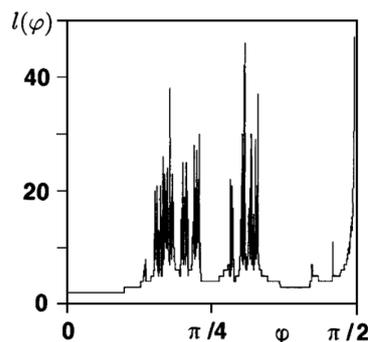


Figura 21: Função de espalhamento obtidas para as dinâmica caótica observadas para o espalhamento de partículas no interior da caixa contendo um disco em seu centro. Neste caso, pode-se verificar a presença de singularidades na função de espalhamento. Figura retirada de Blümel *et al.* [36].

A partir da descrição de interação entre as partículas lançadas no interior da caixa contendo ou não um obstáculo em seu interior, foi possível distinguir as principais diferenças qualitativas entre as dinâmicas regulares e caóticas para o espalhamento. Para

dinâmicas caóticas foi observado que, em determinadas circunstâncias, o comportamento caótico pode ocorrer por curtos intervalos de tempo, vindo a caracterizar um tipo de caos denominado como caos transiente [38] [39] [40]. Logo, é possível definir alguns aspectos que possibilitam a caracterização do caos transiente em sistemas dinâmicos, e mais especificadamente em sistemas dinâmicos que apresentam espalhamento:

1) em um sistema que apresenta sensibilidade às condições iniciais, as trajetórias iniciadas a partir destas condições passam a exibir uma dinâmica caótica por um intervalo de tempo arbitrário;

2) a distribuição de probabilidade $P(t)$ de encontrar trajetórias que permanecem aprisionadas por longos períodos de tempo é uma função que satisfaz a condição $P(t) \rightarrow 0$, quando $t \rightarrow \infty$.

A presença do caos transiente em sistemas dinâmicos está associada à existência de selas caóticas em seu espaço de fases [41]. Uma característica da sela caótica é que ela não atrai as trajetórias que são iniciadas em sua vizinhança, sendo então denominada como um conjunto caótico não atrator. Com a presença de selas caóticas no espaço de fases de um sistema dinâmico, as trajetórias que se aproximam das vizinhanças da sela lá permanecem por um intervalo de tempo arbitrário, exibindo as propriedades caóticas da sela ao abandoná-la [42].

3.2 Caracterização do Caos Transiente

Para a caracterização do caos transiente serão apresentados alguns métodos que permitem a distinção entre dinâmicas caóticas e dinâmicas regulares em sistemas dinâmicos, a saber: i) as medidas da probabilidade do tempo de sobrevivência das partículas, como o tempo médio de vida, ou seja, a taxa de escape das partículas [38]; ii) e a determinação dos invariantes dinâmicos, tais quais o expoente de Lyapunov [43] [44] e a dimensão fractal [45] [46]. Posteriormente, será apresentado mais um destes invariantes dinâmicos (ou seja, indicadores que medem característica inerentes ao sistema dinâmico), as medidas do *SALI* [47] [48]. Em especial, essa medida permite a detecção do caos em sistemas dinâmicos e, neste trabalho, em particular, será aplicado no sistema de espalhamento classicamente caótico hélio-cobre.

3.2.1 Taxa de Escape

Em sistemas que exibem espalhamento caótico é possível inserir uma taxa que permite quantificar o quão rápido ocorre a saída das partículas da região de interação. Essa taxa é denominada de taxa de escape e a sua definição é feita a partir da distribuição de um número N_0 de condições iniciais que estão contidas inicialmente em uma região R do espaço de fases. É considerada também uma região de restrição Γ , contendo um conjunto

não atrator (ou seja, uma sela caótica). Devido a característica da sela caótica, a de repelir trajetórias, parte das trajetórias que visitam a vizinhança deste conjunto abandonam a região de restrição, não mais retornando [49]. Com isso, o número de partículas que têm suas trajetórias permanecendo dentro da região Γ após n passos de tempo é denotado por $N(n)$ e o número inicial de partículas com trajetórias sobre a região Γ é denotado por N_0 .

Em geral, é possível observar um decaimento exponencial [6] no número de partículas que permanecem nas vizinhanças da sela caótica, que é dado por

$$N(n) \sim \exp(-kn), \quad \text{para } n \gg 1, \quad (3.1)$$

em que k é a taxa de escape. Esse fato implica que pequenos valores de k levam a uma baixa taxa de escape para as trajetórias que permanecem no conjunto caótico não atrator. Como consequência, uma grande parte das trajetórias não permanece na região de restrição por intervalos de tempo maiores do que $1/k$. Assim, o tempo médio de sobrevivência τ para a observação do caos transiente é estimado como

$$\tau \approx 1/k. \quad (3.2)$$

Uma vez que a taxa de decaimento é obtida a partir de uma lei de decaimento sobre um intervalo finito de tempo, a identificação do caos transiente em médias temporais muito curtas pode ser uma tarefa bastante tediosa. Assim, uma condição para identificação do caos transiente é que o valor de k na expressão (3.2) seja pequeno, de forma que o tempo médio de vida τ seja bastante elevado. Deve-se enfatizar, porém, que a existência de valores positivos para a taxa de escape não implica necessariamente em caoticidade para a trajetória, pois em um simples conjunto não atrator, mesmo que por um breve instante de tempo, as trajetórias regulares que se aproximam da sela também são parcialmente repelidas.

3.2.2 Expoentes de Lyapunov

Uma informação usualmente utilizada para o entendimento do comportamento de um sistema dinâmico, seja a tempo contínuo ou discreto, é o expoente de Lyapunov [43] [44]. O cálculo desse expoente permite medir a taxa média¹ de divergência de trajetórias, quantificando a sensibilidade do sistema às condições iniciais. A taxa de divergência ou afastamento médio é relacionada com o expoente máximo de Lyapunov [50].

Como analogia, a divergência entre as trajetórias pode ser avaliada ao se tomar uma trajetória de referência $\chi_1(x_1, t_0)$, associada a uma condição inicial x_1 , a partir do qual se define uma determinada vizinhança no instante inicial t_0 . Essa vizinhança pode

¹ O termo “média” é utilizado, pois, para um tempo t finito, o valor do expoente depende da condição inicial.

ser tomada, por exemplo, como uma esfera de diâmetro $S(0)$ centrada em x_1 . Do mesmo modo, deve-se considerar uma segunda condição inicial x_2 , também contida na esfera e associada a uma segunda trajetória $\chi_2(x_2, t)$. Ao acompanhar a evolução temporal das condições iniciais x_2 e x_1 é avaliado o quanto a trajetória $\chi_2(x_2, t)$ diverge da trajetória de referência $\chi_1(x_1, t_0)$.

Um fato observado é que, no decorrer do tempo, a esfera se deforma formando um objeto elipsoidal com eixos $S_i(t), i = 1, 2, \dots, n$. Logo, os expoentes de Lyapunov λ_i medem o crescimento ou o decrescimento exponencial dos eixos da esfera e, esses, por sua vez, são definidos por:

$$\lambda_i = \frac{1}{\Delta t} \ln \left(\frac{S_i(t)}{S(0)} \right), \quad \text{com } i = 1, 2, \dots, n. \quad (3.3)$$

A partir da equação (3.3) é deduzido de imediato que a taxa de evolução do diâmetro da esfera, em um eventual intervalo de tempo Δt , é dada por

$$S_i(t) = S(0)e^{\lambda_i \Delta t}. \quad (3.4)$$

É observado então que, a existência de um ou mais expoentes de Lyapunov positivos, $\lambda_i > 0$, define a instabilidade² da trajetória, o que está associada a sensibilidade às condições iniciais. Nesse caso, a observação de dinâmicas caóticas para as trajetórias implica na positividade dos expoente de Lyapunov $\lambda_i > 0$.

Para soluções periódicas ou quase periódica, espera-se que os deslocamentos na direções perpendiculares ao movimento diminuam com o decorrer do tempo, enquanto ao longo da trajetória não se alteram. Para o caso regular, quando as soluções são periódicas, ou quase-periódicas, tem-se que $\lambda_i < 0$ ao longo das direções perpendiculares do movimento e nulo ao longo da trajetória.

Os expoentes de Lyapunov λ_i fornecem o comportamento da dinâmica do sistema e os seus sinais definem as direções de instabilidade das trajetórias. A presença de um sinal positivo está associado à direção de expansão dos eixos da elipse, enquanto um sinal negativo é relacionado à direção de contração. Além disso, os sinais dos expoentes de Lyapunov estão relacionados com as dimensões do sistema. Por exemplo, um sistema dinâmico unidimensional é caracterizado por possuir apenas um expoente, que é positivo caso este sistema seja caótico, zero para uma órbita marginalmente estável e negativo para uma órbita periódica. Um sistema dinâmico tridimensional, por sua vez, possui três possibilidades: $(+, 0, -)$ representa as três dimensões associadas à expansão-contração-

² Deve-se enfatizar que conjuntos não atratores regulares também podem ser caracterizados por um expoente de Lyapunov positivo, embora não apresentem uma dinâmica caótica. A positividade do expoente de Lyapunov é apenas uma condição necessária, mas não suficiente para se afirmar sobre a caoticidade da trajetória.

dobra; $(0, -, -)$ está associado a um ciclo limite e $(-, -, -)$ indica a presença de um ponto fixo.

3.2.3 Dimensão Fractal

Além da sensibilidade às condições iniciais, outra característica presente em sistemas caóticos é a presença de conjuntos invariantes no espaço de fases, cuja geometria altamente complexa apresenta uma estrutura não trivial em escalas arbitrariamente pequenas. Uma geometria desse tipo é denominada como geometria fractal e ao contrário de objetos geométricos como a reta, o quadrado ou um cubo, que apresentam uma geometria suave sob diferentes escalas, os objetos com geometria fractal não apresentam esta característica.

Na perspectiva de sistemas dinâmicos, um exemplo de objeto fractal é observado a partir da aplicação de uma pequena perturbação em um sistema integrável, como denotado no capítulo 2. A partir da teoria perturbativa desenvolvida nesse capítulo, foi observado que as trajetórias (ou órbitas) que estão dispostas sobre os toros racionais são substancialmente modificadas, quando considerada a ação de um pequeno efeito perturbativo no sistema. Com isso, as órbitas periódicas que antes cobriam os toros racionais são substituídas por um número par de órbitas periódicas³, em que metade delas são instáveis e metade estáveis. Sobre o ponto fixo estável é formado um conjunto de ilhas estáveis separadas por pontos fixos instáveis. O comportamento das trajetórias nas proximidades do centro de uma destas ilhas é tido como regular, sendo constituído de curvas elípticas que circundam o ponto fixo central. Dentro da ilha de estabilidade, por sua vez, surgem toros terciários, quaternários e assim por diante.

Os objetos fractais apresentam invariância em sua forma, ou seja, à medida em que sua escala de observação é alterada a sua forma original é mantida [51]. Outra característica presente nos fractais é o fato de que sua dimensão pode apresentar valores não inteiros [52]. Desse modo, é definida uma dimensão associada a estes objetos, que é denominada de dimensão fractal. Um método bastante usual que permite calcular a dimensão fractal de um conjunto é o *box-counting* (ou método da contagem de caixas). Nesse método, o cálculo da dimensão fractal é feito ao determinar o número $N(\varepsilon)$ de caixas de lado ε necessárias para cobrir todo o conjunto do fractal. Esse procedimento é repetido para diversos valores de ε e a dimensão fractal é obtida pela inclinação da curva do gráfico em escala $\log - \log$ de $N(\varepsilon)$ versus $(1/\varepsilon)$

$$d = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\log N(\varepsilon)}{\log(1/\varepsilon)}, \quad (3.5)$$

³ Como visto no capítulo 2, as órbitas periódicas formam os pontos fixos do sistema ao interseccionar a superfície de Poincaré.

onde $N(\varepsilon)$ são hipercubos (caixas) de lado ε , e varia segundo ε^{-d} para $\varepsilon \rightarrow 0$.

Outro exemplo de objeto fractal é o conjunto de Cantor ternário. A sua construção é iniciada a partir de um segmento de reta unitário, onde, em um primeiro estágio, se divide este segmento em três partes iguais. Em seguida, é retirado o seu intervalo médio. Dando continuidade ao processo de construção do conjunto, o mesmo procedimento é repetido sobre os intervalos restantes do segundo estágio, o qual, como demonstrado na figura 22, é retirada a terça parte média de cada um dos intervalos. Posteriormente, esse procedimento deve ser mais uma vez repetido sobre os sub-intervalos restantes, de modo que sobre o n -ésimo estágio o número de segmentos é 2^n , em que n é o total de estágios.

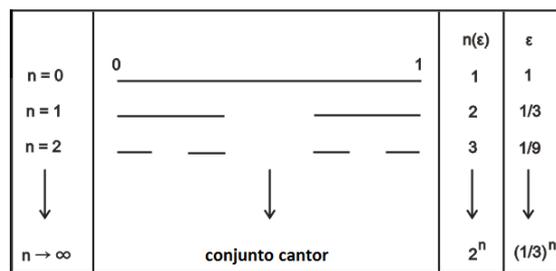


Figura 22: Para a construção do conjunto de Cantor ternário no n -ésimo estágio, tem-se apenas pontos pulverizados formando o conjunto conhecido como *Poeira de Cantor*.

O comprimento do segmento de reta em cada estágio do processo de construção do conjunto de Cantor ternário é, para o primeiro estágio, $C_1 = 1$; para o segundo estágio $C_2 = 1/3$; e para o terceiro estágio, $C_3 = 1/9$. Sobre o n -ésimo estágio o comprimento será

$$C_n = \left(\frac{1}{3}\right)^n, \tag{3.6}$$

em que no limite para $n \rightarrow \infty$, o valor de C_n vai a zero.

Em cada passo de sua construção, é evidente que sobre o n -ésimo estágio o conjunto de Cantor ternário é constituído por uma série de retas fragmentadas. Em razão disso, o conjunto de Cantor também é intitulado como poeira de Cantor. Com isso, o comprimento total C_t do conjunto de Cantor é dado pela multiplicação do número de segmentos 2^n pela equação 3.6, então:

$$C_t = \left(\frac{2}{3}\right)^n. \tag{3.7}$$

Considerando-se a aplicação do método de contagem de caixas (o *box-counting*), o conjunto de Cantor ternário é recoberto por um número de caixas aproximado de $N(\varepsilon) \sim$

2^n , e tamanho $\varepsilon \sim (1/3)^n$. A dimensão fractal do conjunto de Cantor é dada por

$$d = \frac{\ln 2}{\ln 3} = 0.630 \dots \quad (3.8)$$

Assim, é verificado que o resultado obtido para a dimensão fractal do conjunto de Cantor ternário apresenta um valor fracionário entre $[0, 1]$.

3.3 Aspectos do Espalhamento Classicamente Caótico

Como observado na introdução, uma forma de analisar o fenômeno de espalhamento é através da obtenção da função de espalhamento, essa relaciona as variáveis de saída (caracterizando o estado final do sistema) e as variáveis de entrada (caracterizando as condições iniciais do sistema) [1]. Para o caso em que a dinâmica do espalhamento seja regular, a função de espalhamento é tipicamente suave e contínua em todos os pontos de seu domínio [2]. No entanto, quando a dinâmica do espalhamento é caótica, a função de espalhamento apresenta regiões “mal comportadas” que estão associadas a presença de regiões de singularidades [52] [53]. Nesse caso, é observado que as singularidades têm a sua origem associada ao aprisionamento das partículas na região de espalhamento [54].

Um exemplo de sistema dinâmico que pode apresentar espalhamento caótico é a interação entre partículas lançadas no interior de uma caixa contendo um obstáculo localizado em seu centro (ver seção 3.2.1). Nesse exemplo, após sucessivas colisões contra as paredes internas da caixa e o disco, eventualmente, a partícula abandona a região de espalhamento retornando a região assintótica. Caracteriza-se assim o tempo de aprisionamento da partícula na região de interação e o ângulo da saída.

Nesse contexto, os sistemas dinâmicos podem ser classificados de acordo com a conservação ou não conservação do seu volume do espaço de fases. Sistemas dinâmicos são ditos conservativos, caso mantenham os seus volumes constantes no espaço de fases. Em geral, o comportamento caótico nesses sistemas surge quando a divergência exponencial das trajetórias no espaço de fases é acompanhada por um esticamento do volume em uma das direções que é compensado por uma contração em outra direção, de modo que o volume total seja conservado. Porém, deve-se notar que, o volume ocupado no espaço de fases para os sistemas dinâmicos é aberto, ou seja, esses sistemas apresentam um volume infinito no espaço de fases. Esse fato está associado à existência de regiões assintóticas para $t \rightarrow \pm\infty$, o qual tipicamente a interação entre a partícula e a região de espalhamento é inexpressiva. Logo, um sistema dinâmico que apresenta espalhamento pode ter a sua dinâmica descrita através do hamiltoniano dado por

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + V(q_1, q_2), \quad (3.9)$$

em que o potencial $V(q) \rightarrow 0$ para $|q| \rightarrow \infty$.

O aspecto central em sistemas dinâmicos que exibem espalhamento caótico é o aprisionamento de partículas por longos intervalos de tempo na região de espalhamento, o que leva ao surgimento de singularidades sobre a função de espalhamento. Com isso, as trajetórias no espaço de fases, cujas condições iniciais são iniciadas sobre as variedades estáveis da sela caótica⁴, percorrem caoticamente as vizinhanças da sela por um intervalo de tempo arbitrário e, eventualmente, escapam desta região através das variedades instáveis da sela caótica. Uma das consequências desse comportamento é que o sistema pode apresentar caos transiente devido a sensibilidade do sistema às condições iniciais originadas através da natureza caótica da sela [55].

3.3.1 Regimes para o Espalhamento

A dinâmica de um sistema que apresenta espalhamento pode ser classificada em três regimes distintos: regular (ou integrável), não hiperbólico e o regime caótico (ou hiperbólico). O regime regular é completamente caracterizado pela presença de toros no espaço de fases. Já o regime hiperbólico, por outro lado, é caracterizado pela presença de selas caóticas e a ausência de toros no espaço de fases. O regime não hiperbólico, por sua vez, pode ser interpretado como uma transição entre o regime regular e o hiperbólico, em que é observada a coexistência entre selas caóticas e toros no espaço de fases [55]. Uma das consequências da presença de toros no espaço de fases de um sistema que exhibe espalhamento caótico não hiperbólico é o comportamento da taxa de sobrevivência (permanência das partículas na região de espalhamento) das partículas que decaem algebricamente, ou em lei de potência, no decorrer do tempo.

Outro resultado importante apresentado pelos sistemas dinâmicos que apresentam espalhamento caótico é a dimensão fractal associada as regiões de singularidades que surgem na função de espalhamento. Foi sugerido por Lau *et al.* [7] uma associação entre o regime hiperbólico do espalhamento caótico e os valores de dimensão fractal, que nesse caso, se distanciam da unidade (valores para a dimensão fractal menores que a unidade). Isto ocorre devido ao decaimento exponencial observado na taxa de sobrevivência (ou taxa de permanência) das partículas sobre a região de espalhamento.

Para o regime não hiperbólico, embora o conjunto de singularidades possua medida de Lebesgue nula⁵, a dimensão fractal é sempre próxima da unidade. Essa característica é um resultado direto da presença de toros no espaço de fases do sistema. Assim, é observado que as trajetórias caóticas que se aproximam das regiões dos toros permanecem aprisionadas por longos intervalos de tempo em suas vizinhanças. Esse efeito é conhecido como

⁴ A partir de uma órbita periódica instável.

⁵ O conceito de medida de Lebesgue é a generalização dos conceitos de comprimento na reta, área no plano e volume no espaço.

“stickiness” e é ele o responsável pelo decaimento em lei de potência observado na taxa de sobrevivência das partículas na região de espalhamento, que tem como consequência à aproximação do valor da dimensão fractal da unidade.

3.3.2 Ocorrência do Espalhamento Caótico

Como observado na introdução, são diversos os sistemas, em distintas áreas da física, que apresentam espalhamento caótico. Neste caso, são observadas dinâmicas caóticas em reações químicas [56, 59], nos fenômenos que envolvam processos de transporte [60] [8], nos processos ópticos [61] [62] [63] [64] [48], nos processos hidrodinâmicos [38] [39], no campo da física atômica nuclear [62] [63] [64] e na mecânica celeste [65] [22] [29] [66] [67] [68]. No entanto, apesar do grande número de exemplos listados, será enfatizado neste trabalho o estudo das dinâmicas caóticas em sistemas de espalhamento que estejam relacionados a física atômica e molecular.

Em especial, neste trabalho, é realizado um estudo sistemático das colisões elásticas entre átomos de hélio e uma superfície de cobre enrugada. Em outras palavras, considera-se o espalhamento de átomos de hélio sobre uma superfície de cobre $Cu(11x)$ irregular, em que a irregularidade dessa superfície é definida a partir dos distintos índices de Miller. Lembrando apenas que, o índice de Miller é uma notação utilizada na cristalografia para definir uma família de planos em uma rede de Bravais. Assim, são indicadas as coordenadas de um vetor no espaço recíproco, que é normal à família de planos. Em três dimensões, os índices são representados por $(h\ k\ l)$ ⁶, em que h , k e l são números inteiros com maior divisor comum igual a 1.

3.3.3 Espalhamento Átomo-Superfície Metálica (hélio-cobre)

O estudo das dinâmicas clássicas do espalhamento átomo-superfície se apresenta como uma ferramenta na análise estrutural da superfície [70] [5] [69] [71] [72] [73]. A um nível microscópico, o entendimento do processo de espalhamento inclui o aprisionamento de átomos, a mobilidade de átomos adsorvidos em superfície, além da transferência de energia durante as colisões. Na literatura são encontradas diversas contribuições sobre o estudo do sistema de espalhamento átomo-superfície. Em especial, quando considerado um sistema de espalhamento hélio-cobre, pode-se citar os trabalhos realizados por Guantes *et al.* [20], Borondo *et al.* [56], Gorse *et al.* [74], Lapujoulade [75] e T. A. de Assis [76].

A estrutura e as propriedades das superfícies dos sólidos podem ser convenientemente obtidas a partir de técnicas que envolvem a teoria do espalhamento. Uma dessas técnicas é o espalhamento de feixes de hélio [18] [20]. Essa técnica, em especial, restringe-se

⁶ Deve-se lembrar ao leitor que o índice x para a superfície $Cu(11x)$ corresponde ao termo indicado pela letra l da notação usual para os índices de Miller.

estritamente a obtenção de informações sobre a superfície do material, e isto ocorre principalmente devido as baixas energias envolvidas durante as colisões dos átomos (5 – 300 meV) [77]. Dessa forma, um feixe de átomos de hélio de baixas energias varre a camada mais externa da superfície do material de forma não destrutiva, fornecendo informações, como o tamanho da célula unitária e a sua orientação. Neste caso, pode-se dizer que a teoria do espalhamento átomo-superfície apresenta semelhanças com outras técnicas de espalhamento desenvolvidas para análise de materiais. Como, por exemplo, as técnicas de espalhamento envolvendo raios X e nêutrons⁷.

Um fenômeno bastante importante na teoria do espalhamento dos átomos de hélio é o fenômeno da ressonância [78]. Diversos aspectos do espalhamento são observados quando o padrão de difração é calculado, e isto se deve principalmente a dois efeitos quânticos: a ressonância limite e a ressonância de adsorção seletiva. O fenômeno da ressonância limite pode ser observado sempre que as condições de incidência das partículas são tais que uma nova difração surge ou desaparece. Em um ponto de vista clássico, o efeito correspondente a ressonância limite é o surgimento de singularidade nas funções de espalhamento. Já para a ressonância de adsorção seletiva, suspeita-se que o aprisionamento clássico de partículas na região de espalhamento seja o seu correspondente clássico.

Uma das formas de se investigar a assinatura do caos em sistemas quânticos está baseada na aplicação da aproximação semiclássica. A partir da aplicação da aproximação semiclássica os efeitos clássicos e os efeitos quânticos são de grande notoriedade para o sistema, de modo que é possível obter uma correspondência entre os sistemas clássicos e sistemas quânticos, promovendo assim uma transição suave entre as duas descrições. Nesse âmbito, um questionamento natural que surge é: o que eventualmente ocorre a sistemas classicamente caóticos quando são quantizados? Ou ainda, quais as propriedades especiais de sistemas quânticos quando os correspondentes sistemas clássicos exibem um comportamento caótico? O que se sabe até aqui é que nos sistemas quânticos convencionais, por exemplo, o caos se manifesta de formas distintas daquelas que são observadas em sistemas clássicos.

No decorrer deste trabalho são estudadas as colisões elásticas entre os átomos de hélio e uma superfície de cobre enrugada [$Cu(11x)$], considerando-se os diferentes índices de Miller ($x = 0, 3, 5, 7$). Essas superfícies são apresentadas nas figuras 23 e 24, e são obtidas a partir de pequenos cortes em um cristal de cobre ao longo do plano paralelo à direção (110), formando ângulos de 25.24° , 15.79° e 11.42° , com o plano (100), respectivamente para as faces cristalográficas $Cu(113)$, $Cu(115)$ e $Cu(117)$.

⁷ Deve-se enfatizar, porém, que devido ao grande poder de penetração do feixe de raios X e dos nêutrons, junto ao material, podem ser obtidas informações do *bulk* do cristal. Esse termo, bastante usual na física do estado sólido, se refere as camadas mais internas do cristal, ou seja, refere-se ao seu volume.

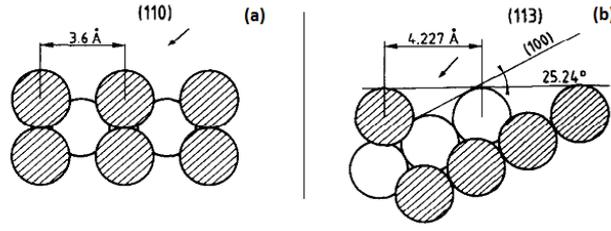


Figura 23: Seção paralela ao plano de incidência para as faces cristalográficas $Cu(110)$ e $Cu(113)$ e seus respectivos comprimentos da célula unitária são: 3,6 *Angstroms* e 4,227 *Angstroms*. Figura retirada de Gorse *et. al* [18].

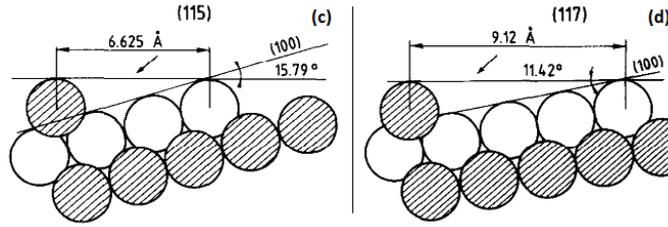


Figura 24: Seção paralela ao plano de incidência para as faces cristalográficas $Cu(115)$ e $Cu(117)$ e seus respectivos comprimentos da célula unitária são: 6,625 *Angstroms* e 9,12 *Angstroms*. Figura retirada de Gorse *et. al* [18].

Para simplificar à análise desse problema considere a incidência de átomos de hélio, com momento P_z na direção vertical e momento P_x na direção paralela a superfície, sobre uma superfície de cobre irregular, de modo que a função enrugamento⁸ seja descrita apenas ao longo das direções espaciais x e z , conforme ilustrado na figura 25. Dessa forma, o espalhamento clássico entre os átomos de hélio e a superfície de cobre irregular tem a sua dinâmica modelada através do seguinte hamiltoniano

$$H(x, z, P_x, P_z) = \frac{P_x^2 + P_z^2}{2m} + V(x, z), \quad (3.10)$$

em que x e z são respectivamente a coordenada paralela e perpendicular à superfície, e $V(x, z)$ é o potencial.

Como pôde ser observado, o estudo das colisões dos átomos de hélio sobre a superfície de cobre exige uma análise cinemática do problema. Implícita nessa análise é a suposição de que no tratamento de sistemas realísticos de espalhamento hélio-superfície sejam utilizados modelos de potenciais que consistem de termos atrativos e repulsivos. A parte atrativa do potencial tem atuação para longas distâncias e nela é observada a presença da interação de *Van der Waals*⁹ agindo sobre o sistema. Nesse caso, quando os dois átomos estão afastados a uma distância muito maior que seus respectivos raios atômicos,

⁸ Função que define o enrugamento para a superfície de cobre, estando relacionada aos índices de Miller.

⁹ A interação de *Van der Waals* é a força responsável pela formação, por exemplo, em cristais de gases inertes e de muitas outras substâncias orgânicas.

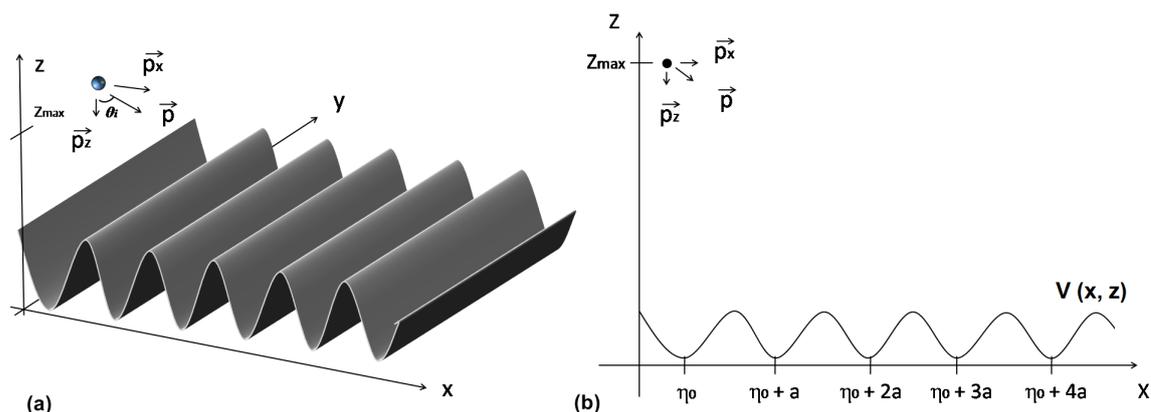


Figura 25: Figura ilustrativa retratando a incidência de um átomo de hélio sobre a superfície equipotencial, correspondente a superfície de cobre enrugada. a) Devido a simetria observada ao longo da coordenada espacial y , a componente da função espacial ao longo desta direção pode ser ignorada. b) Descrição bidimensional do espalhamento, sobre o plano $z - x$, para o qual considera-se apenas a função enrugamento ao longo destas direções. Em especial, como será destacado no decorrer do texto, a simetria observada ao longo do potencial $V(x, z)$ será considerada para a construção da seção de Poincaré.

são induzidos momentos dipolares nos átomos vizinhos que dão origem à força atrativa. Durante a aproximação do átomo com a superfície espalhadora, o potencial atrativo é ignorado dando lugar a um potencial Morse (que relaciona o enrugamento da superfície) e um termo de acoplamento entre os graus de liberdade do sistema.

A parte repulsiva do potencial atua para curtas distâncias de interação entre o átomo e a superfície, ou seja, quando os átomos incidentes se aproximam dos átomos que constituem a superfície espalhadora, as suas distribuições de cargas se superpõem modificando a energia eletrostática do sistema. A força associada à superposição é repulsiva devido ao princípio de exclusão de Pauli. Logo, quando as distribuições de carga se superpõem, os elétrons do átomo A tendem a ocupar os estados dos elétrons do átomo B . De acordo com o princípio de exclusão de Pauli, dois elétrons não podem ocupar o mesmo estado quântico, ou seja, o único modo de acomodar um número maior de elétrons na mesma região do espaço é promovendo parte dos elétrons para níveis desocupados de maior energia. A superposição das nuvens eletrônicas dos dois átomos faz aumentar a energia total do sistema, provocando uma contribuição repulsiva na interação.

Em geral, potenciais suaves com ajuste de parâmetros são usualmente utilizados por correlacionar dados experimentais. Assim, o potencial utilizado na interação hélio-cobre pode ser modelado, em média, por um potencial Morse [79]. Esse potencial é uma combinação de termos atrativos para longas distâncias e repulsivos para curtas distâncias. Além disso, para curtas distâncias é incluído um termo de acoplamento entre os graus de liberdade, que envolve a função enrugamento descrita ao longo das direções espaciais x

e z . O potencial $V(x, z)$ é definido por uma série de parâmetros que são determinados a partir de dados experimentais, sendo eles:

i) Energia Potencial: $V(x, z) = V_M(z) + V_c(x, z)$;

ii) Potencial Morse: $V_M(z) = D(1 - e^{-\alpha z})^2$, em que $D = 6.35 \text{meV}$ é o parâmetro de profundidade do poço potencial e $\alpha = 1.05(\text{Angstroms})^{-1}$ é um parâmetro de escala;

iii) Termo de Acoplamento: $V_c(x, z) = V_z(z)V_x(x)$, $V_z(z) = De^{-2\alpha z}$ com $V_x(x) = \sum_n \left(r_n \cos\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) + s_n \sin\left(\frac{2n\pi x}{a}\right) \right)$.

A função enrugamento descrita ao longo da coordenada espacial x é constituída por uma expansão em série de Fourier, em que os índices r_n e s_n correspondem as amplitudes do enrugamento para as faces cristalográficas e estão associados a parte real e a parte imaginária de $V_x(x)$. Os índices r_n e s_n são apresentados na tabela 1. Logo, é possível observar que a função enrugamento para as superfícies espalhadoras $Cu(110)$ e $Cu(113)$, é composta apenas pela soma das funções cossenos. Assim, a função enrugamento $V_x(x)$ descrita ao longo da coordenada espacial x apresenta uma simetria com respeito aos planos $x = 0, a$ e $x = a/2$ (onde a é o comprimento da célula unitária). Porém, essa mesma simetria não é observada na superfície espalhadora $Cu(117)$, que mostra-se mais irregular quando comparada, por exemplo, à superfície espalhadora $Cu(110)$.

Como foi observado, através dos exemplos descritos no decorrer do texto, uma forma de se caracterizar um sistema que exhibe espalhamento é através da obtenção de sua função de espalhamento. Para o sistema hélio-cobre foi considerada a construção da função tempo de atraso $T(b)$ e da função deflexão $\theta(b)$. Nesse caso, essas funções podem ser obtidas respectivamente ao considerar a relação entre o tempo de aprisionamento do átomo do hélio sobre a superfície de cobre e o parâmetro de impacto, normalizado, entre $0 \leq b \leq 1$ e a relação entre o ângulo final e o parâmetro de impacto, normalizado.

Para a construção das funções espalhamento foi calculado numericamente um grande número de trajetórias ($\sim 10^4$), simulando as diversas colisões entre os átomos de hélio e a superfície de cobre enrugada. Em cada trajetória analisada foi definido um conjunto de variáveis de entrada, a saber: o valor de z_{max} representando o máximo valor de z , fixado em 12 Angstroms; o valor do parâmetro de impacto, normalizado, escolhido no intervalo $0 \leq b \leq 1$; a energia de incidência E , fixada em 21 e 63 meV e o ângulo de incidência para os átomos θ_i , fixado em 89.999° ¹⁰. Com isso, definidas as variáveis de entrada, são acompanhadas as evoluções temporais do conjunto de condições iniciais¹¹ ao

¹⁰ Neste caso, considera-se o espalhamento de átomos de hélio correspondentes a um conjunto de condições iniciais próximas do ponto fixo hiperbólico (ver capítulo 2, seção 2.5).

¹¹ As condições iniciais correspondem as mesmas condições iniciais utilizadas nos métodos quânticos *closed-Coupling* Guantes *et al.* [80].

| Parte real das amplitudes do enrugamento, com $E = 21meV$ | | | | |
|---|---------|--------|--------|--------|
| Índice da face cristalográfica | r_1 | r_2 | r_3 | r_4 |
| 110 | 0.03 | 0.0004 | 0 | 0 |
| 113 | 0.0708 | 0.0025 | 0 | 0 |
| 115 | 0.1758 | 0.0052 | 0 | 0 |
| 117 | 0.1828 | 0.0593 | 0.0116 | 0.0017 |
| Parte real das amplitudes do enrugamento, com $E = 63meV$ | | | | |
| Índice da face cristalográfica | r_1 | r_2 | r_3 | r_4 |
| 110 | 0.0454 | 0.001 | 0 | 0 |
| 113 | 0.0885 | 0.0039 | 0 | 0 |
| 115 | 0.2147 | 0.0131 | 0 | 0 |
| Parte imaginária das amplitudes do enrugamento, com $E = 21meV$ | | | | |
| Índice da face cristalográfica | s_1 | s_2 | s_3 | s_4 |
| 110 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 113 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 115 | -0.0259 | 0.0055 | 0 | 0 |
| 117 | -0.0836 | 0.0157 | 0.0002 | 0.001 |
| Parte imaginária das amplitudes do enrugamento, com $E = 63meV$ | | | | |
| Índice da face cristalográfica | s_1 | s_2 | s_3 | s_4 |
| 110 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 113 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 115 | -0.0252 | 0.0044 | 0 | 0 |

Tabela 1: Índices correspondentes as amplitudes de enrugamento da superfície de cobre.

longo de suas respectivas trajetórias no espaço de fases. O conjunto de condições iniciais, em especial, neste problema, é definido a partir das seguintes expressões

$$z_0 = z_{max}, \quad (3.11)$$

$$x_0 = -z_{max}tg(\theta_i) + ba \quad (3.12)$$

$$p_{z_0} = -\sqrt{2mE} \cos(\theta_i) \quad (3.13)$$

$$p_{x_0} = \sqrt{2mE} \sin(\theta_i). \quad (3.14)$$

Na figura 26 é representada a dinâmica de espalhamento entre um átomo de hélio com energia de incidência de 21 meV e a superfície espalhadora $Cu(110)$, em que é possível observar o aprisionamento do átomo de hélio na região de espalhamento (na superfície espalhadora). O que ocorre neste ponto é que o átomo de hélio, após incidir sobre a superfície espalhadora, tem parte de sua energia translacional transferida de sua componente P_z para a componente P_x do momento, i.e., o átomo de hélio pode permanecer aprisionado na região de espalhamento devido a ação do potencial. Após sucessivas colisões contra a superfície espalhadora, eventualmente, a componente P_z do momento recupera parte de sua energia transferida e o átomo de hélio pode sair da região de espalhamento [19].

O aprisionamento clássico está diretamente relacionado com a presença do ângulo

arco-íris¹², ou seja, quando o ângulo final se aproxima de $\theta = 90^\circ$. Nas figuras 27–30, correspondentes à função deflexão, pode ser observado um valor de máximo (ou mínimo), o qual é destacado o ponto arco-íris. Com isso, diferentes condições iniciais podem levar ao surgimento de singularidades sobre a função de espalhamento [81]. Contudo, deve-se enfatizar que o aprisionamento do átomo de hélio não se caracteriza como um fator preponderante no surgimento do caos em sistemas de espalhamento. Pois, quando consideradas as dinâmicas de espalhamento sobre as faces cristalográficas $Cu(117)$ e $Cu(115)$ é observado que uma grande fração de átomos de hélio permanecem aprisionados na região de espalhamento por curtos intervalos de tempo, quando comparado as superfícies espalhadoras $Cu(110)$ e $Cu(113)$. No entanto, ainda é possível observar a presença de dinâmicas caóticas para o espalhamento sobre essas superfícies.

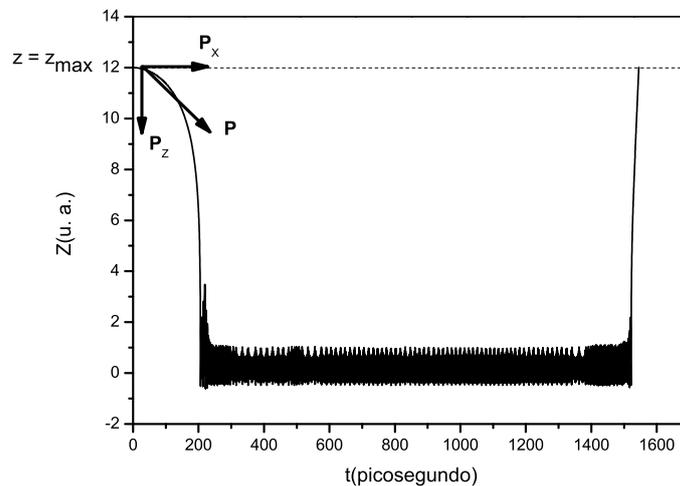


Figura 26: Evolução temporal da coordenada espacial z , obtida para o espalhamento entre o átomo de hélio caracterizado pelo parâmetro de impacto, normalizado, $b = 0.684987954$, energia de incidência de 21 meV e ângulo de incidência de 89.999° e uma superfície espalhadora $Cu(110)$.

A construção da função de espalhamento depende implicitamente dos valores escolhidos para as variáveis de entrada. Logo, para determinadas escolhas das variáveis de entrada pode ser observado a presença de regiões de singularidades na função deflexão, que por sua vez, correspondem ao aprisionamento de átomos de hélio por longos intervalos de tempo na região de espalhamento. Ao avaliar a função deflexão pode-se observar a presença de regiões contínuas que correspondem as colisões diretas dos átomos de hélio na superfície de cobre e de regiões de singularidades. Nas figuras 27–30 são apresentados os gráficos da função deflexão $\theta(b)$ e da função tempo de atraso $T(b)$ respectivamente para as superfícies $Cu(110)$, $Cu(113)$, $Cu(115)$ e $Cu(117)$, sob as seguintes variáveis de entrada:

¹² O ângulo arco-íris corresponde fisicamente ao ponto sobre o qual há um aumento na densidade das trajetórias clássicas.

energia de incidência fixada em 21 meV, o ângulo de incidência de $\theta \approx 90^\circ$ e o parâmetro de impacto, normalizado, variando no intervalo de $0 \leq b \leq 1$.

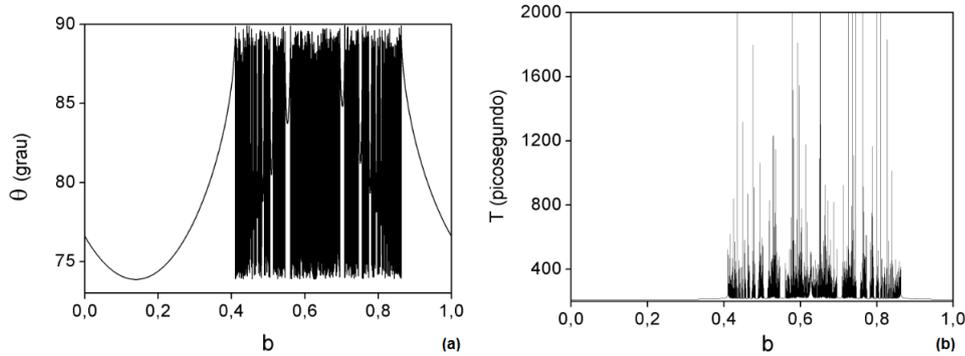


Figura 27: Gráficos das funções de espalhamento obtidos para o espalhamento de átomos de hélio sobre uma superfície $Cu(110)$, com energia para os átomos fixada em 21 meV. (a) Função deflexão $\theta(b)$. (b) Função tempo de atraso $T(b)$.

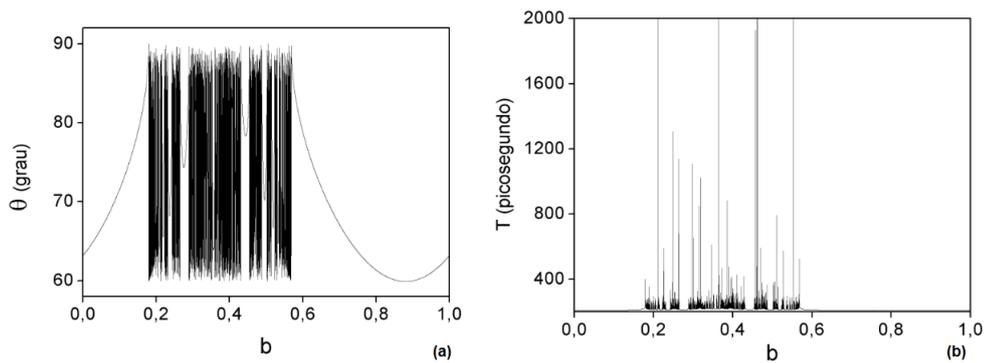


Figura 28: Gráficos das funções de espalhamento obtidos para o espalhamento de átomos de hélio sobre uma superfície $Cu(113)$, com energia para os átomos fixada em 21 meV. (a) Função deflexão $\theta(b)$. (b) Função tempo de atraso $T(b)$.

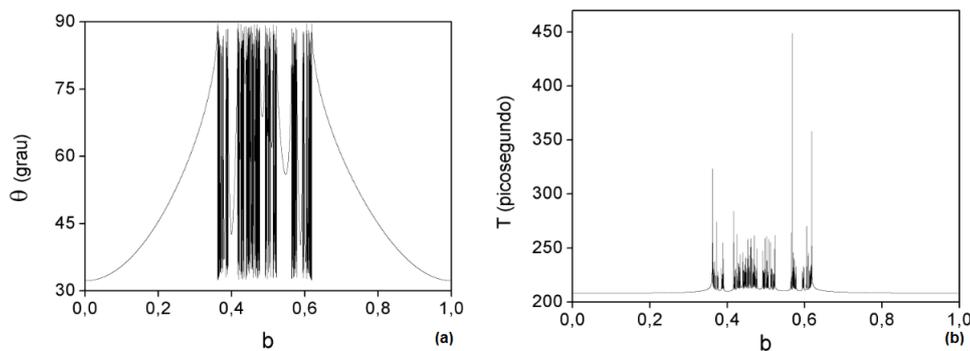


Figura 29: Gráficos das funções de espalhamento obtidos para o espalhamento de átomos de hélio sobre uma superfície $Cu(115)$, com energia para os átomos fixada em 21 meV. (a) Função deflexão $\theta(b)$. (b) Função tempo de atraso $T(b)$.

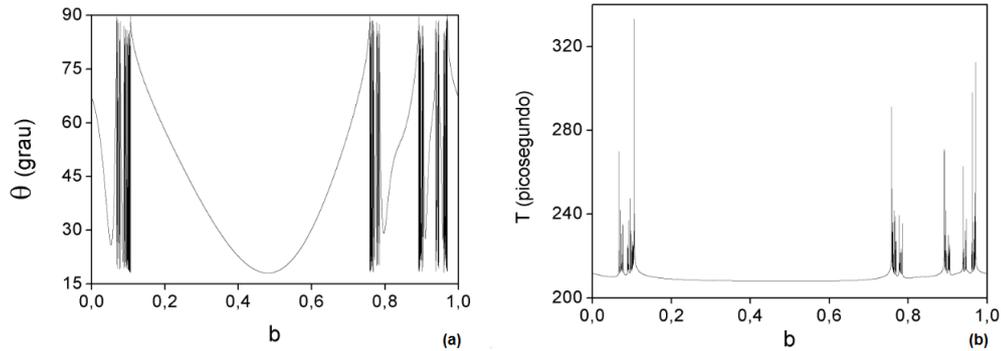


Figura 30: Gráficos das funções de espalhamento obtidos para o espalhamento de átomos de hélio sobre uma superfície $Cu(117)$, com energia para os átomos fixada em 21 meV. (a) Função deflexão $\theta(b)$. (b) Função tempo de atraso $T(b)$.

Uma vez que a função enrugamento descrita ao longo das coordenadas espaciais x e z é periódica, as trajetórias no espaço de fases podem ser convenientemente acompanhadas através do método da seção de Poincaré (ver seção 2.2.2 do capítulo 2). A seção de Poincaré é então construída quando tomados os pontos marcados no plano (P_z, z) , levando-se em conta os planos formados a partir de $x = \eta_0 + na$, com $n = 0, 1, \dots, \infty$. Logo, todas as vezes que se tem um valor de mínimo na função enrugamento $V(x, z)$ é marcado um ponto na seção de Poincaré. Em outras palavras, toda a vez em que se tenha a posição que define a periodicidade da rede recíproca é marcado um ponto na seção de Poincaré.

Na construção das seções de Poincaré, considerou-se o cálculo numérico de um grande número de trajetórias ($\sim 10^4$) simulando as diversas colisões entre os átomos de hélio e a superfície de cobre. Logo, As seções de Poincaré correspondentes às dinâmicas de espalhamento sobre as superfícies espalhadoras $Cu(110)$, $Cu(113)$, $Cu(115)$ e $Cu(117)$, são apresentadas nas figuras 31 e 32, ambas com energia de incidência fixada em 21 meV, ângulo de incidência de 89.999° e o valor de $x_0 = 0$.

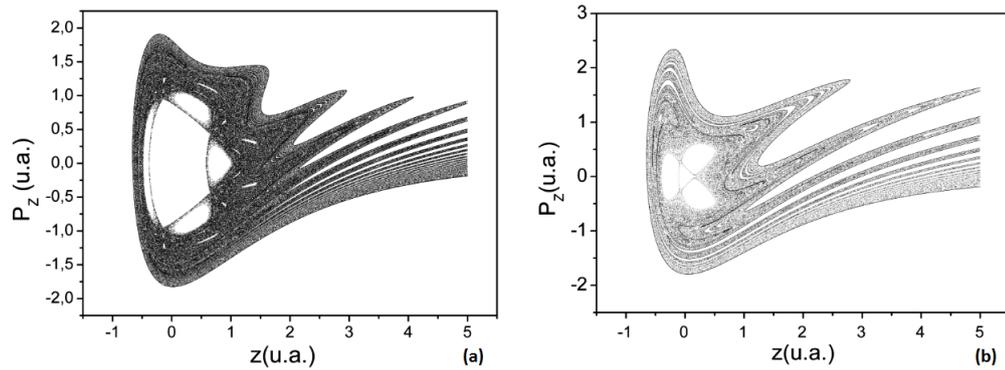


Figura 31: Seção de Poincaré obtidos para as dinâmicas de espalhamento sobre as distintas superfícies espalhadoras. (a) Superfície espalhadora $Cu(110)$. (b) Superfície espalhadora $Cu(113)$.

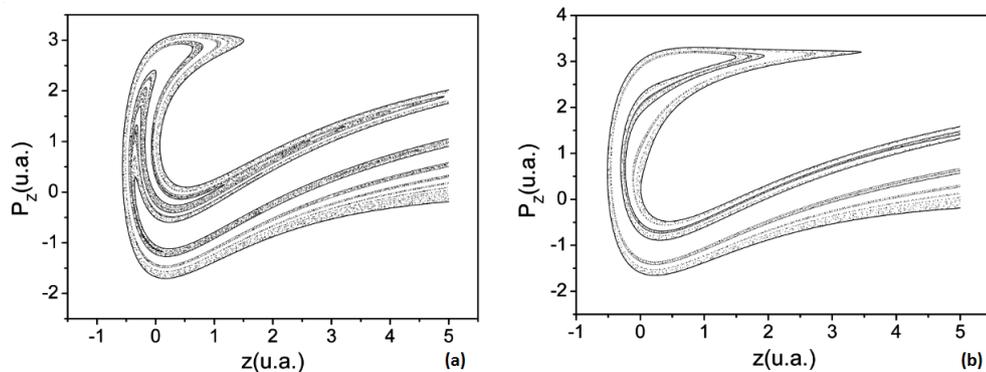


Figura 32: Seção de Poincaré obtidos para as dinâmicas de espalhamento sobre as distintas superfícies espalhadoras. (a) Superfície espalhadora $Cu(115)$. (b) Superfície espalhadora $Cu(117)$.

A análise da seção de Poincaré obtida para a dinâmica de espalhamento sobre a superfície espalhadora $Cu(110)$ revela a existência de regiões onde predominam as trajetórias dispostas sobre os toros e de regiões onde as trajetórias irregulares constituem um “mar de caos”. Para o espalhamento sobre esta superfície, é sugerido um regime não hiperbólico e, portanto, caracterizando um decaimento algébrico para a taxa de sobrevivência (ou aprisionamento) dos átomos de hélio sobre superfície. Por outro lado, como pode ser observado na figura 32.(b), a seção de Poincaré obtida para as dinâmicas de espalhamento sobre a superfície espalhadora $Cu(117)$ é inteiramente retratada pela presença de trajetórias irregulares, que estão associadas à presença de selas caóticas no espaço de fases. Para este caso, o regime associado ao espalhamento é hiperbólico, caracterizado-se assim um decaimento exponencial na taxa de aprisionamento dos átomos na superfície espalhadora.

Por sua vez, nas figuras 31.(b) e 32.(a), são retratadas as seções de Poincaré para as dinâmicas de espalhamento sobre as superfícies espalhadoras $Cu(113)$ e $Cu(115)$. Ao analisar as seções de Poincaré obtidas para esses dois casos é possível observar uma tran-

sição entre os regimes não hiperbólico e hiperbólico para o espalhamento. Em particular, quando considerada a superfície espalhadora $Cu(113)$, a seção de Poincaré obtida para essa dinâmica de espalhamento revela uma situação semelhante ao caso da superfície espalhadora $Cu(110)$. Nesse caso, são observadas, em seu espaço de fases, trajetórias que estão dispostas sobre os toros e trajetórias irregulares que compõe o “mar de caos”. Porém, como pode ser visto na figura 32.(b), quando considerado o aumento da irregularidade da superfície de cobre, ou seja, quando considerado o aumento do índice de Miller para a superfície de cobre $Cu(11x)$, neste caso, de $x = 3$ para $x = 5$, as regiões anteriormente preenchidas por toros são substituídas por regiões predominantemente caóticas.

3.4 Indicadores de Caos

Distinguir a dinâmica das trajetória como regular ou caótica em sistemas dinâmicos com mais de dois graus de liberdade é de fundamental importância para o entendimento de sistemas caóticos. Em sistemas dinâmicos dissipativos, essa distinção é facilmente realizada, pois as trajetórias tendem a um atrator do decorrer do tempo. Contudo, quando considerado um sistema dinâmico conservativo (ou hamiltoniano), essa distinção nem sempre ocorre com tamanha facilidade, em especial, torna-se impossível a visualização de sua dinâmica quando o sistema apresentam muitos graus de liberdade em seu espaço de fases.

Para realizar essa distinção são utilizados métodos (ou ferramentas) que forneçam informações sobre o comportamento das trajetórias, caracterizado-as como regular ou caótico, independente da dimensão apresentada em seu espaço de fases. Esses métodos podem ser divididos em duas categorias: *i*) métodos que dependem da evolução da própria trajetória *ii*) métodos que se baseiam no estudo da evolução de pequenos vetores desvios para uma dada trajetória. Logo, como exemplo, são listados alguns desses métodos:

- (1) o método da seção de Poincaré é extensivamente utilizado em sistemas bidimensionais, a fim de se investigar a trajetória de sistemas dinâmicos. A construção da seção de Poincaré, como anteriormente descrita no capítulo 2, consiste na análise das trajetórias que interceptam o seção de Poincaré, marcando um ponto na mesma. A deficiência dessa técnica está na restrição de sua aplicação em sistemas dinâmicos com até dois graus de liberdade.
- (2) o expoente máximo característico de Lyapunov (*LCE*) [82] permite a distinção da dinâmica da trajetória de uma partícula como regular ou caótica, a partir da evolução temporal de uma condição inicial e seu correspondente vetor desvio. O máximo *LCE*, σ_1 , é tomado como o limite do expoente de Lyapunov (ver seção 3.2.2) quando

$t \rightarrow \infty$. Neste caso,

$$\lambda_t = \frac{1}{t} \ln \frac{|\vec{v}(t)|}{|\vec{v}(0)|}, \text{ i.e., } \sigma_1 = \lim_{t \rightarrow \infty} \lambda_{t_i}, \quad (3.15)$$

em que os vetores desvio $\vec{v}(t)$ e $\vec{v}(0)$ correspondem aos eixos da elipse $S(t)$ e $S(0)$ definidos na subseção 3.2.2.

Um problema básico na obtenção do LCE é que após um tempo t_i , um novo cálculo é feito, o que proporciona um novo valor para o LCE , completamente distinto do valor encontrado no passo de tempo anterior. Na prática, ao término da evolução temporal do vetor desvio $\vec{v}_1(t)$, para o tempo t_1 , é calculado o valor para o LCE através da equação (3.15). Posteriormente, o vetor desvio é normalizado dando início a um novo cálculo para o LCE , sobre o tempo t_2 . Uma vez que o valor obtido para σ_1 é influenciado durante toda evolução temporal de $\vec{v}(0)$, o tempo necessário para que λ_t convirja é *a priori* desconhecido. Esse procedimento, em geral, dificulta em prever se ao final do processo o valor σ_1 tende a exibir valores positivos (para o caso caótico) ou sempre converge a zero (para o caso regular).

3.5 Método da Dimensão de Incerteza

Nas seções anteriores mostrou-se que um dos aspectos do espalhamento caótico é o surgimento, em determinados casos, de singularidades sobre a função de espalhamento. Uma medida quantitativa que permite caracterizar a magnitude das regiões de singularidades é o cálculo da dimensão fractal. Como demonstrado na subseção 3.2.3, um dos diversos métodos utilizados para o cálculo do valor da dimensão fractal é a dimensão “*box-counting*”. Porém, uma desvantagem do uso desse método é que o número de caixas estimadas para cobrir todo o conjunto é bastante elevado quando considerados pequenos valores de ε . Alternativamente, outra forma de caracterizar as singularidades, em uma perspectiva de sistemas dinâmicos, é através do método da dimensão de incerteza calculada sobre a função tempo de atraso [7].

A dimensão de incerteza para a função tempo de atraso é calculada do seguinte modo: é escolhido aleatoriamente um valor para uma condição inicial (associado a um valor de parâmetro de impacto, normalizado, b), e para um valor fixo de incerteza ε , é tomada uma condição inicial vizinha (esta associada a um parâmetro de impacto, normalizado, $b + \varepsilon$). As duas condições iniciais são propagadas no tempo e após o término do processo, ou seja, quando registrada a saída do partícula da região de espalhamento, são computados os respectivos tempos de atraso para cada uma das trajetórias, $T(b)$ e $T(b + \varepsilon)$. A expressão $\Lambda = |T(b) - T(b + \varepsilon)|$ é calculada e caso resulte em um valor maior do que uma quantidade arbitrária δ , a trajetória é dita incerta. Os passos são repetidos para um grande número de trajetórias ($\sim 10^4$) e para diversos valores de

ε . O número de trajetórias incertas é dividido pelo número total de trajetórias escolhidas e, então, é obtida uma fração de trajetórias incertas $f(\varepsilon)$. Para finalizar, é feito o gráfico que relaciona $f(\varepsilon)$ versus ε em escala *log-log*. A dimensão de incerteza é definida como:

$$d = 1 - \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\ln f(\varepsilon)}{\ln \varepsilon}. \quad (3.16)$$

Nesse caso, a dimensão de incerteza é estimada como $d = 1 - \alpha$, em que α é o segundo termo da igualdade na equação (3.16) e a fração de incerteza $f(\varepsilon)$ escala com a incerteza ε a partir de uma lei de potência, $f(\varepsilon) \sim \varepsilon^\alpha$. A dimensão de incerteza informa qual a probabilidade de se ter uma trajetória incerta (com um valor de b escolhido aleatoriamente) para um determinado erro ε .

3.6 Método do “Smaller Alignment Index” (*SALI*)

Apesar da grande disponibilidade de indicadores que permitem a identificação de dinâmicas caóticas em sistemas dinâmicos conservativos, parte desses indicadores não oferece as condições necessárias para a caracterização da dinâmica, principalmente quando os sistemas dinâmicos apresentam um grande número de graus de liberdade. Um desses métodos, o *SALI* [65] [22] [48], possibilita determinar as características da dinâmica seja em sistemas hamiltonianos ou em mapas, através de uma quantidade que indique o alinhamento final de uma par de vetores desvio unitários tomado em relação a condição inicial de referência.

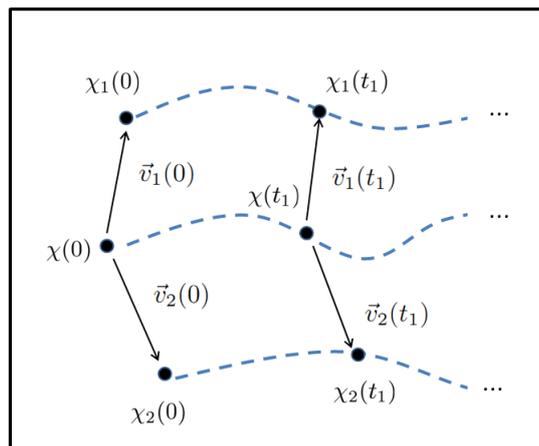


Figura 33: Figura ilustrativa representando as evoluções temporais dos vetores desvio \vec{v}_1 e \vec{v}_2 , associados à condição inicial de referência $\chi(0)$ no espaço de fases.

Considere-se a evolução temporal de uma condição inicial de referência $\chi(0)$ e de um par de condições iniciais vizinhas, $\chi_1(0)$ e $\chi_2(0)$. Além disso, como pode ser observado na figura 33, são tomadas as evoluções temporais dos vetores desvio unitários \vec{v}_1 e \vec{v}_2 , em que para cada passo de tempo dessa evolução é de interesse avaliar as distintas direções

finais dos vetores desvio unitários normalizados. Assim, obtidas as suas direções finais, o valor do *SALI* é calculado como

$$SALI(t) = \min \{ \|\hat{v}_1(t) + \hat{v}_2(t)\|, \|\hat{v}_1(t) - \hat{v}_2(t)\| \}, \quad (3.17)$$

em que $\hat{v}_i = \frac{\vec{v}_i}{\|\vec{v}_i\|}$, com $i = 1, 2$.

O resultado obtido através da equação (3.17) distingue claramente o comportamento da trajetória como regular (ou caótica), independentemente da dimensionalidade apresentada pelo sistema no espaço de fases. A medida do *SALI* exhibe uma variação em torno de valores positivos quando considerada as trajetórias regulares, enquanto para trajetórias caóticas converge rapidamente a zero a partir de uma taxa exponencial.

Para trajetórias caóticas, o par de vetores desvios normalizados possuem, a cada passo de tempo de sua evolução temporal, a mesma direção, com mesmo sentido ou contrário. Já para trajetórias regulares, o par de vetores desvios tende a um espaço tangente aos toros, sobre o qual a dinâmica é governada por dois campos vetoriais independentes e que correspondem a duas integrais de movimento [66]. Então, uma vez que os vetores desvio unitários \vec{v}_1 e \vec{v}_2 são componentes que estão respectivamente ao longo e ao redor do toro, são exibidas direções distintas em cada passo de tempo avaliado. Esse comportamento ocorre justamente devido ao fato de que a norma do vetor desvio para uma trajetória regular aumenta linearmente no decorrer do tempo. Sendo que esse é o motivo pelo qual os vetores desvios unitários possuem distintas direções a cada passo de tempo de sua evolução temporal e, então, apresentam um valor para o *SALI* que difere de zero.

Como pôde ser notado, o método do *SALI* é sugerido como um indicador capaz de informar sobre a caoticidade das trajetórias em sistemas dinâmicos conservativos ou dissipativos. É exibida uma vantagem do uso do *SALI* perante a utilização do máximo *LCE* como indicador de caos. A vantagem neste caso é que durante a sua aplicação não são exigidos novos cálculos para os vetores desvios em cada passo de tempo da evolução temporal do sistema.

4 Resultados e Discussões

Neste capítulo, será analisada a dinâmica das colisões elásticas entre os átomos de hélio e uma superfície de cobre enrugada, ou seja, considerando-se as colisões sobre as distintas faces cristalográficas da superfície de cobre: $Cu(110)$, $Cu(113)$, $Cu(115)$ e $Cu(117)$ (superfícies espalhadoras). Como visto anteriormente na Seção 3.3 do Capítulo 3, se a dinâmica do espalhamento é caótica a função de espalhamento apresenta singularidades que formam um conjunto fractal. Em um primeiro momento, as regiões de singularidades foram qualitativamente avaliadas através do método das seções de Poincaré [83] [19] e através da construção das funções de espalhamento. Ademais, a partir de uma análise quantitativa, as regiões de singularidades foram avaliadas com o uso dos métodos da dimensão de incerteza [7] [41] e do *SALI* [47] [48]. A aplicação do método do *SALI* visa a introdução de um método alternativo que possibilita a análise das regiões de singularidades que surge na função de espalhamento, bem como, permite a identificação do comportamento da trajetória qualificando-a como regular ou caótica, enquanto o átomo de hélio estiver aprisionado nas superfícies espalhadoras.

4.1 Funções Espalhamento e Espaço de Fases para o Sistema de Espalhamento Hélio-Cobre

Nesta seção, será apresentada a análise sistemática das dinâmicas de espalhamento no sistema hélio-cobre. Para isso, foi calculado numericamente um grande número de trajetórias ($\sim 10^4$), as quais foram simuladas as distintas colisões entre os átomos de hélio e a superfície de cobre enrugada. Neste caso, cada trajetória está associada a um conjunto de condições iniciais, que são: o momento linear P_{x0} , o momento linear P_{z0} , e as posições iniciais x_0 e z_0 . As condições iniciais, por sua vez, são caracterizadas por um conjunto de variáveis de entrada, como referido na seção 3.3.3 do capítulo 3.

As simulações numéricas foram realizadas com o uso do Fortran 77, a partir da integração numérica das equações de movimento e com o uso de um método preditor-corretor a passo variável. Esse é um método multi-passo utilizado na obtenção das soluções numéricas de um problema de condições iniciais para uma equação diferencial. Dessa forma, duas fórmulas são usadas em conjunto, uma primeira para encontrar um novo valor da variável dependente (em geral apresentando uma dependência temporal), e uma segunda para corrigir o valor anteriormente encontrado. A desvantagem no uso desse método é que em determinados casos a energia total do sistema pode não se conservar.

Inicialmente, essa análise consiste da construção das funções de espalhamento (a

função deflexão $\theta(b)$ e a função tempo de atraso $T(b)$ e a construção das seções de Poincaré correspondentes as dinâmicas de espalhamento. De modo análogo ao espalhamento caótico exibido durante a interação entre os átomos de hélio, com energia de incidência fixada em 21 meV, e a superfície de cobre enrugada¹, a função de espalhamento obtida para a interação hélio-cobre com energia de 63 meV, também exhibe regiões de singularidades. As funções de espalhamento obtidas para a energia de incidência de 63 meV podem ser visualizadas nas figuras 34–36.

Ao comparar os resultados obtidos para as funções de espalhamento para as duas energias de incidência, de 21 e 63 meV, é observada uma dependência entre o sistema e a energia de incidência para os átomos. Deste modo, pode-se observar que as regiões de singularidades surgem em distintos intervalos da função deflexão. As regiões de singularidades, por exemplo, podem ser visualizadas no intervalo de parâmetro de impacto, normalizado, compreendido aproximadamente entre $0.2 \leq b \leq 0.7$, quando tomada a função deflexão obtida para o espalhamento sobre a superfície espalhadora $Cu(110)$, com energia de incidência para os átomos fixada em 63 meV (ver figura 34.(a)). As regiões de singularidades obtidas a partir do espalhamento nas superfícies espalhadoras $Cu(113)$ e $Cu(115)$, ambos os casos com energias de incidência de 63 meV, são apresentadas respectivamente nas figuras 35.(a) e 36.(a).

O surgimento das regiões de singularidades observadas nas funções deflexão, para as distintas faces cristalográficas, está associado ao aprisionamento de átomos na região de espalhamento (ou seja, sobre a superfície espalhadora). Como pode ser observado, comparativamente nas figuras 34.(b)–36.(b), o tempo de interação (aprisionamento) entre os átomos e as superfícies espalhadoras, cujos índices de Miller são $x = 1, 3$, é alto quando comparado ao tempo de interação entre os átomos de hélio e a superfície espalhadora com índice $x = 5$. Isto ocorre devido à taxa de sobrevivência (ou permanência) dos átomos sobre estas superfícies $Cu(110)$ e $Cu(113)$, que decai a partir de uma lei de potência. Como consequência, é observada uma maior distribuição de regiões de singularidades na função deflexão obtida para as superfícies espalhadoras com menores índices de Miller. No entanto, esta distribuição é menor se considerada a função deflexão obtida para a superfície espalhadora com índice de Miller $x = 5$

¹ Ver capítulo 3, seção 3.3.3.

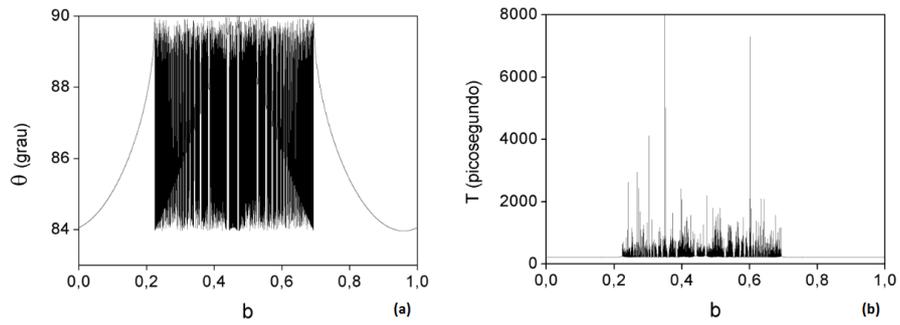


Figura 34: Função de espalhamento obtida a partir das dinâmicas de espalhamento sobre a face cristalográfica $Cu(110)$, com uma energia de incidência de 63 meV. (a) Função deflexão. (b) Função tempo de atraso.

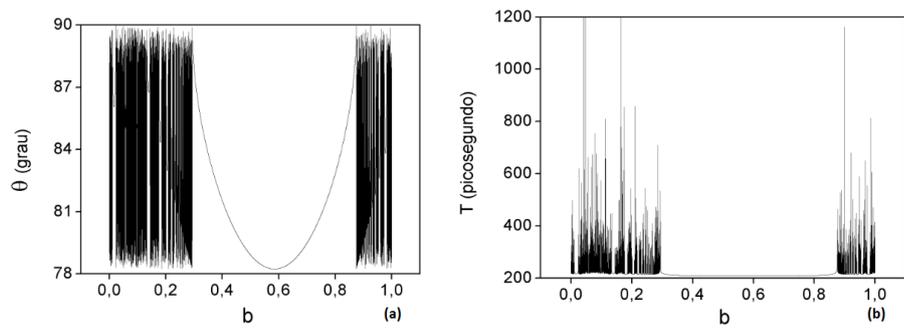


Figura 35: Função de espalhamento obtida a partir das dinâmicas de espalhamento sobre a face cristalográfica $Cu(113)$, com uma energia de incidência de 63 meV. (a) Função deflexão. (b) Função tempo de atraso.

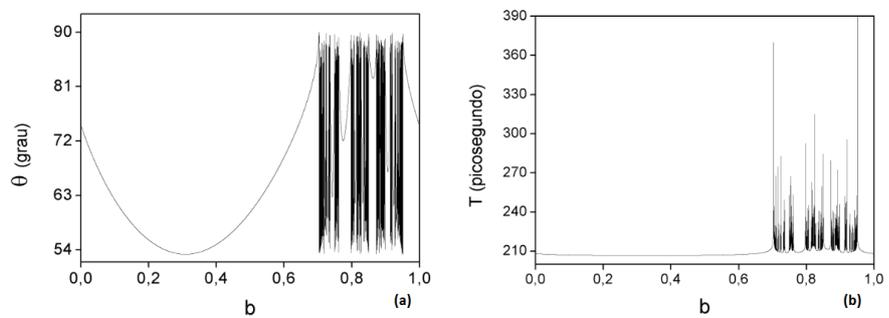


Figura 36: Função de espalhamento obtida a partir das dinâmicas de espalhamento sobre a face cristalográfica $Cu(115)$, com uma energia de incidência de 63 meV. (a) Função deflexão. (b) Função tempo de atraso.

Outra análise importante para o sistema hélio-cobre é a observação da estrutura do espaço de fases referente as dinâmicas de espalhamento, o que pode ser feito através da utilização do método da seção de Poincaré (ver seção 2.2.2 do capítulo 2). A partir desse método enfatiza-se a análise da estrutura do espaço de fases do sistema dinâmico como um todo, em vez de analisar somente a evolução temporal de trajetórias individuais. Logo, a fim de se obter detalhes da evolução temporal do sistema, deve-se ter um profundo conhecimento qualitativo sobre o comportamento das soluções do sistema dinâmico em diferentes locais do espaço de fases.

A seção de Poincaré para as dinâmicas de espalhamento hélio-cobre pode ser construída a partir da simetria observada ao longo da função enrugamento $V(x, z)$ descrita ao longo das coordenadas espaciais x e z . Em cada ponto de mínimo da função enrugamento é marcado um ponto no plano (P_z, z) , formando-se assim a seção de Poincaré. Dessa forma, ao avaliar as seções de Poincaré obtidas para as dinâmicas de espalhamento sobre as distintas superfícies de cobre, foi possível observar a coexistência entre as regiões contendo toros e regiões predominantemente caóticas. Esse comportamento, em especial, é evidenciado na figura 37.(a) e (b), correspondentemente as dinâmicas de espalhamento sobre as superfícies $Cu(110)$ e $Cu(113)$.

Para a seção de Poincaré correspondente as dinâmicas de espalhamento sobre a superfície espalhadora $Cu(115)$, como apresentado na figura 38, é observado o surgimento de uma região nas vizinhanças do ponto $(P_z, z) = (0, 0)$ onde se formam pequenas ilhas de regularidade. Logo, de um modo geral, pode-se dizer que a dinâmica do espalhamento se torna menos caótica quando considerado o aumento da energia de incidência para os átomos, principalmente quando comparada as colisões dos átomos com baixas energias de incidência.

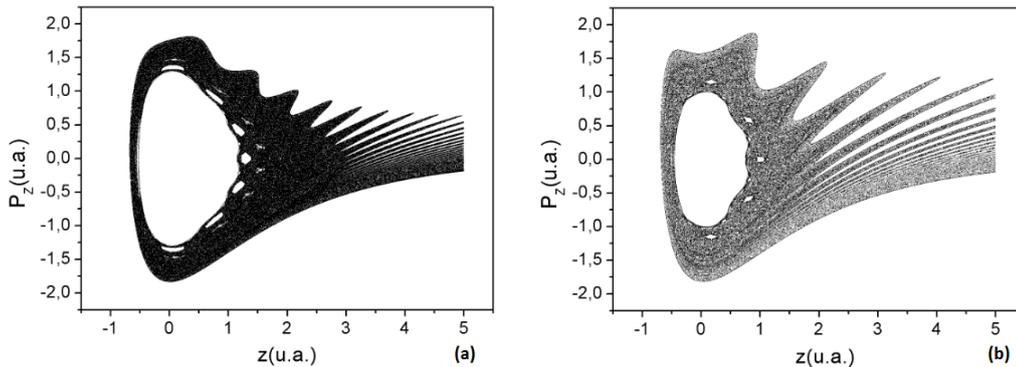


Figura 37: Seção de Poincaré obtida para as dinâmicas de espalhamento sobre distintas faces cristalográficas. Para a sua construção foi tomado o ponto com coordenadas (P_z, z) toda a vez em que $x = \eta_0 + na$, com $n = 0, 1, 2, \dots$ e $\eta_0 = 0$. (a) Face cristalográfica $Cu(110)$. (b) Face cristalográfica $Cu(113)$.

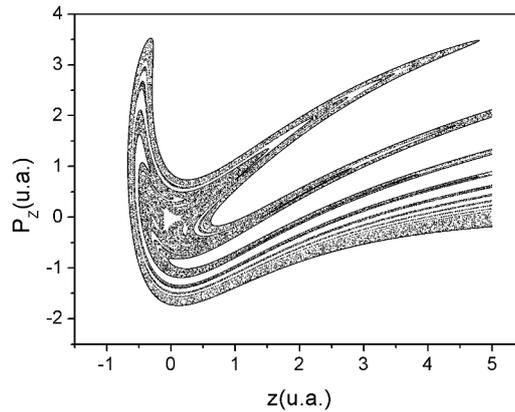


Figura 38: Seção de Poincaré obtida para as dinâmicas de espalhamento sobre a face cristalográfica $Cu(115)$. Para a sua construção foi tomado o ponto com coordenadas (P_z, z) toda a vez em que $x = \eta_0 + na$, com $n = 0, 1, 2, \dots$ e $\eta_0 = 0$.

4.2 Aplicação do Método de Dimensão de Incerteza no Sistema de Espalhamento Hélio-Cobre

Ao observar determinadas regiões da função deflexão obtida para a face cristalográfica $Cu(110)$, com energia de incidência para os átomos de hélio fixada em 21 meV e parâmetro de impacto, normalizado, escolhido no intervalo $0 \leq b \leq 1$, pôde-se perceber a existência de regiões de singularidades em determinados trechos dessa função (ver figura 34). Neste caso, quando realizada uma ampliação na escala das regiões de singularidades é observado que essas regiões consistem de uma série de subdomínios suaves (que correspondem as colisões diretas dos átomos de hélio com a superfície) e de regiões de singularidades [2]. Logo, o aspecto fractal dessas regiões pode ser revelado quando realizadas sucessivas ampliações, em que são observadas repetições em diversas escalas das singularidades e dos subdomínios suaves.

Uma das formas de caracterizar as regiões de singularidades da função de espalhamento é através do cálculo da dimensão fractal, o que pode ser realizado com a aplicação do método da dimensão de incerteza descrito por Lau *et al.* [7] (ver subseção 3.5 do capítulo 3). Porém, antes mesmo de se obter o valor da dimensão de incerteza referente às regiões de singularidades que surgem na função deflexão do sistema hélio-cobre, será enfatizado o trabalho realizado por Lau *et al.* [7]. Nesse trabalho, foi calculada a dimensão de incerteza sobre a função tempo de atraso, de um sistema que exhibe espalhamento classicamente caótico e cujo regime do espalhamento é não hiperbólico.

Durante o cálculo da dimensão de incerteza foram observados duas características importantes. A primeira característica refere-se a escolha do intervalo de variáveis de entrada, em que foi demonstrada uma dependência entre o valor da dimensão de incerteza

e o intervalo escolhido para as variáveis de entrada. Já a segunda características refere-se a relação entre o valor da dimensão de incerteza e o regime do espalhamento. Portanto, a partir dos resultados obtidos conjecturou-se que os valores das dimensões de incerteza que se aproximam da unidade estão associados a um regime não hiperbólico para o espalhamento, enquanto os valores que se distanciam da unidade estão associados ao regime hiperbólico.

Uma análise semelhante foi utilizada no estudo sistemático da dimensão de incerteza no sistema hélio-cobre, em que foram considerados distintos intervalos de parâmetro de impacto, normalizados, b (isto é, as variáveis de entrada do sistema). Logo, em cada um dos novos intervalos, ou refinamentos, foi calculada a dimensão fractal da região de singularidades através do método da dimensão de incerteza obtida sobre a função tempo de atraso [7].

Na tabela 2 são apresentados os novos intervalos de parâmetros de impacto, normalizados, b , que são utilizados no cálculo da dimensão de incerteza das regiões de singularidades. A escolha dos novos intervalos está relacionada com as regiões de singularidades que surgem na função deflexão $\theta(b)$, e tem como propósito a eliminação das colisões diretas do cálculo da dimensão de incerteza. Neste caso, tome-se como exemplo, a região de singularidades que está aproximadamente compreendida no intervalo $0.41014 \leq b \leq 0.86242$ da função deflexão obtida para as colisões sobre a superfície espalhadora $Cu(110)$. Essa região, em especial, é tomada como o primeiro intervalo do refinamento, e nela é calculado o valor da dimensão de incerteza.

| – | Refinamento 1 | Refinamento 2 | Refinamento 3 | Refinamento 4 |
|-----------|-------------------|-------------------|-------------------|-------------------|
| 110-21meV | [0.41014;0.86242] | [0.56052;0.69556] | [0.64126;0.68032] | [0.66026;0.67612] |
| 110-63meV | [0.22454;0.69358] | [0.30238;0.67648] | [0.30724;0.63562] | [0.41986;0.58366] |
| 113-21meV | [0.1795;0.5682] | [0.24258;0.48748] | [0.2887;0.43052] | [0.30768;0.40554] |
| 113-63meV | [0;0.29386] | [0.02346;0.2686] | [0.05826;0.20116] | [0.09916;0.1335] |
| 115-21meV | [0.36136;0.6184] | [0.4164;0.57798] | [0.51538;0.4404] | [0.45226;0.47674] |
| 115-63meV | [0.70326;0.9507] | [0.73212;0.91958] | [0.74926;0.89812] | [0.7975;0.85006] |
| 117-21meV | [0.75812;0.96988] | [0.89142;0.96988] | [0.93846;0.96746] | [0.96012;0.96596] |

Tabela 2: Novos intervalos de parâmetros de impacto, normalizados, escolhidos entre $0 \leq b \leq 1$, considerando-se as distintas faces cristalográficas e energia de incidência para os átomos fixada em 21 meV e 63 meV.

Os valores absolutos obtidos para as dimensões de incerteza, quando considerado o primeiro refinamento sobre as distintas faces cristalográficas, são: $d = 0.947 \pm 0.004$ para $Cu(110)$, $d = 0.86 \pm 0.01$ para $Cu(113)$, $d = 0.76 \pm 0.01$ para $Cu(115)$ e $d = 0.72 \pm 0.01$ para $Cu(117)$. A partir das figuras 39–42, nota-se que os valores da dimensão de incerteza são obtidos através da inclinação do gráfico $f(\varepsilon)/\varepsilon$ em função de ε em escala $\log-\log$. Além disso, para a obtenção de cada ponto no gráfico da dimensão de incerteza, considerou-se

a evolução temporal de um conjunto de condições iniciais ($\sim 10^4$), simulando as colisões elásticas entre os átomos e a superfície de cobre.

Para cada colisão, foi utilizado um conjunto de variáveis de entrada, a energia de incidência para os átomos fixada em 21 e 63 meV, ângulo de incidência $\theta = 89.999^\circ$ e parâmetro de impacto, normalizado, entre $0 \leq b \leq 1$. Os resultados dos valores absolutos das dimensões de incerteza obtidos para as faces cristalográficas $Cu(110)$, $Cu(113)$ e $Cu(115)$, ambas com energia de incidência para os átomos de hélio incidentes fixada em 63 meV, são apresentados nas figuras 43–45. Nesse caso, os valores absolutos encontrados para as dimensões de incerteza são: $d = 0.987 \pm 0.001$ para $Cu(110)$, $d = 0.93 \pm 0.01$ para $Cu(113)$ e $d = 0.78 \pm 0.01$ para $Cu(115)$.

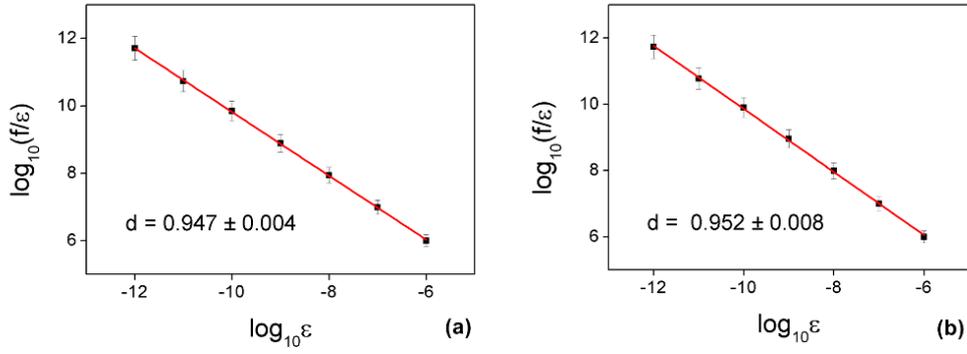


Figura 39: Dimensão de incerteza obtida para a região de singularidades da função de espalhamento da superfície espalhadora $Cu(110)$ com energia de incidência fixada em 21 meV. (a) Para o intervalo do parâmetro de impacto, normalizado, $[0.41014; 0.86242]$ (b) Para o segundo intervalo para o refinamento $[0.56052; 0.69556]$.

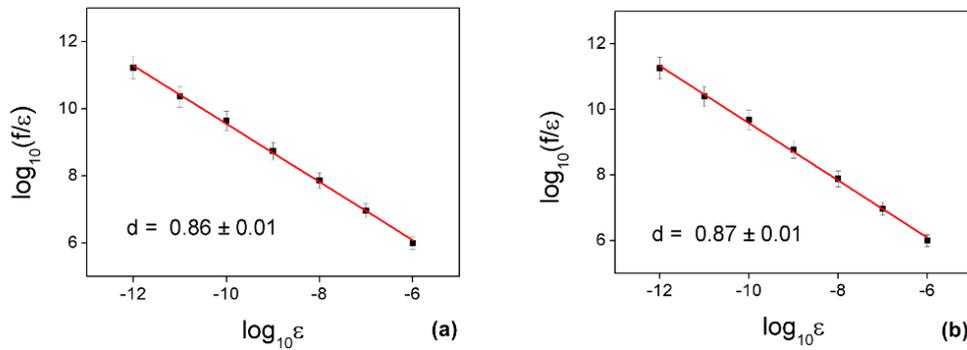


Figura 40: Dimensão de incerteza obtida para a região de singularidades da função de espalhamento da superfície $Cu(113)$ com energia de incidência fixada em 21 meV. (a) Para o intervalo do parâmetro de impacto, normalizado, $[0.1795; 0.5682]$. (b) Para o segundo intervalo para o refinamento $[0.24258; 0.48748]$.

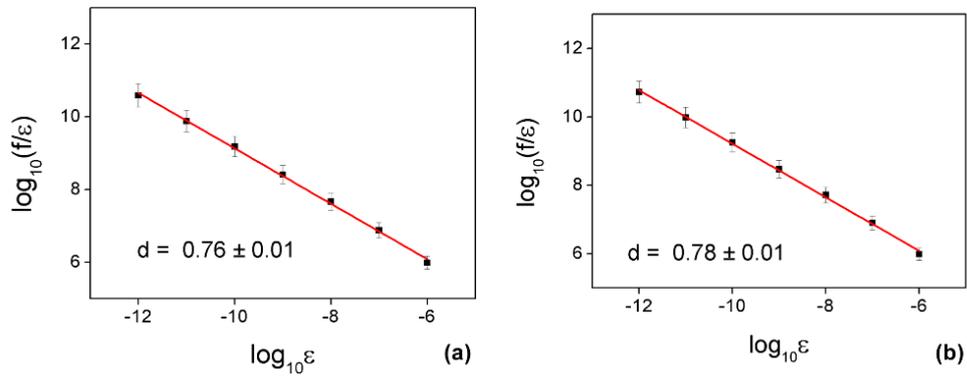


Figura 41: Dimensão de incerteza obtida para a região de singularidades da função de espalhamento da superfície $Cu(115)$ com energia de incidência fixada em 21 meV. (a) Para o intervalo do parâmetro de impacto normalizado, $[0.36136; 0.6184]$. (b) Para o segundo intervalo para o refinamento $[0.4164; 0.57798]$.

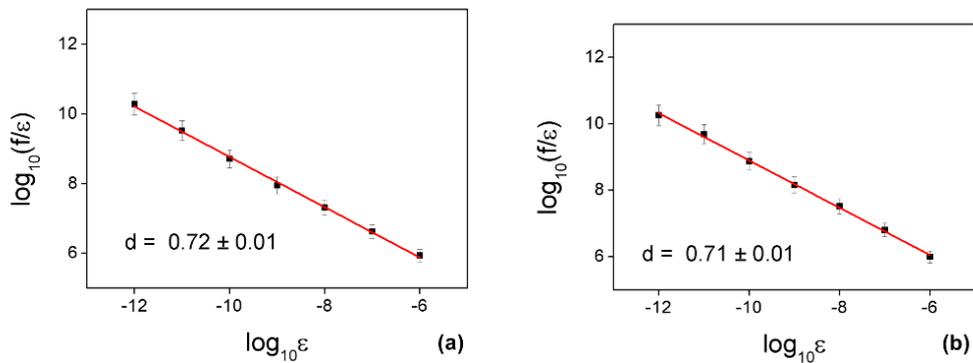


Figura 42: Dimensão de incerteza obtida para a região de singularidades da função de espalhamento da superfície $Cu(117)$ com energia de incidência fixada em 21 meV. (a) Para o intervalo do parâmetro de impacto, normalizado, $[0.75812; 0.96988]$. (b) Para o segundo intervalo para o refinamento $[0.89142; 0.96988]$.

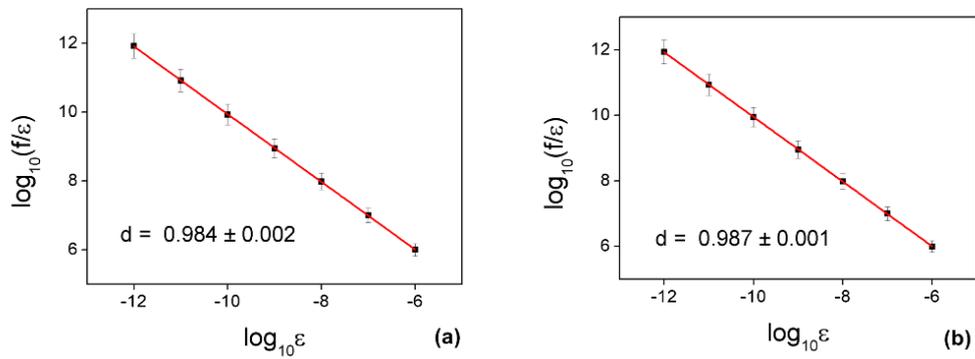


Figura 43: Dimensão de incerteza obtida para a região de singularidades da função de espalhamento da superfície $Cu(110)$ com energia de incidência fixada em 63 meV. (a) Para o intervalo do parâmetro de impacto, normalizado, $[0.22454; 0.69358]$. (b) Para o segundo intervalo para o refinamento $[0.30238; 0.67648]$.

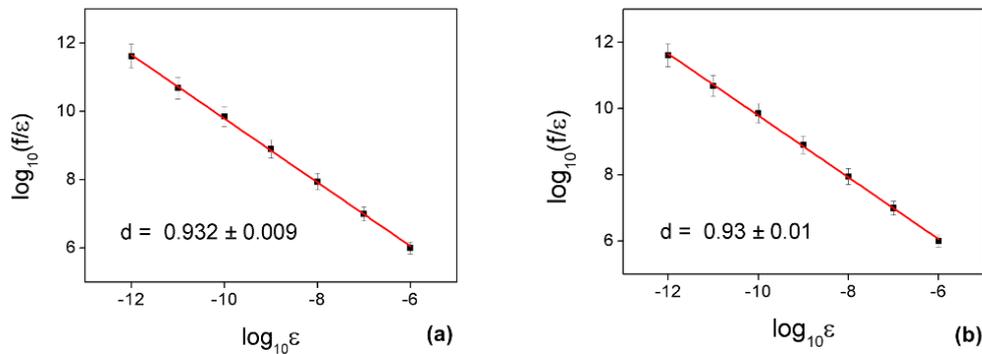


Figura 44: Dimensão de incerteza obtida para a região de singularidades da função de espalhamento da superfície $Cu(113)$ com energia de incidência fixada em 63 meV. (a) Para o intervalo do parâmetro de impacto, normalizado, $[0; 0.29386]$. (b) Para o segundo intervalo para o refinamento $[0.02346; 0.2686]$.

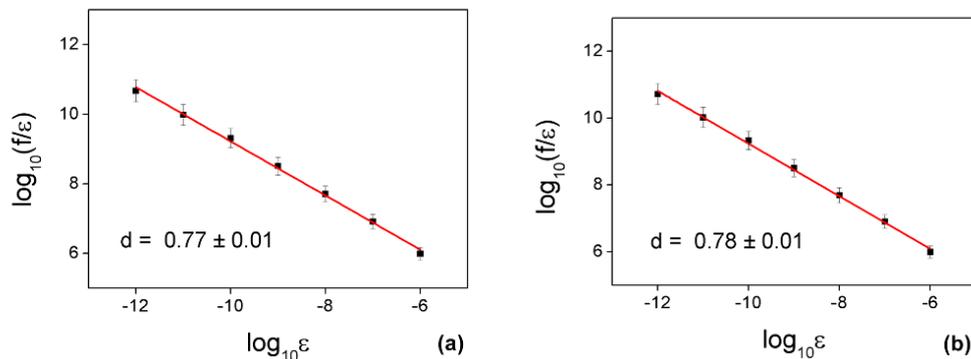


Figura 45: Dimensão de incerteza obtida para a região de singularidades da função de espalhamento da superfície $Cu(115)$ com energia de incidência fixada em 63 meV. (a) Para o intervalo do parâmetro de impacto, normalizado, $[0.70326; 0.9507]$. (b) Para o segundo intervalo para o refinamento $[0.73212; 0.91958]$.

Na tabela 3, são apresentados os valores absolutos das dimensões de incerteza obtidas para cada um dos intervalos de refinamento quando consideradas as distintas faces cristalográficas envolvidas neste estudo² e as energias de incidência para os átomos fixadas em 21 e 63 meV. Na análise dos valores da dimensão de incerteza, levou-se em consideração os diferentes refinamentos sobre uma mesma face cristalográfica, com energia de incidência constante para os átomos de hélio.

Da mesma forma que demonstrado por Lau *et al.* [7] em seu trabalho, foi verificado na análise dos valores das dimensões de incerteza no sistema hélio-cobre a dependência entre o valor para a dimensão e o intervalo para o refinamento. Para intervalos de refinamento que contenham uma grande quantidade de bacias (que estão relacionadas as colisões diretas dos átomos com a superfície) é observado que a dimensão da incerteza tende a variar entre valores menores que a unidade, mesmo quando considerado o regime não hiperbólico. Dessa forma, foi escolhido um intervalo de refinamento que seja o mais adequado para a análise da dimensão de incerteza, sendo esse o quarto intervalo do refinamento apresentado na tabela 2.

Para o quarto intervalo de refinamento, foram calculados e comparados os valores absolutos das dimensões de incerteza para cada uma das faces cristalográficas, levando-se em conta apenas a variação do índice de Miller para a superfície de cobre e uma energia de incidência constante para os átomos. Os resultados obtidos para os valores absolutos das dimensões de incerteza podem ser visualizados na tabela 4. Logo, quando avaliadas as dinâmicas de espalhamento sobre as superfícies $Cu(110)$ e $Cu(113)$, pôde ser verificado uma aproximação entre o valor absoluto da dimensão de incerteza e a unidade. No entanto, quando avaliadas as dinâmicas de espalhamento sobre as superfícies $Cu(115)$ e $Cu(117)$, os valores absolutos obtidos para as dimensões de incerteza tendem a se distanciar da unidade. Neste caso, é então sugerido que a aproximação do valor da dimensão de incerteza com a unidade, verificada nas superfícies espalhadoras $Cu(110)$ e $Cu(113)$, esteja associada a presença de um regime não hiperbólico para o espalhamento. Já o distanciamento da dimensão de incerteza com a unidade, verificado nas superfícies espalhadoras $Cu(115)$ e $Cu(117)$, está associado a presença de um regime hiperbólico.

² Deve-se enfatizar, porém, que não foi analisado o espalhamento dos átomos de hélio sobre a face cristalográfica $Cu(117)$ envolvendo a energia de incidência de 63 meV.

| Face cristalográfica-Energia | Refinamento 1 | Refinamento 2 | Refinamento 3 |
|------------------------------|-------------------|-------------------|-------------------|
| 110-21 | 0.947 ± 0.004 | 0.952 ± 0.008 | 0.962 ± 0.007 |
| 110-63 | 0.987 ± 0.001 | 0.984 ± 0.002 | 0.990 ± 0.001 |
| 113-21 | 0.86 ± 0.01 | 0.87 ± 0.01 | 0.87 ± 0.01 |
| 113-63 | 0.93 ± 0.01 | 0.932 ± 0.009 | 0.94 ± 0.01 |
| 115-21 | 0.76 ± 0.01 | 0.78 ± 0.01 | 0.78 ± 0.01 |
| 115-63 | 0.78 ± 0.01 | 0.77 ± 0.01 | 0.80 ± 0.01 |
| 117-21 | 0.72 ± 0.01 | 0.71 ± 0.01 | 0.70 ± 0.01 |

Tabela 3: Valores da dimensão de incerteza obtidos para diferentes intervalos para o refinamento, com energia de incidência para o átomo de hélio e índices de Miller para as faces cristalográficas constantes.

| Face cristalográfica-Energia (21 meV) | dimensão |
|---------------------------------------|-------------------|
| 110-21 | 0.967 ± 0.008 |
| 113-21 | 0.87 ± 0.02 |
| 115-21 | 0.79 ± 0.02 |
| 117-21 | 0.72 ± 0.02 |
| Face cristalográfica-Energia (63 meV) | dimensão |
| 110-63 | 0.988 ± 0.001 |
| 113-63 | 0.93 ± 0.01 |
| 115-63 | 0.77 ± 0.02 |
| — | — |

Tabela 4: Valores da dimensão de incerteza obtidos para diferentes intervalos de refinamento, com energia de incidência fixada em 21 e 63 meV para os átomos de hélio e índices de Miller para as faces cristalográficas constantes.

Em uma última análise para a dimensão de incerteza, foi considerada a aplicação da aproximação semiclássica em um sistema dinâmico hipotético, que de forma similar ao sistema hélio-cobre, exibe espalhamento caótico. Para a análise das dinâmicas, correspondentes as colisões elásticas entre as partículas e a superfície enrugada, foram construídas as funções de espalhamento e calculadas as dimensões de incerteza. Nesse caso, baseando-se no princípio de correspondência de Bohr, tem-se que, em determinadas situações limites a teoria quântica deve se reduzir a teoria clássica, de modo que é possível observar a assinatura do caos clássico em seu correspondente sistema quântico. Considerou-se para isso, o limite de grandes massas das partículas incidentes no sistema dinâmico hipotético. Logo, o aumento da massa das partículas incidentes tem como objetivo a obtenção da relação, $h/(m2\pi) \rightarrow 0$, o que, dessa forma, obedece o princípio de correspondência de Bohr. A partir daí, descreve-se a seguinte situação para o sistema dinâmico hipotético: considere-se as colisões elásticas entre partículas com massa de $m = 200 m_{He}$ e $m = 400 m_{He}$, em que m_{He} é a massa do átomo de hélio, e uma superfície de cobre enrugada (nesse caso são utilizados os mesmos parâmetros que descrevem a superfície de cobre no sistema hélio-cobre).

As funções de espalhamento obtidas para as partículas incidentes com massas de 200 e 400 vezes a massa do hélio e energia de incidência para as partículas fixada em 21 meV, são apresentadas na figura 46 para a face cristalográfica $Cu(110)$ e na figura 47 para a face cristalográfica $Cu(115)$. Além disso, as funções de espalhamento também foram obtidas quando consideradas partículas incidentes com energia fixada em 63 meV, essas, por sua vez, apresentadas na figura 48 para a face cristalográfica $Cu(110)$ e na figura 49 para a face cristalográfica $Cu(115)$. Foram obtidas, também, as seções de Poincaré correspondentes as dinâmicas de espalhamento das partículas com massa $m = 200 m_{He}$ e energia de incidência de 21 meV sobre as superfícies espalhadoras $Cu(110)$ e $Cu(117)$, como observado respectivamente nas figuras 50 e 51.

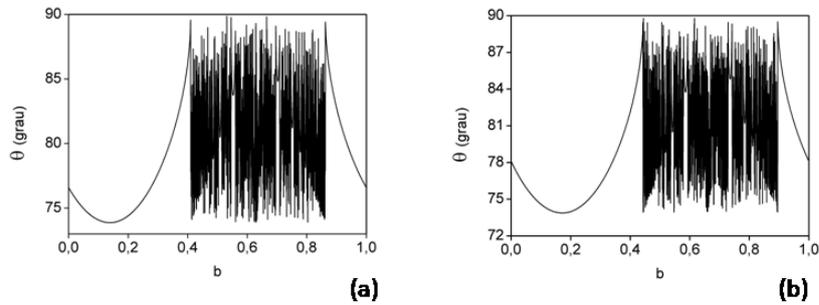


Figura 46: Função de espalhamento obtida para as dinâmicas de espalhamento sobre a face cristalográfica $Cu(110)$, quando considerada a energia de incidência para os átomos fixada de hélio fixada em 21 meV. (a) Função deflexão para o sistema com massa $m = 200 m_{He}$. (b) Função deflexão para o sistema com massa $m = 400 m_{He}$.

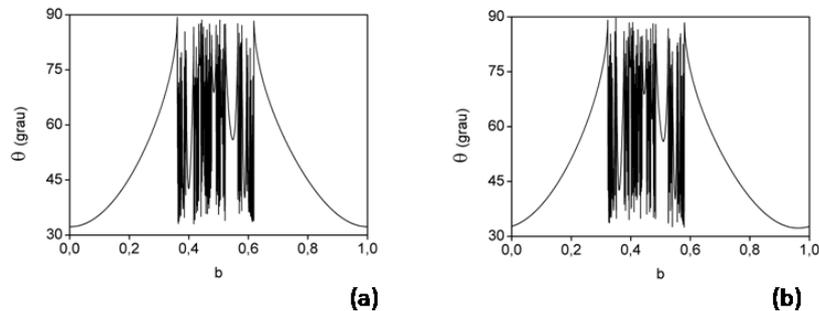


Figura 47: Função de espalhamento obtida para as dinâmicas de espalhamento sobre a face cristalográfica $Cu(115)$, quando considerada a energia de incidência para os átomos fixada de hélio fixada em 21 meV. (a) Função deflexão para o sistema com massa $m = 200 m_{He}$. (b) Função deflexão para o sistema com massa $m = 400 m_{He}$.

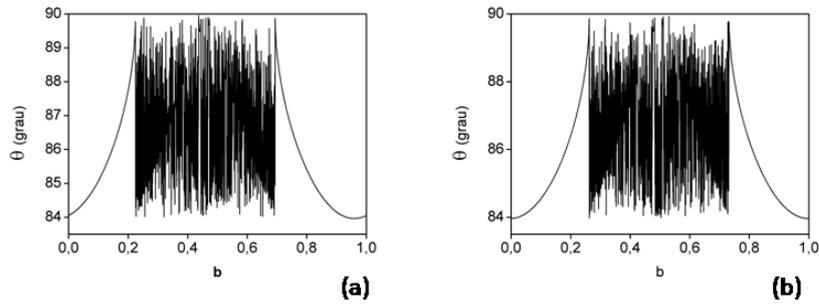


Figura 48: Função de espalhamento obtida para as dinâmicas de espalhamento sobre face cristalográfica $Cu(110)$, quando considerada a energia de incidência para os átomos fixada de hélio fixada em 63 meV. (a) Função deflexão para o sistema com massa $m = 200 m_{He}$. (b) Função deflexão para o sistema com massa $m = 400 m_{He}$.

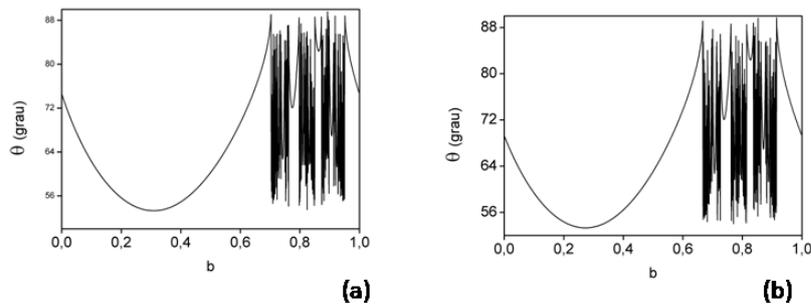


Figura 49: Função de espalhamento obtida para as dinâmicas de espalhamento sobre a face cristalográfica $Cu(115)$, quando considerada a energia de incidência para os átomos fixada de hélio fixada em 63 meV. (a) Função deflexão para o sistema com massa $m = 200 m_{He}$. (b) Função deflexão para o sistema com massa $m = 400 m_{He}$.

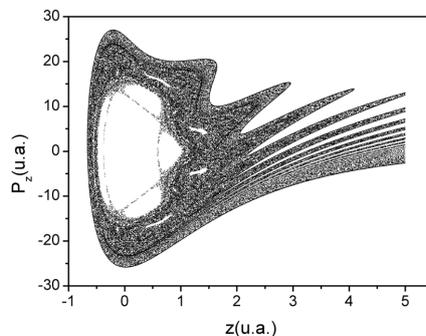


Figura 50: Seção de Poincaré obtida para as dinâmicas de espalhamento sobre a superfície $Cu(110)$, considerando-se o espalhamento de partículas com energia de incidência de 21 meV e massa $m = 200 m_{He}$.

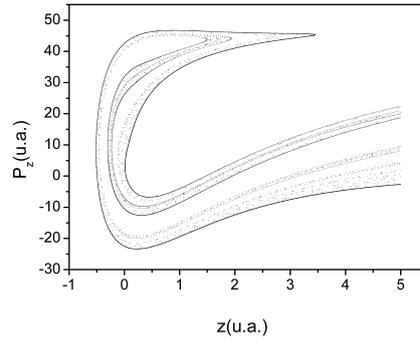


Figura 51: Seção de Poincaré obtida para o espalhamento sobre a superfície espalhadora $Cu(117)$, considerando-se o espalhamento de partículas com energia de incidência de 21 meV e massa $m = 200 m_{He}$.

Da mesma forma como demonstrado na seção 4.1 deste capítulo, foi observado o surgimento de regiões de singularidades nas funções de espalhamento. Essas singularidades, do mesma forma que no sistema hélio-cobre, estão associadas ao aprisionamento das partículas na região de espalhamento. Tal associação, neste caso, pode ser melhor observada ao comparar os gráficos das funções deflexões e os gráficos da função tempo de atraso, obtidos para as distintas faces cristalográficas. Para a caracterização das regiões de singularidades considerou-se também a obtenção dos valores correspondentes as dimensões de incerteza dessas regiões. Nessa análise, considerou-se também o uso da técnica do refinamento no cálculo da dimensão de incerteza. Porém, deve-se enfatizar que apenas o quarto intervalo de refinamento (ver tabela 2) foi utilizado durante o cálculo da dimensão de incerteza.

| Face cristalográfica-Energia (21 meV) | dimensão |
|---------------------------------------|---------------------|
| 110 | 0.9999 ± 0.0001 |
| 113 | 0.967 ± 0.006 |
| 115 | 0.883 ± 0.001 |
| 117 | 0.82 ± 0.02 |
| Face cristalográfica-Energia (63 meV) | dimensão |
| 110 | 1.0000 ± 0.0001 |
| 113 | 0.996 ± 0.006 |
| 115 | 0.83 ± 0.02 |
| — | — |

Tabela 5: Valores da dimensão de incerteza obtidos para o espalhamento hipotético de uma massa $m = 200 m_{He}$ no espalhamento hélio-cobre. Considerou-se para esta situação o quarto intervalo de refinamento, energias fixadas em 21 e 63 meV para os átomos de hélio incidentes e a variação dos índices de Miller para as faces cristalográficas.

Os valores obtidos para as dimensões de incerteza, quando consideradas as colisões elásticas das partículas com massa de $m = 200 m_{He}$ e $m = 400 m_{He}$ vezes a massa do

hélio, são apresentados e comparados respectivamente nas tabelas 5 e 6. Da mesma forma como foi procedido no sistema hélio-cobre, o valor da dimensão de incerteza é obtido a partir da inclinação do gráfico $f(\varepsilon)/\varepsilon$ em função de ε , em escala $\log-\log$. Esses valores são apresentados nas figuras 52.(a) – 55.(a) obtidas para as colisões de partículas incidentes com massa de $m = 200 m_{He}$ sobre as distintas superfícies espalhadoras, e nas figuras 52.(b) – 55.(b) para as colisões de partículas incidentes com massa de $m = 400 m_{He}$ (em ambos os casos foi usada a energia de incidência de 21 meV para as partículas).

| | |
|---------------------------------------|---------------------|
| Face cristalográfica-Energia (21 meV) | dimensão |
| 110 | 0.999 ± 0.0003 |
| 113 | 0.992 ± 0.005 |
| 115 | 0.92 ± 0.01 |
| 117 | 0.86 ± 0.02 |
| Face cristalográfica-Energia (63 meV) | dimensão |
| 110 | 1.0000 ± 0.0001 |
| 113 | 0.999 ± 0.001 |
| 115 | 0.87 ± 0.01 |
| – | – |

Tabela 6: Valores da dimensão de incerteza obtidos para o espalhamento hipotético de uma massa $m = 400 m_{He}$ no espalhamento hélio-cobre. Considerou-se para esta situação o quarto intervalo de refinamento, energias fixadas em 21 e 63 meV para os átomos de hélio incidentes e a variação dos índices de Miller para as faces cristalográficas.

A partir dos resultados obtidos para as dimensões de incerteza, pode-se concluir que no limite de grandes massas é exibida uma maior aproximação entre o valor da dimensão de incerteza e a unidade, em comparação aos resultados exibidos no sistema hélio-cobre. Portanto, pode-se dizer que a dinâmica do espalhamento para o sistema se torna menos caótica conforme considerado o aumento da massa da partícula incidente.

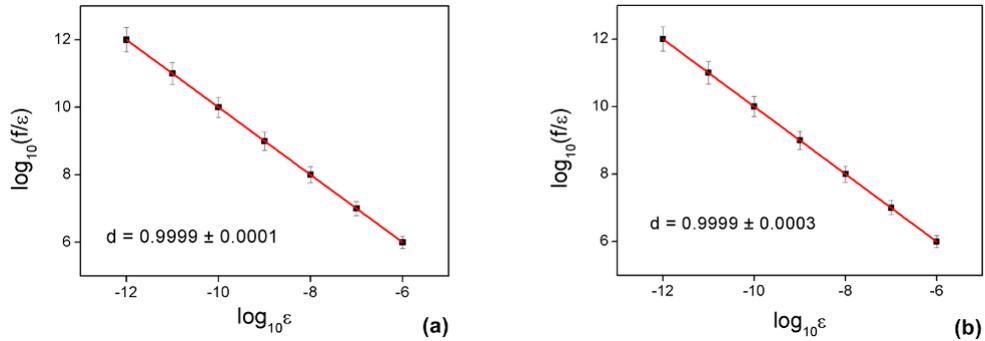


Figura 52: Dimensão de incerteza correspondente a região de singularidades da função de espalhamento obtida para as dinâmicas de espalhamento sobre a superfície $Cu(110)$. Considerou-se para isso, o intervalo de parâmetro de impacto, normalizado, $[0.66026; 0.67612]$ e energia de incidência das partículas fixada em 21 meV. (a) Partículas incidentes com massa de $m = 200 m_{He}$. (b) Partículas incidentes com massa de $m = 400 m_{He}$.

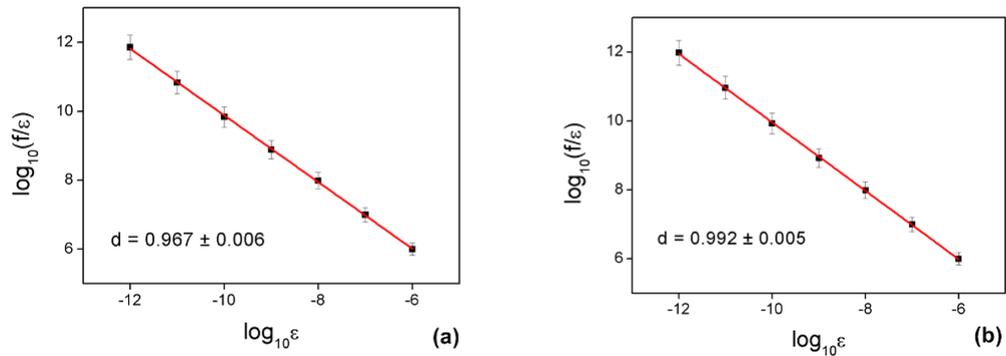


Figura 53: Dimensão de incerteza correspondentes a região de singularidades da função de espalhamento obtida para as dinâmicas de espalhamento sobre a superfície $Cu(113)$. Considerou-se para isso, o intervalo de parâmetro de impacto, normalizado, $[0.30768; 0.40554]$ e energia de incidência para as partículas fixada em 21 meV. (a) Partículas incidentes com massa de $m = 200 m_{He}$. (b) Partículas incidentes com massa de $m = 400 m_{He}$.

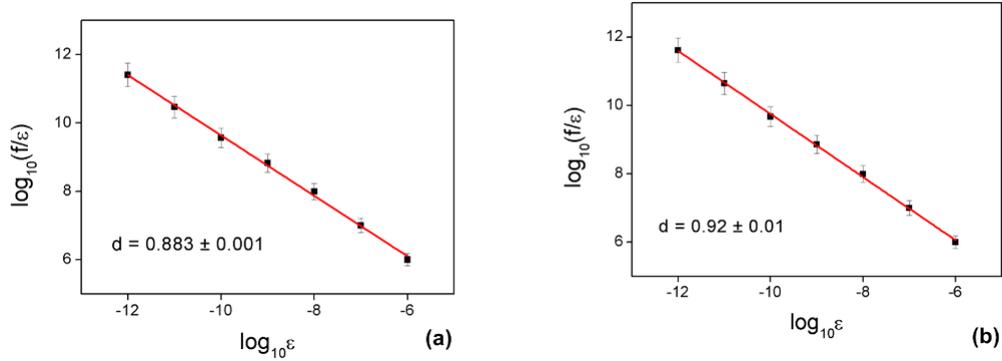


Figura 54: Dimensão de incerteza correspondente a região de singularidades da função de espalhamento obtida para as dinâmicas de espalhamento sobre a superfície $Cu(115)$. Considerou-se para isso, o intervalo de parâmetro de impacto, normalizado, $[0.45226; 0.47674]$ e energia de incidência para as partículas fixada em 21 meV. (a) Partículas incidentes com massa de $m = 200 m_{He}$. (b) Partículas incidentes com massa de $m = 400 m_{He}$.

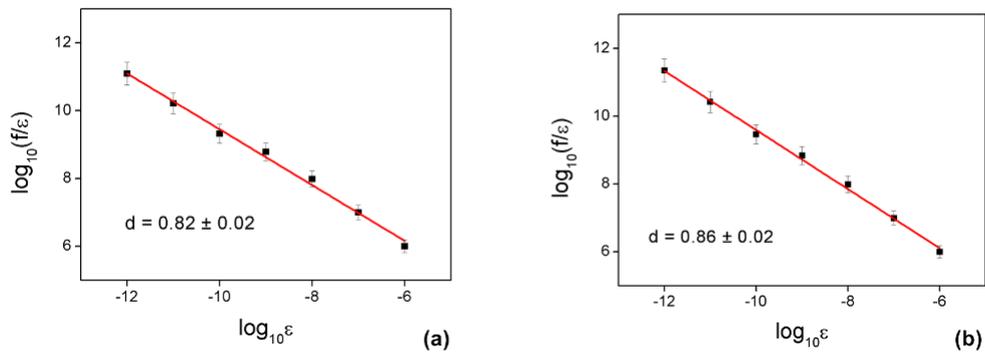


Figura 55: Dimensão de incerteza correspondente a região de singularidades da função de espalhamento obtida para as dinâmicas de espalhamento sobre a superfície $Cu(117)$. Considerou-se para isso, o intervalo de parâmetro de impacto, normalizado, $[0.96012; 0.96596]$ e energia de incidência para as partículas fixada em 21 meV. (a) Partículas incidentes com massa de $m = 200 m_{He}$. (b) Partículas incidentes com massa de $m = 400 m_{He}$.

4.3 Aplicação do *SALI* no Sistema de Espalhamento Hélio-Cobre

Como debatido na seção 3.6 do capítulo 3, a ideia básica por trás da aplicação do *SALI* é a introdução de dois vetores desvio unitários $\vec{v}_i = (\delta q_{1i}, \delta q_{2i}, \delta p_{1i}, \delta p_{2i})$, para $i = 1, 2$, referentes a uma condição inicial. Da mesma forma, são acompanhadas as evoluções temporais dos dois vetores desvio e da condição inicial, em que para cada passo de tempo dessa evolução são observadas as direções finais de cada um dos vetores desvio. Logo, o conjunto de equações que define a evolução temporal do par de vetores desvio, ou seja, as suas equações de movimento, são dadas por:

$$(\delta \dot{q}_{1i}) = \frac{\partial^2 H}{\partial p_1^2} \delta p_{01}; \quad (\delta \dot{p}_{1i}) = - \left(\delta q_{01} \frac{\partial^2 H}{\partial q_1^2} + \frac{\partial^2 H}{\partial q_1 \partial q_2} \delta q_{02} \right) \quad (4.1)$$

e

$$(\delta \dot{q}_{2i}) = \frac{\partial^2 H}{\partial p_2^2} \delta p_{02}; \quad (\delta \dot{p}_{2i}) = - \left(\delta q_{01} \frac{\partial^2 H}{\partial q_2 \partial q_1} + \frac{\partial^2 H}{\partial q_2^2} \delta q_{02} \right), \quad (4.2)$$

em que $\vec{v}_{0i} = (\delta q_{01}, \delta q_{02}, \delta p_{01}, \delta p_{02})$ é o vetor desvio inicial e $\chi = (q_1, q_2, p_1, p_2)$ corresponde a condição inicial da trajetória de referência (o cálculo das equações de movimento referentes ao par de vetores desvio é demonstrado no apêndice A).

O par de vetores desvio para a trajetória de referência é dado inicialmente pela escolha: $\vec{v}_{01} = (0, 10^{-5}, 10^{-5}, 10^{-5})$ e $\vec{v}_{02} = (10^{-5}, 0, 0, 0)$. Contudo, deve-se considerar que quaisquer que sejam as escolhas para o par de vetores desvio, desde que tenham norma unitária, conduz a um comportamento similar para o *SALI*. Ao definir o par de vetores desvio e conhecidas as suas equações de movimento é de interesse que a cada passo de tempo de sua evolução temporal seja registrado o valor do *SALI*. Deste modo, a medida do *SALI* é capaz de determinar o comportamento da trajetória do sistema como regular ou caótica.

O método do *SALI* pode ser utilizado não somente na determinação do comportamento da trajetória, mas também, de forma semelhante à função de espalhamento, pode ser usado na verificação e distinção das regiões de singularidades. Ao considerar as faces cristalográficas *Cu*(110), *Cu*(113), *Cu*(115) e *Cu*(117), e as energias de incidência para os átomos fixadas em 21 e 63 meV (exceto para a superfície *Cu*(117), que foi utilizada apenas a energia de 21 meV), foram avaliadas as evoluções temporais de um determinado conjunto de condições iniciais, em que a cada passo tempo dessa evolução são obtidas informações sobre o comportamento dinâmico de suas respectivas trajetórias. Uma dessas informações refere-se à evolução temporal do $\ln(SALI)$.

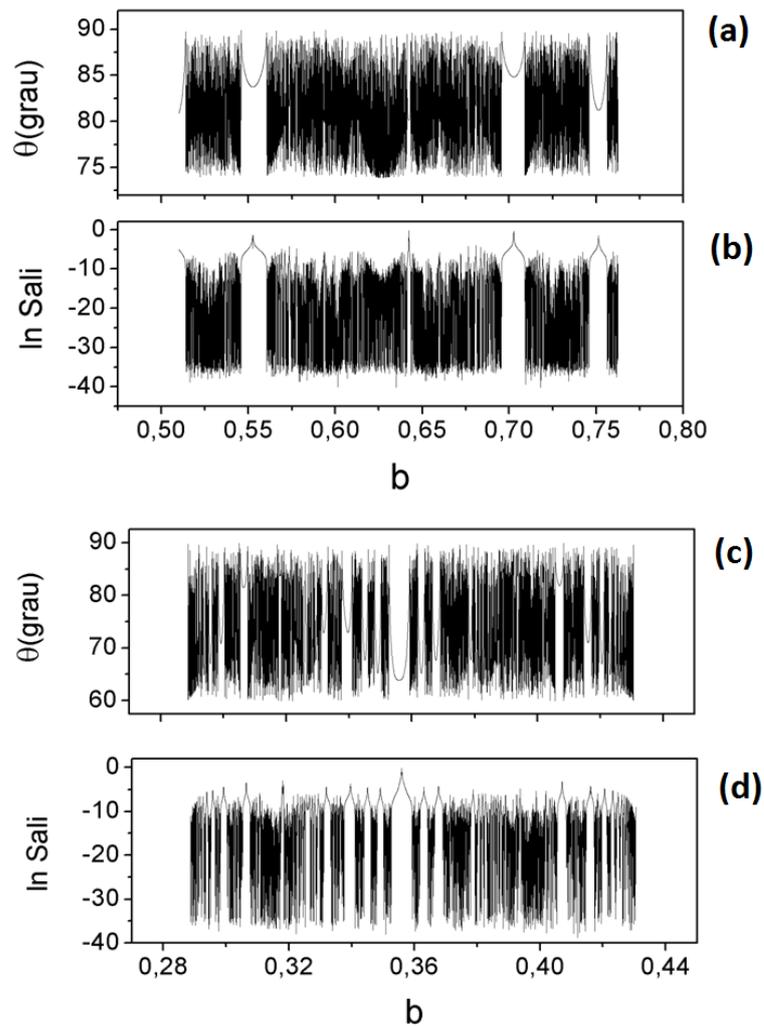


Figura 56: Comparação entre os gráficos do $\ln(SALI)$ versus b e a função deflexão $\theta(b)$. Nas figuras (a) e (b), considera-se a face cristalográfica $Cu(110)$ e energia de incidência para os átomos fixada em 21 meV. Enquanto nas figuras (c) e (d), considera-se a face cristalográfica $Cu(113)$ e energia de incidência para os átomos fixada em 21 meV.

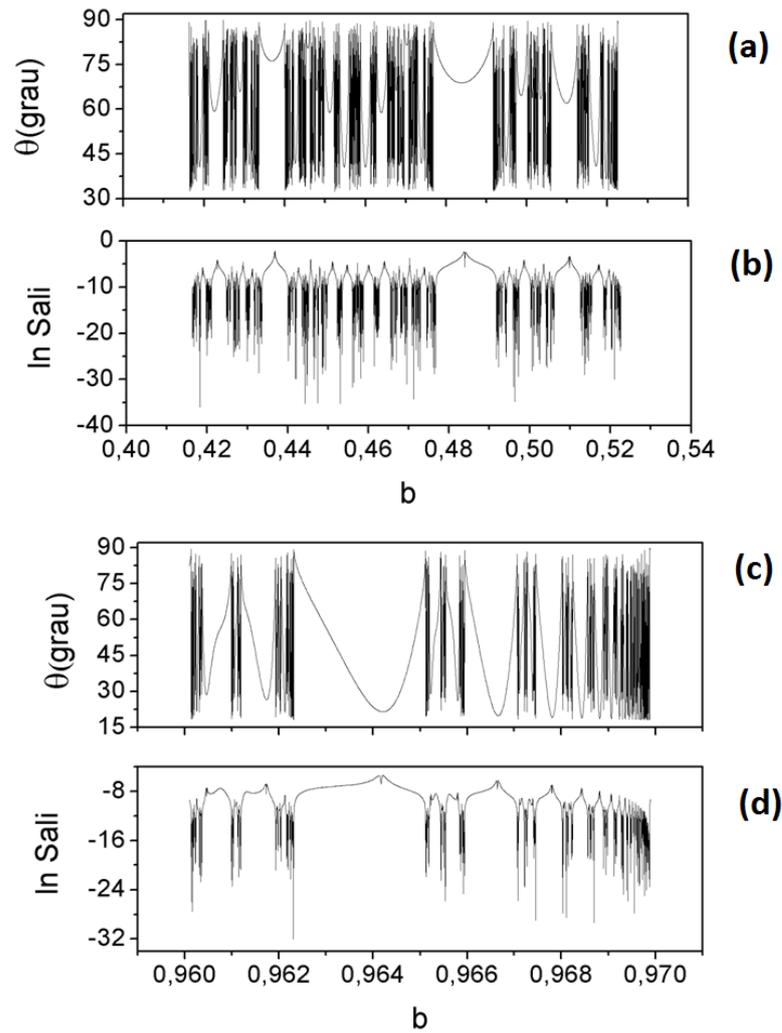


Figura 57: Comparação entre os gráficos do $\ln(SALI)$ versus b e a função deflexão $\theta(b)$. Nas figuras (a) e (b), considera-se a face cristalográfica $Cu(115)$ e energia de incidência para os átomos fixada em 21 meV. Enquanto nas figuras (c) e (d), considera-se a face cristalográfica $Cu(117)$ e energia de incidência para os átomos fixada em 21 meV.

Para o cálculo do $SALI$, foi acompanhada a evolução temporal de um conjunto de condições iniciais ($\sim 10^4$ órbitas, ou trajetórias), sendo que essas condições são caracterizadas a partir do parâmetro de impacto, normalizado, b , escolhido dentre os intervalos de refinamento apresentados na tabela 2, o ângulo de incidência de 89.999° e a energia de incidência para os átomos fixado em 63 e 21 meV. Dessa forma, em cada uma das respectivas trajetórias, foi calculado o valor do $SALI$ no tempo máximo de integração das equações de movimento, ou seja, quando registrada a saída de cada átomo de hélio da região de espalhamento. Como resultado, foi construído o gráfico do $\ln(SALI)$ em função do parâmetro de impacto, normalizado, “ b ”, o qual permitiu-se a distinção entre as trajetórias caóticas e regulares.

Nesse caso, como pôde ser observado na seção 3.6 do capítulo 3, o valor do $SALI$

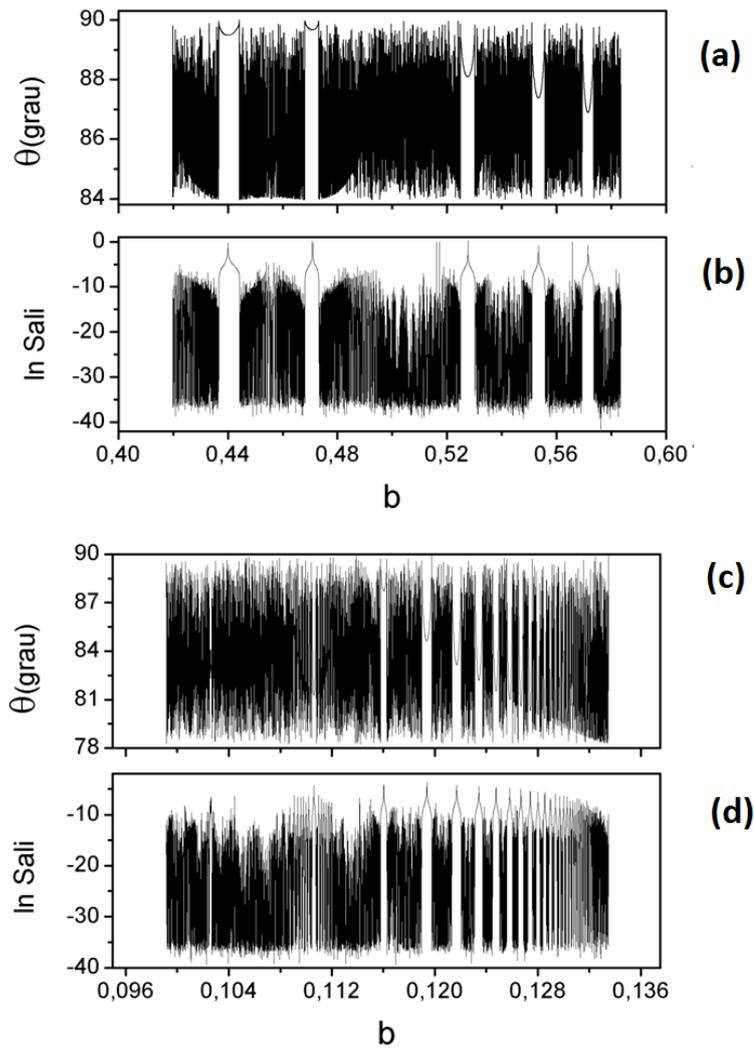


Figura 58: Comparação entre os gráficos do $\ln(SALI)$ versus b e a função deflexão $\theta(b)$. Nas figuras (a) e (b), considera-se a face cristalográfica $Cu(110)$ e energia de incidência para os átomos fixada em 63 meV. Enquanto nas figuras (c) e (d), considera-se a face cristalográfica $Cu(113)$ e energia de incidência para os átomos fixada em 63 meV.

para as trajetórias caóticas converge exponencialmente a zero, enquanto que para trajetórias regulares é exibida uma oscilação em torno de valores positivos. Esse comportamento é justamente observado nos gráficos apresentados nas figuras 56–59, em que são exibidas as comparações entre os gráficos do $\ln(SALI)$ versus b e a função deflexão $\theta(b)$, obtidos para os átomos que incidem com energia de incidência de 21 meV sobre as faces cristalográficas $Cu(110)$, $Cu(113)$, $Cu(115)$ e $Cu(117)$, e para os átomos que incidem com uma energia de incidência de 63 meV sobre as faces cristalográficas $Cu(110)$, $Cu(113)$ e $Cu(115)$.

Um aspecto detectado pelo $SALI$ é a presença de cúspides nos gráficos do $\ln(SALI)$ versus b , como pode ser observado na região demarcada pelas circunferências indicadas

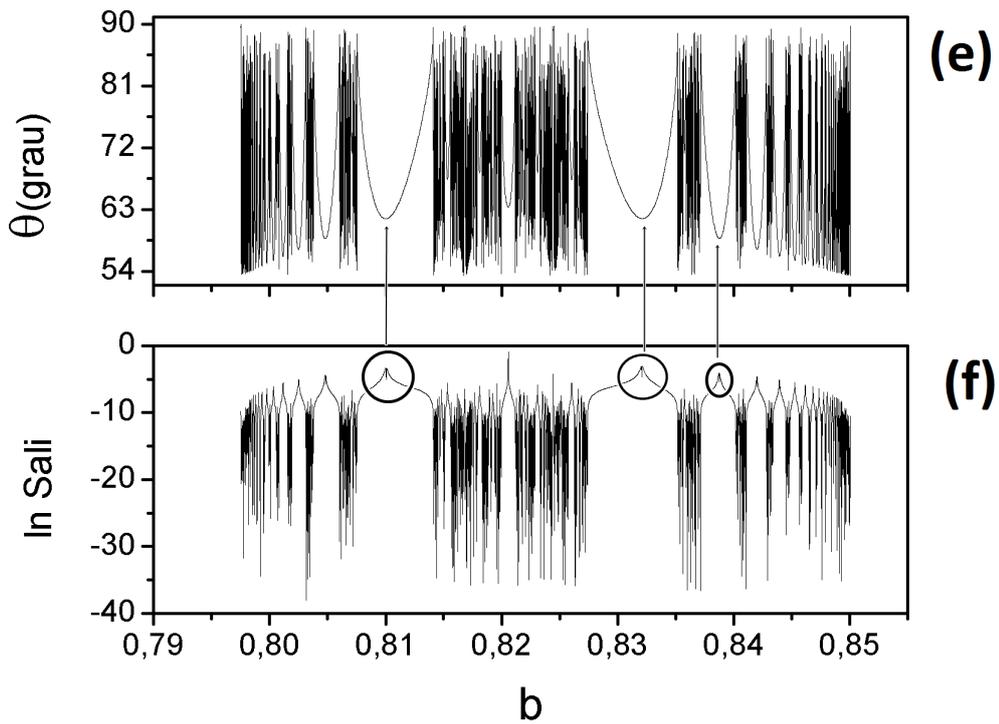


Figura 59: Comparação entre os gráficos do $\ln(SALI)$ versus b e da função deflexão $\theta(b)$. Nas figuras (e) e (f), considera-se a face cristalográfica $Cu(115)$ e energia de incidência para os átomos fixada em 63 meV. Além disso, as regiões demarcadas pelas setas indicam a detecção do ponto arco-íris através do $SALI$.

pelas setas nas figuras 59.(e) e (f). Essas cúspides correspondem aos pontos de mínimo da função deflexão e, neste caso, é sugerido que o seu surgimento está associado ao ponto arco-íris para espalhamento (ver subseção 3.3.3 do capítulo 3). Porém, vale ressaltar que o valor calculado para o $\ln(SALI)$ no tempo máximo de integração não é um indicador confiável, uma vez que o caos presente neste sistema é transiente.

A não confiabilidade do valor calculado para o $\ln(SALI)$ no tempo máximo de integração pode ser evidenciada através da análise da distribuição da evolução temporal do $\ln(SALI)$ de um conjunto de trajetórias. A obtenção da distribuição dos valores do $\ln(SALI)$ tem como objetivo a visualização de um conjunto de dados inerentes as evoluções temporais das trajetórias sem a necessidade de contabilizar os seus valores individuais e, então, evidenciando características implícitas aos regimes hiperbólico e não hiperbólico das dinâmicas de espalhamento.

Para a construção da distribuição dos valores do $\ln(SALI)$, considerou-se a evolução temporal de um grande conjunto de condições iniciais, (~ 200 órbitas), simulando as colisões elásticas dos átomos de hélio sobre as superfícies espalhadoras $Cu(110)$, $Cu(113)$, $Cu(115)$ e $Cu(117)$, com uma energia de incidência para os átomos fixada em 21 meV. Na figura 60, são apresentadas as curvas correspondentes as distribuições dos valores do $\ln(SALI)$ obtidos em cada passo de tempo da evolução temporal de um conjunto de con-

dições iniciais. Com isso, é possível observar nessa figura que os valores correspondentes ao $\ln(SALI)$ variam aproximadamente no intervalo $(0 \leq \ln(SALI) \leq -40)$.

Um aspecto notado para as curvas de distribuição dos valores do $\ln(SALI)$ obtida para as superfícies espalhadoras de cobre $Cu(11x)$, com índices de Miller $x = 5, 7$, é o seu rápido decaimento. É então sugerido que esse aspecto está relacionado com a taxa de probabilidade das trajetórias, que decai exponencialmente no decorrer do tempo. Pode-se dizer, em outras palavras, que o intervalo de tempo de aprisionamento dos átomos de hélio na superfície espalhadora é demasiadamente curto se comparado, por exemplo, as superfícies espalhadoras de cobre cujo índice de Miller são $x = 0, 3$. Logo, os valores exibidos para a evolução temporal do $\ln(SALI)$ estão aproximadamente compreendidos no intervalo $0 \leq \ln(SALI) \leq -36$ para a superfície espalhadora $Cu(115)$ e aproximadamente compreendidos no intervalo $0 \leq \ln(SALI) \leq -28$ para a superfície espalhadora $Cu(117)$.

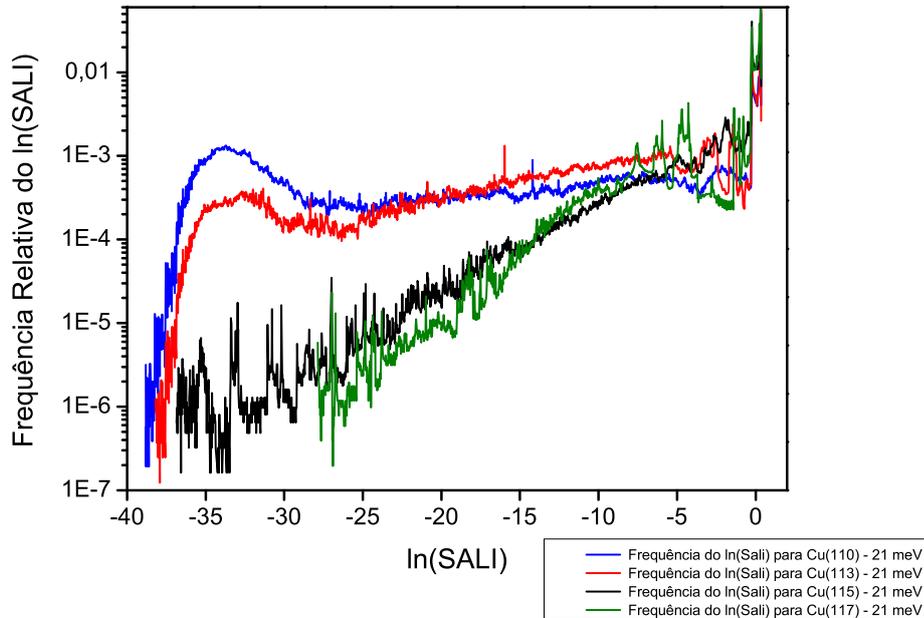


Figura 60: Distribuição dos valores correspondentes ao $\ln(SALI)$, obtidos em cada passo de tempo da evolução temporal de um conjunto de condições iniciais. A curva denotada em azul representa a distribuição dos valores do $\ln(SALI)$ obtidos para as dinâmicas de espalhamento sobre a superfície espalhadora $Cu(110)$. As demais distribuições são denotadas em vermelho para $Cu(113)$, em preto para $Cu(115)$ e em verde para $Cu(117)$.

A curva de distribuição apresentada para as dinâmicas de espalhamento sobre as superfícies $Cu(110)$ e $Cu(113)$ apresentam um comportamento distinto quando comparada ao caso anterior. Em geral, para essas superfícies é associado um decaimento em lei de potencia na taxa de probabilidade das trajetórias permanecerem aprisionadas. Isso pode ser traduzido como o aprisionamento, por longos intervalos de tempo, de uma grande fração de átomos de hélio na superfície espalhadora. Muitas dessas trajetórias exibem

uma aproximação a regiões do espaço de fases caracterizadas por toros, logo associa-se a essa aproximação da trajetória a presença de um efeito denominado “*stickiness*” [83].

A presença desse efeito é notada nas vizinhanças dos toros, onde pode haver a aproximação e o aprisionamento de trajetórias. Dessa forma, o comportamento da trajetória sob efeito do “*stickiness*”, ou seja, nas proximidades dos toros, se assemelha ao comportamento das trajetórias nas vizinhanças de um ponto fixo estável. Neste caso, a sua dinâmica corresponde a uma sequência de rotações no entorno do ponto fixo (ver seção 2.5 do capítulo 2). Pode-se dizer com isso que a trajetória caótica tende a se tornar “menos caótica” enquanto permanece aprisionada no entorno dos toros.

Devido a presença de toros no espaço de fases correspondente as dinâmicas de espalhamento sobre as superfícies espalhadoras $Cu(110)$ e $Cu(113)$, os valores exibidos para a evolução temporal do $\ln(SALI)$ estão aproximadamente compreendidos no intervalo $0 \leq \ln(SALI) \leq -40$. Deve-se notar que, em geral, durante o aprisionamento das trajetórias caóticas na região dos toros é atingido o limite computacional para o cálculo do $SALI$, fazendo-o retornar valores para o $\ln(SALI)$ que oscilam aproximadamente entre $-30 \leq \ln(SALI) \leq -40$. Assim, é possível observar a formação de picos sobre a curva de distribuição dos valores do $\ln(SALI)$, compreendido aproximadamente sobre o intervalo em que é exibida a oscilação. Contudo, a presença desses picos não deve ser entendida como resultado de um efeito físico, mas sim, como a ocorrência da limitação computacional do cálculo da evolução temporal do $\ln(SALI)$ das trajetórias. Portanto, essa oscilação (ou flutuação) deve ser entendida como a ação de um efeito de limitação computacional, não devendo ser confundida com o efeito de aproximação e aprisionamento da trajetória na região dos toros.

A presença dos picos sobre as distribuições das evoluções temporais do $\ln(SALI)$ acaba enfatizando a limitação computacional que ocasiona a imprecisão do valor do $SALI$ calculado sobre o tempo máximo de integração. Dado o problema da imprecisão para o valor do $SALI$ no tempo máximo de integração é necessário redefinir uma nova quantidade que permita indicar a caoticidade ou não caoticidade de uma determinada trajetória. Como será visto neste próximo tópico, o valor máximo absoluto α da inclinação do decaimento exponencial observado durante a evolução temporal do $\ln(SALI)$ é sugerido como um indicador de caos para as trajetórias.

4.3.1 Aplicação do $SALI$ nas Dinâmicas de Espalhamento sobre as Superfícies Espalhadoras $Cu(110)$ e $Cu(113)$

Nesta subseção, são apresentadas as evoluções temporais de um conjunto de condições iniciais referentes a um grupo de trajetórias caóticas. Para isso, considerou-se o espalhamento de átomos de hélio sob as superfícies espalhadoras $Cu(110)$ e $Cu(113)$, com

um ângulo de incidência $\theta = 89.999^\circ$, energia de incidência fixada em 21 meV e parâmetro de impacto, normalizado, escolhido dentre um dos intervalos de refinamentos apresentados na tabela 2. Dessa forma, foram avaliadas as suas respectivas evoluções temporais e a cada passo de tempo são tomadas informações sobre o comportamento das trajetórias. Assim, uma das informações obtidas refere-se a evolução temporal do *SALI*.

Após obter o valor do $\ln(SALI)$, é construído o gráfico $\ln(SALI)$ em relação a t e avaliado o valor absoluto da inclinação α^3 observada durante a sua evolução temporal. Além disso, é obtida a seção de Poincaré e a evolução temporal da coordenada espacial $z(t)$. Contudo, deve-se notar que a função $z(t)$ não corresponde ao espaço de configuração, mas sim ao caminho percorrido pelo átomo de hélio desde a sua posição inicial (ainda na região assintótica, ou seja, quando $V(x, z) \rightarrow 0$) até a sua saída da região de espalhamento.

Na análise das trajetórias caóticas, foram organizados dois grupos, levando-se em consideração o intervalo de tempo de interação entre o átomo de hélio e a superfície de cobre, isto é, o intervalo de tempo de aprisionamento do átomo na região de espalhamento. Neste caso, quando consideradas as dinâmicas de espalhamento sobre a superfície espalhadora $Cu(110)$, foram organizadas, em um primeiro grupo, as trajetórias caóticas associadas ao aprisionamento dos átomos de hélio na superfície espalhadora que ocorrem por intervalos de tempo iguais ou superiores a 1000 *picosegundos* (*ps*). Já em um segundo grupo, foram organizadas as trajetórias caóticas associadas ao aprisionamento dos átomos na superfície espalhadora que ocorrem por intervalos de tempo inferiores a 1000 (*ps*). Um procedimento semelhante também foi realizado quando consideradas as dinâmicas de espalhamento sobre a superfície espalhadora $Cu(113)$, porém, diferentemente da superfície $Cu(110)$, o intervalo de tempo de aprisionamento do átomo de hélio utilizado é de 500 *ps*.

Análise das Trajetórias Caóticas Correspondentes aos Átomos de Hélio Aprisionados por Longos Intervalos de Tempo na Região de Espalhamento da Superfície Espalhadora $Cu(110)$

Um aspecto que pôde ser observado nas trajetórias caóticas, isto é, associadas aos átomos de hélio que permaneçam aprisionados por longos intervalos de tempo na região de espalhamento, é a sua aproximação a região dos toros. Tal situação é associada à presença do efeito “*stickiness*”. O resultado desse efeito sobre a trajetória pode ser observado de duas formas distintas: a primeira se utiliza da aplicação do método da seção de Poincaré, o que garante uma análise qualitativa do problema. Já a segunda forma envolve à análise da evolução temporal do *SALI*. Com a presença do efeito “*stickiness*” durante a evolução temporal de trajetórias caóticas, é verificada a mudança de inclinação sobre o decaimento exponencial apresentado pelo $\ln(SALI)$. Neste caso, a mudança de inclinação para as trajetórias caóticas está relacionada a uma característica do sistema, se referindo neste

³ O leitor não deve confundir com a notação “ α ” que define o número de rotação, definido no capítulo 2.

caso à presença de toros no espaço de fases.

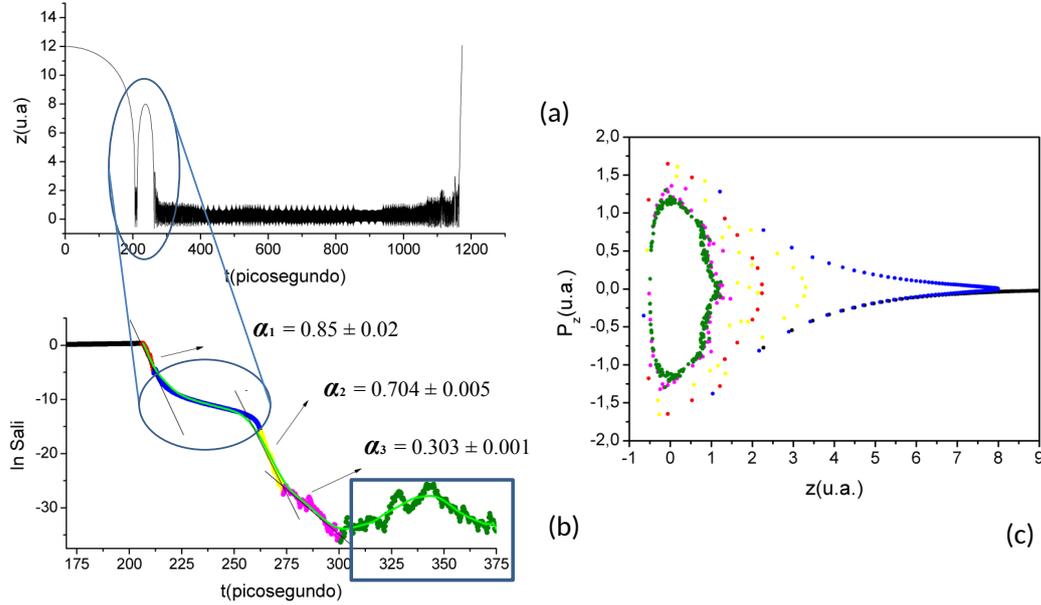


Figura 61: Evolução temporal do $\ln(SALI)$ correspondente à condição inicial com parâmetro de impacto, normalizado, $b = 0.577288882$, obtida ao considerar a incidência de um átomo de hélio com energia de 21 meV sobre a superfície $Cu(110)$. (a) Representação do gráfico referente ao movimento do átomo de hélio com relação ao tempo $z(t)$. (b) Representação do gráfico referente a evolução temporal do $\ln(SALI)$. (c) Representação do gráfico referente a seção de Poincaré do sistema dinâmico. Além disso, a curva traçada em verde representa a suavização tomada como efeito de redução do ruído apresentado pela evolução temporal do $\ln(SALI)$.

Na figura 61, é possível observar a evolução temporal da condição inicial considerando-se o parâmetro de impacto, normalizado, de $b = 0.577288882$. Durante a colisão do átomo de hélio com a superfície de cobre, o tempo total de interação é de 1173 ps, como pode ser visualizado na figura 61.(a). No entanto, apesar de apresentar um longo tempo de interação com a superfície, a análise da evolução temporal do $\ln(SALI)$ restringe-se a um intervalo de tempo aproximado de $206 \text{ ps} < t < 300 \text{ ps}$, limitando-se somente a região que apresenta o decaimento exponencial. Isso ocorre devido ao efeito da limitação computacional implícita ao cálculo da evolução temporal do $SALI$.

Um efeito causado pela limitação computacional do cálculo do $SALI$ é a presença demasiada de ruído na curva correspondente a sua evolução temporal. Logo, a fim de reduzir a presença do ruído nessas curvas foram tomadas as suas suavizações. Dessa forma, as inclinações obtidas durante as evoluções temporais do $\ln(SALI)$, foram obtidas através das suavizações dessas curvas, como indicado, por exemplo, pela curva traçada em verde na figura 61.(b).

Durante a evolução temporal do $\ln(SALI)$ da condição inicial correspondente ao parâmetro de impacto, normalizado, $b = 0.577288882$, é detectada uma inclinação inicial com valor máximo absoluto de $\alpha_1 = 0.85 \pm 0.02$ para o decaimento exponencial. Essa primeira inclinação é detectada sob o intervalo de tempo aproximado de $206 \text{ ps} < t < 212 \text{ ps}$, sendo denotada pelos pontos em laranja no gráfico da evolução temporal do $\ln(SALI)$ (figura 61.(b)) e correspondentemente no gráfico da seção de Poincaré (figura 61.(c)).

Ao analisar a seção de Poincaré, pode-se perceber que a trajetória percorre inicialmente regiões que não se aproximam dos toros, o que lhe confere, em um primeiro momento, a ausência do efeito “*stickiness*”. Com isso, um aspecto importante é o registro de um voo longo realizado pelo átomo de hélio durante uma de suas colisões com a superfície de cobre. Esse voo pode ser observado durante o intervalo de tempo $212 \text{ ps} < t < 262 \text{ ps}$, como pode ser visto na região demarcada pela circunferência na figura 61.(a).

A detecção do voo longo realizado pelo átomo de hélio durante a interação com a superfície também provoca a mudança de inclinação do decaimento exponencial observado durante a evolução temporal do $\ln(SALI)$. Essa mudança de inclinação na evolução temporal do $\ln(SALI)$ é denotada pelos pontos em azul, em destaque na região delimitada pela circunferência na figura 61.(b). Enquanto na figura 61.(c) correspondente a seção de Poincaré, os pontos em azul indicam o comportamento da trajetória quando registrado o voo longo do átomo sobre a superfície de cobre.

Posteriormente, é possível detectar outras duas inclinações para o decaimento exponencial do $\ln(SALI)$: a primeira inclinação apresenta um valor absoluto para a inclinação de $\alpha_2 = 0.704 \pm 0.005$ e ocorre durante o intervalo de tempo aproximado de $262 \text{ ps} < t < 272 \text{ ps}$; e a segunda inclinação ocorre durante o intervalo de tempo aproximado de $272 < t < 300 \text{ ps}$ e apresenta um valor absoluto de $\alpha_3 = 0.333 \pm 0.001$. As duas inclinações, por sua vez, estão associadas à aproximação da trajetória junto a região dos toros, como pode ser observado na figura 61.(c) correspondente a seção de Poincaré. Assim, é possível observar que os pontos demarcados em amarelo, que indicam a reentrada do átomo na região de espalhamento, logo após o primeiro voo longo, estão localizados em uma região afastada dos toros. Em contrapartida, os pontos demarcados pela cor magenta indicam a aproximação da trajetória junto as vizinhanças dos toros.

Nesse caso, é observado que a mudança de inclinação não está somente associada à detecção do efeito “*stickiness*” sobre a trajetória, mas também ocorre devido à presença de voos realizados pelos átomo de hélio durante as suas colisões contra a superfície de cobre. Portanto, a análise da evolução temporal do $\ln(SALI)$ permite detectar não só a caoticidade da trajetória como também quaisquer alterações provocadas por longos voos, o que é feito através de eventuais mudanças na inclinação no decaimento exponencial observado durante a evolução temporal do $\ln(SALI)$.

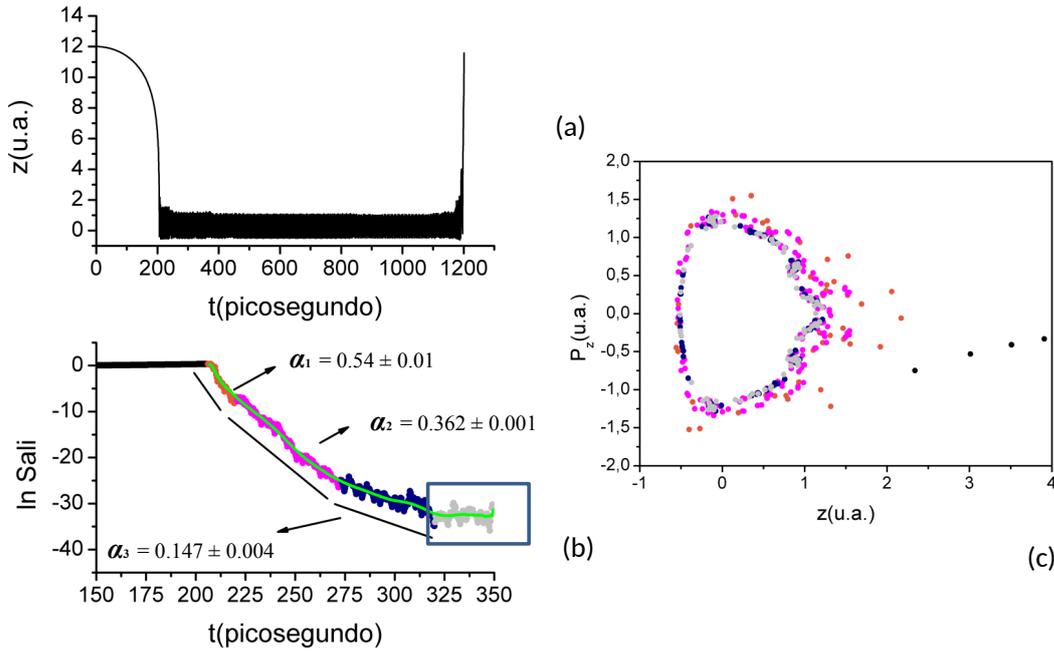


Figura 62: Evolução temporal do $\ln(SALI)$ correspondente à condição inicial com parâmetro de impacto, normalizado, $b = 0.657425876$, obtida ao considerar a incidência de um átomo de hélio com energia de 21 meV sobre a superfície $Cu(110)$. (a) Representação do gráfico referente ao movimento do átomo de hélio com relação ao tempo $z(t)$. (b) Representação do gráfico referente a evolução temporal do $\ln(SALI)$. (c) Representação do gráfico referente a seção de Poincaré do sistema dinâmico. Além disso, a curva traçada em verde representa a suavização tomada como efeito de redução do ruído apresentado pela evolução temporal do $SALI$.

As evoluções temporais das condições iniciais com parâmetros de impacto, normalizados, $b = 0.657425876$ e $b = 0.684987954$, são apresentadas respectivamente nas figuras 62 e 63. O tempo total de interação entre o átomo e a superfície espalhadora nestes dois casos é superior à 1000 ps, como pode ser visto nas figuras 62.(a) e 63.(a).

Durante a evolução temporal do $\ln(SALI)$ correspondente a condição inicial com parâmetro de impacto, normalizado, $b = 0.657425876$, é apresentado um valor máximo absoluto para a inclinação de $\alpha_1 = 0.54 \pm 0.01$. Nota-se que esse valor encontrado para a inclinação é menor quando comparado aos valores exibidos pelas inclinações nos casos anteriores. A explicação para esse fato pode ser observada no comportamento da trajetória através da seção de Poincaré na figura 62.(c). Nesse caso, a trajetória percorre parte do espaço de fases sob influência dos toros e isso lhe garante um baixo valor para a inclinação detectada durante a evolução temporal do $\ln(SALI)$.

Ademais, no decorrer de sua evolução temporal mostrada na figura 62.(c), é possível visualizar a aproximação da trajetória nas regiões dos toros em dois momentos distintos. Inicialmente, a primeira aproximação é retratada através dos pontos em magenta e a se-

gunda aproximação é retratada nos pontos em azul. Sendo assim, a primeira aproximação está associada a uma mudança de inclinação, que agora passa a apresentar um valor de $\alpha_2 = 0.362 \pm 0.001$. Já a segunda mudança de inclinação está associada a uma segunda mudança de inclinação, essa, por sua vez, apresentando um valor de $\alpha_3 = 0.147 \pm 0.004$. Um ponto em comum para as duas mudanças de inclinações é que ambas são verificadas durante a aproximação da trajetória junto a região dos toros, o que pode ser enfatizado ao observar a figura 62.(b).

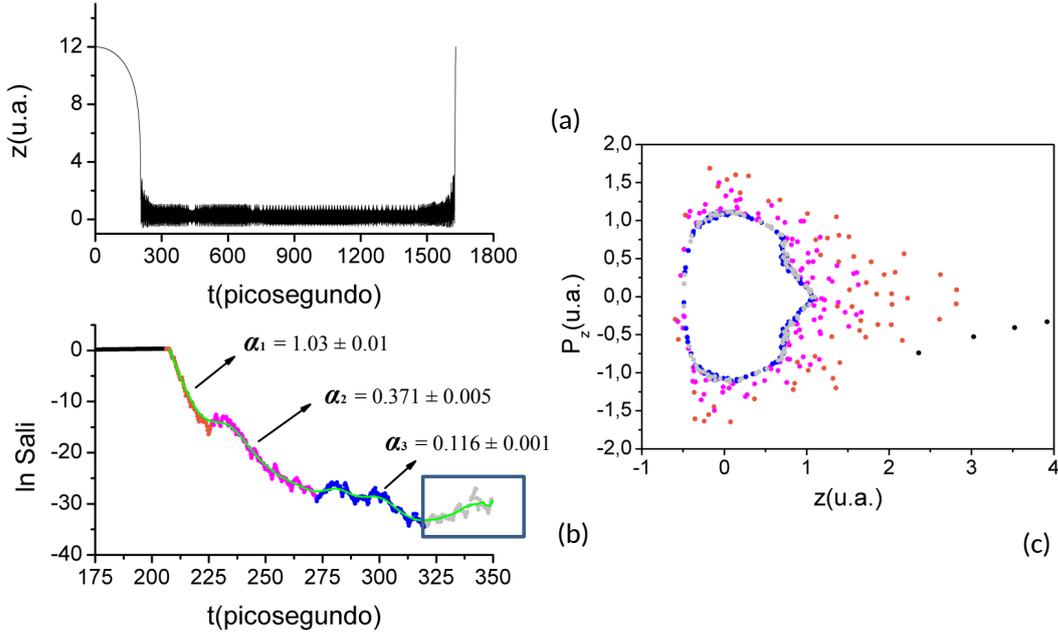


Figura 63: Evolução temporal do $\ln(SALI)$ correspondente à condição inicial com parâmetro de impacto, normalizado, $b = 0.684987954$, obtida ao considerar a incidência de um átomo de hélio com energia de 21 meV sobre a superfície $Cu(110)$. (a) Representação do gráfico referente ao movimento do átomo de hélio com relação ao tempo $z(t)$. (b) Representação do gráfico referente a evolução temporal do $\ln(SALI)$. (c) Representação do gráfico referente a seção de Poincaré do sistema dinâmico. Além disso, a curva traçada em verde representa a suavização tomada como efeito de redução do ruído apresentado pela evolução temporal do $\ln(SALI)$.

Para a evolução temporal da condição inicial correspondente ao parâmetro de impacto, normalizado, $b = 0.684987954$, o valor máximo absoluto para a inclinação do decaimento exponencial observado durante a evolução temporal do $\ln(SALI)$ é de $\alpha_1 = 1.03 \pm 0.01$. Essa inclinação é indicada pelos pontos em laranja na figura 63.(b) correspondente a evolução temporal do $\ln(SALI)$ e respectivamente na figura 63.(c) correspondente a seção de Poincaré.

Ao observar o comportamento da trajetória na seção de Poincaré, pode-se notar que a mesma, no trecho denotado pelos pontos em laranja, percorre parte do espaço de fases disponível em regiões afastadas dos toros, o que garante um valor absoluto considerado

alto⁴ para a inclinação do decaimento α . Além disso, no decorrer da evolução temporal do $\ln(SALI)$ são notadas duas outras aproximações da trajetória juntamente à região dos toros, o que lhe confere duas mudanças de inclinações. A primeira mudança, observada aproximadamente no intervalo de tempo $226 \text{ ps} < t \leq 273 \text{ ps}$, é indicada em destaque nos pontos denotados na cor magenta na figura 63.(b) e (c). Enquanto a segunda mudança de inclinação, observada aproximadamente no intervalo de tempo $273 \text{ ps} < t \leq 320 \text{ ps}$, é indicada em destaque nos pontos denotados na cor azul na 63.(b) e (c). Nessas figuras é possível também observar uma região demarcada pela cor cinza e como comentado anteriormente essa região indica a presença da limitação computacional durante o cálculo do $\ln(SALI)$.

Análise das Trajetórias Caóticas Correspondentes aos Átomos de Hélio Aprisionados por Curtos Intervalos de Tempo na Região de Espalhamento da Superfície Espalhadora $Cu(110)$

Neste subtópico, são apresentadas as evoluções temporais para um conjunto de condições iniciais referentes aos espalhamentos dos átomos de hélio que permanecem aprisionados na região de espalhamento por um intervalo de tempo inferior a 1000 ps . Com isso, foram considerados os parâmetros de impacto, normalizados, $b = 0.516384767$, $b = 0.517495327$ e $b = 0.760859388$. Os átomos de hélio incidentes associados a estas variáveis de entrada apresentam respectivamente um tempo total de interação com a superfície de cobre de aproximadamente $t = 625 \text{ ps}$, $t = 558 \text{ ps}$ e $t = 266 \text{ ps}$, tal como pode ser observado nas figuras 64.(a)–66.(a).

De forma que procedido nas trajetórias cujos átomos de hélio permanecem aprisionados por longos intervalos de tempo na região de espalhamento, foi analisado o comportamento da evolução temporal das condições iniciais caracterizadas pelos valores dos parâmetros de impacto normalizado aqui considerados. Como pode ser visto nas figuras 64.(b)–66.(b), correspondentes às evoluções temporais do $\ln(SALI)$, os valores máximos absolutos obtidos para as inclinações dos decaimentos exponenciais são respectivamente: $\alpha_1 = 0.877 \pm 0.003$, $\alpha_1 = 1.0743 \pm 0.0008$ e $\alpha_1 = 0.685 \pm 0.003$.

Um ponto em comum nas trajetórias caóticas analisadas é que não foi verificada nenhuma aproximação sobre a região dos toros, e isso possivelmente se deve ao fato de que o átomo de hélio permanece aprisionado na região de espalhamento por um curto intervalo de tempo, quando comparado aos casos anteriores. Consequentemente, durante a evolução temporal do $\ln(SALI)$ não foram verificadas quaisquer mudanças de inclinações, sejam elas provocadas pelos voos longos realizados pelos átomos de hélio durante as suas colisões com a superfície ou devido a presença de toros no espaço de fases deste sistemas dinâmicos. Esse fato pode ser enfatizado, por exemplo, através da análise dos gráficos das seções de Poincaré, apresentados nas figuras 64.(c) e 65.(c), respectivamente para

⁴ Quando comparado as trajetórias que se iniciam nas vizinhanças dos toros.

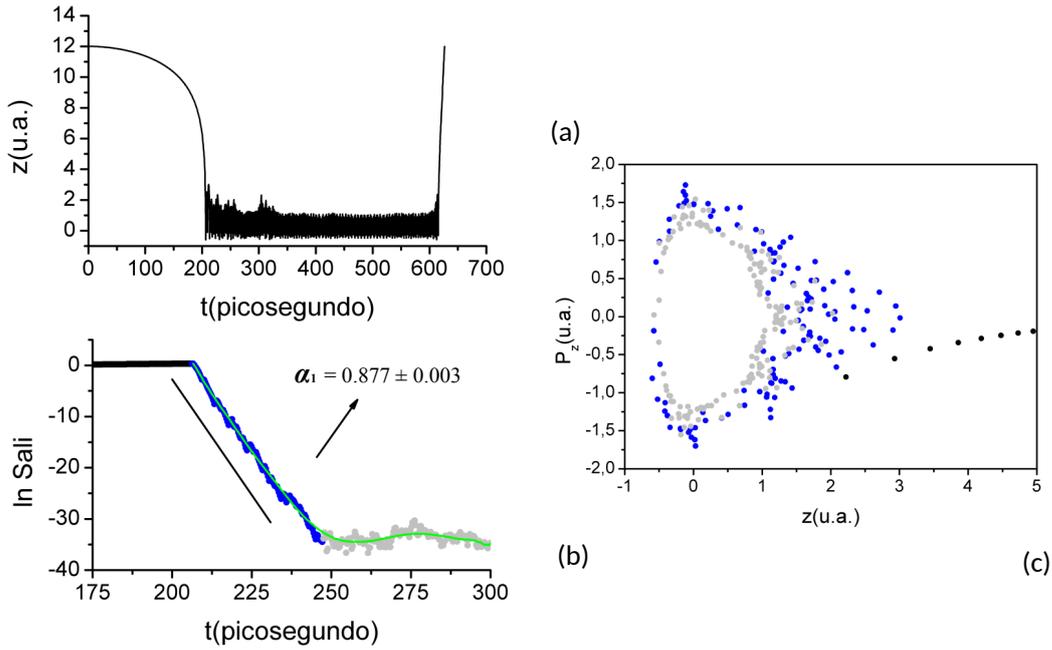


Figura 64: Evolução temporal do $\ln(SALI)$ correspondente à condição inicial com parâmetro de impacto, normalizado, $b = 0.516384767$, obtida ao considerar a incidência de um átomo de hélio com energia de 21 meV sobre a superfície $Cu(110)$. (a) Representação do gráfico referente ao movimento do átomo de hélio com relação ao tempo $z(t)$. (b) Representação do gráfico referente a evolução temporal do $\ln(SALI)$. (c) Representação do gráfico referente a seção de Poincaré do sistema dinâmico. Além disso, a curva traçada em verde representa a suavização tomada como efeito de redução do ruído apresentado pela evolução temporal do $\ln(SALI)$.

a evolução temporal das condições iniciais com parâmetros de impacto, normalizados, $b = 0.516384767$ e $b = 0.517495327$.

A análise do comportamento da evolução temporal do $\ln(SALI)$ correspondente à condição inicial associada ao parâmetro de impacto, normalizado, $b = 0.517495327$, pôde ser feita a partir da seguinte divisão: uma primeira região, destacada pelos pontos marcados na cor preta, indica a entrada do átomo de hélio incidente na região de espalhamento, fato este que ocorre durante o intervalo de tempo $0 \text{ ps} < t < 206 \text{ ps}$; uma segunda região, destacada pelos pontos marcados na cor azul, indica a restrição da dinâmica de interação do átomo nas proximidades da superfície espalhadora e o decaimento exponencial para a evolução temporal do $\ln(SALI)$, fato este que ocorre durante o intervalo de tempo $206 \text{ ps} < t < 240 \text{ ps}$; e uma última região, destacada pelos pontos marcados em cinza, indica a presença da limitação computacional durante o cálculo da evolução temporal do $\ln(SALI)$, o que ocorre em um intervalo de tempo superior à $t > 240 \text{ ps}$.

Uma divisão semelhante fora realizada nas demais trajetórias analisadas, em que

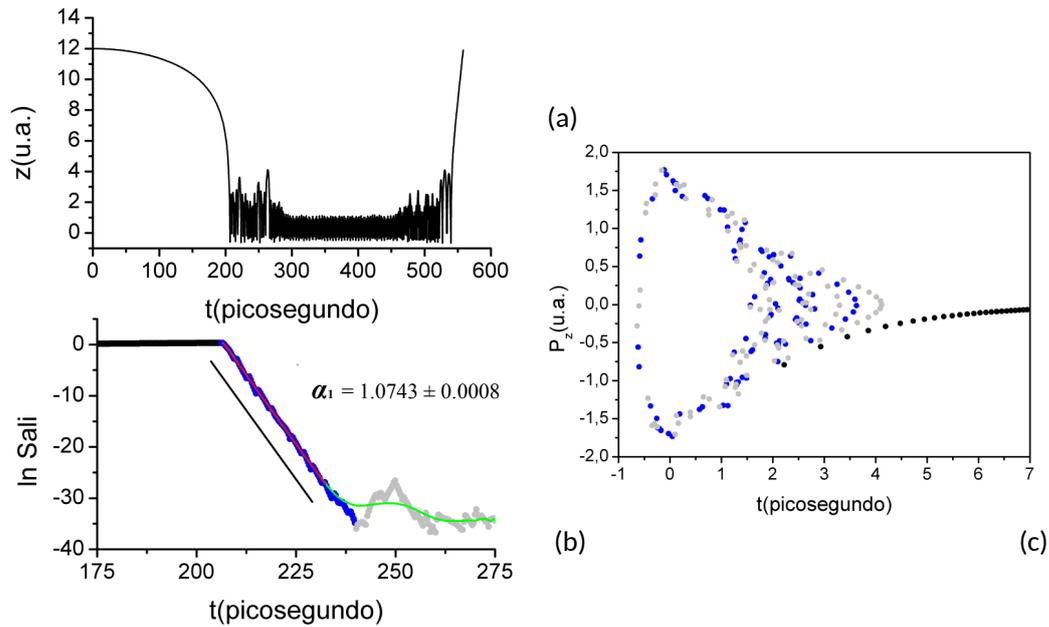


Figura 65: Evolução temporal do $\ln(SALI)$ correspondente à condição inicial com parâmetro de impacto $b = 0.517495327$, obtida ao considerar a incidência de um átomo de hélio com energia de 21 meV sobre a superfície $Cu(110)$. (a) Representação do gráfico referente ao movimento do átomo de hélio com relação ao tempo $z(t)$. (b) Representação do gráfico referente a evolução temporal do $\ln(SALI)$. (c) Representação do gráfico referente a seção de Poincaré do sistema dinâmico. Além disso, a curva traçada em verde representa a suavização tomada como efeito de redução do ruído apresentado pela evolução temporal do $\ln(SALI)$.

se pôde verificar características semelhantes tanto nos gráficos da seção de Poincaré (ver figuras 63 e 66.(c)) quanto nas evoluções temporais do $\ln(SALI)$ (ver figuras 64.(b) e 66.(b)).

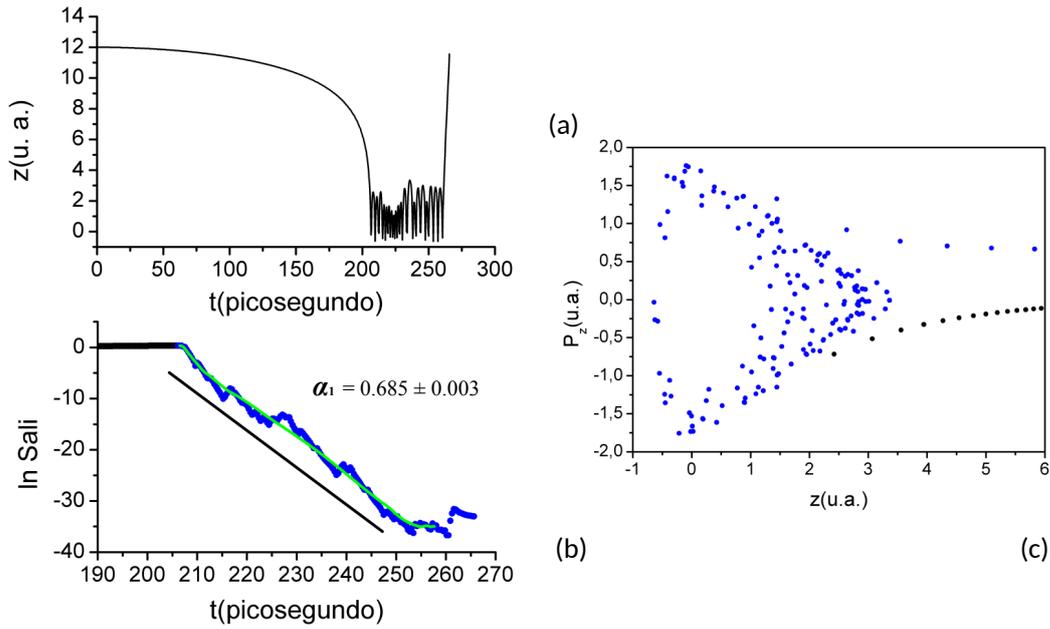


Figura 66: Evolução temporal do $\ln(SALI)$ correspondente à condição inicial com parâmetro de impacto, normalizado, $b = 0.760859388$, obtida ao considerar a incidência de um átomo de hélio com energia de 21 meV sobre a superfície $Cu(110)$. (a) Gráfico referente ao movimento do átomo de hélio com relação ao tempo $z(t)$. (b) Gráfico referente à evolução temporal do $\ln(SALI)$. (c) Gráfico referente à seção de Poincaré do sistema dinâmico. Além disso, a curva traçada em verde representa a suavização tomada como efeito de redução do ruído apresentado pela evolução temporal do $\ln(SALI)$.

Análise das Trajetórias Caóticas Correspondentes aos Átomos de Hélio Aprisionados por Longos Intervalos de Tempo na Região de Espalhamento da Superfície Espalhadora $Cu(113)$

Neste subtópico, foram avaliadas as evoluções temporais de um conjunto de condições iniciais correspondentes aos parâmetros de impacto, normalizados, $b = 0.301272352$, $b = 0.36505639$ e $b = 0.396430474$. Assim como as trajetórias analisadas quando considerada a superfície $Cu(110)$, um aspecto que também pôde ser observado durante a evolução temporal dessas condições iniciais é a presença do efeito “stickiness” modificando o valor absoluto da inclinação α do decaimento exponencial observado durante a evolução temporal do $\ln(SALI)$.

A presença do efeito “stickiness” é claramente observada quando acompanhada a evolução temporal da condição inicial com parâmetro de impacto, normalizado, $b = 0.36505639$, através do gráfico da seção de Poincaré e da evolução temporal do $\ln(SALI)$. À primeira vista, em destaque nos pontos denotados em vermelho na figura 67.(b) correspondente a evolução temporal do $\ln(SALI)$, é observado um valor máximo absoluto para a inclinação do decaimento exponencial de $\alpha_1 = 1.15 \pm 0.01$. Posteriormente, devido

a aproximação da trajetória na região dos toros é observada a mudança de inclinação do decaimento, que passa a apresentar um valor absoluto de $\alpha_2 = 0.359 \pm 0.002$. Essa descrição pode ser visualizada a partir dos pontos denotados em azul na figura 67.(c) que corresponde a seção de Poincaré e na figura 67.(b) que corresponde a evolução temporal do $\ln(SALI)$.

Ainda durante a evolução temporal do $\ln(SALI)$, para tempos superiores à 270 ps, é observado um trecho destacado por uma região retangular indicando a presença da limitação computacional durante o cálculo do $SALI$. Como nos casos anteriores, a presença dessa limitação ocasiona também a presença demasiada de ruído. Com isso, foram tomadas as suavizações das evoluções temporais do $\ln(SALI)$, o que pode ser visualizado a partir das curvas traçadas em amarelo nas figuras 67.(b) – 69.(b).

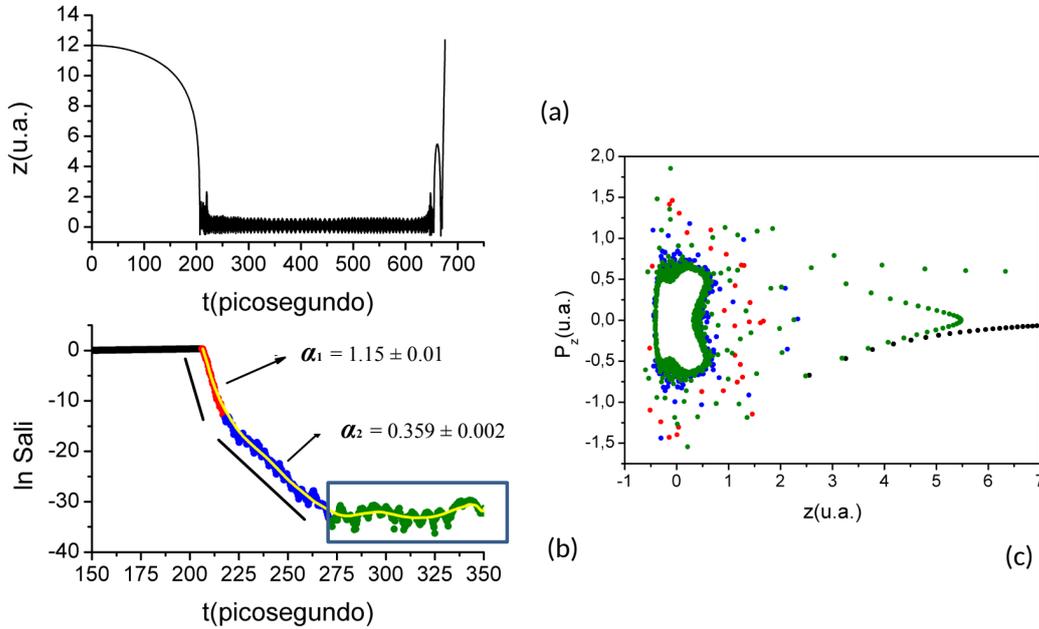


Figura 67: Evolução temporal do $SALI$ correspondente à condição inicial com parâmetro de impacto, normalizado, $b = 0.36505639$, obtida ao considerar a incidência de um átomo de hélio com energia de 21 meV sobre a superfície $Cu(113)$. (a) Gráfico referente ao movimento do átomo de hélio com relação ao tempo $z(t)$. (b) Gráfico referente a evolução temporal do $SALI$. (c) Gráfico referente a seção de Poincaré do sistema dinâmico. Além disso, a curva traçada em amarelo representa a suavização tomada como efeito de redução do ruído apresentado pela evolução temporal do $SALI$.

Da mesma forma, as demais evoluções temporais das condições iniciais com parâmetros de impacto, normalizados, $b = 0.36505639$ e $b = 0.396430474$, apresentam um comportamento semelhante quando comparado ao comportamento das trajetórias analisadas anteriormente. As evoluções temporais dessas duas condições iniciais apresentam uma aproximação a região dos toros no espaço de fases e como consequência é observada a ação

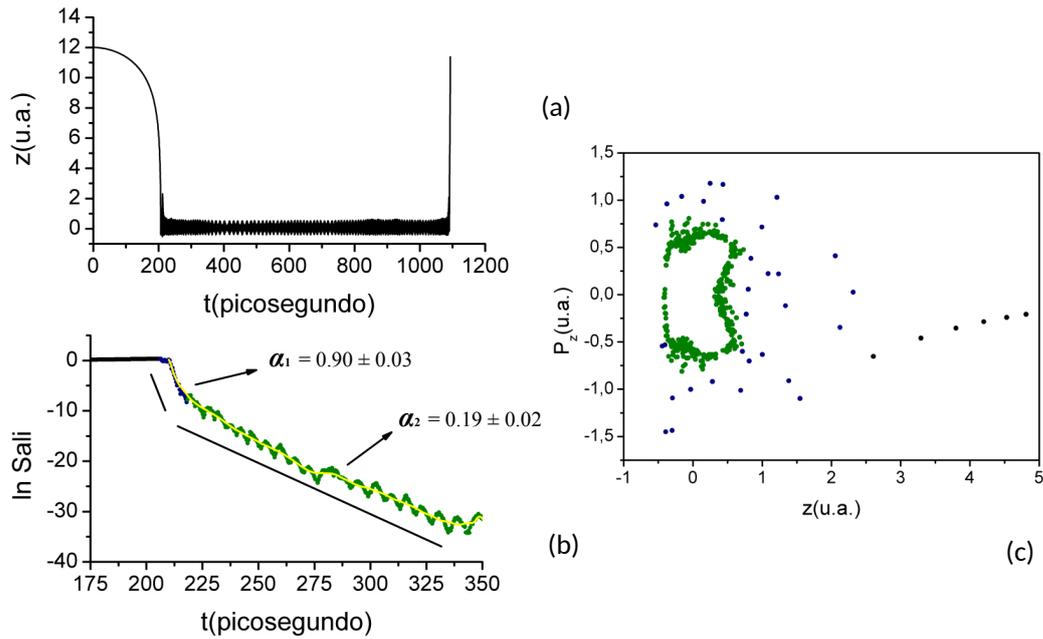


Figura 68: Evolução temporal do $SALI$ correspondente à condição inicial com parâmetro de impacto, normalizado, $b = 0.301272352$, obtida ao considerar a incidência de um átomo de hélio com energia de 21 meV sobre a superfície $Cu(113)$. (a) Gráfico referente ao movimento do átomo de hélio com relação ao tempo $z(t)$. (b) Gráfico referente a evolução temporal do $SALI$. (c) Gráfico referente a seção de Poincaré do sistema dinâmico. Além disso, a curva traçada em amarelo representa a suavização tomada como efeito de redução do ruído apresentado pela evolução temporal do $SALI$.

do efeito “stickiness”. Tal situação é retratada através da seção de Poincaré visualizada nas figuras 68.(c) – 69.(c).

Os valores máximos absolutos α das inclinações dos decaimentos exponenciais observados durante as evoluções temporais do $\ln(SALI)$ das condições iniciais com parâmetros de impacto, normalizados, $b = 0.301272352$ e $b = 0.396430474$, são respectivamente: $\alpha_1 = 0.90 \pm 0.03$ e $\alpha_1 = 0.588 \pm 0.007$. Em especial, quando considerada a evolução temporal da condição inicial com parâmetro de impacto, normalizado, $b = 0.396430474$, a aproximação da trajetória junto a região dos toros é destacada a partir dos pontos denotados em vermelho na figura 69.(c) correspondente a seção de Poincaré.

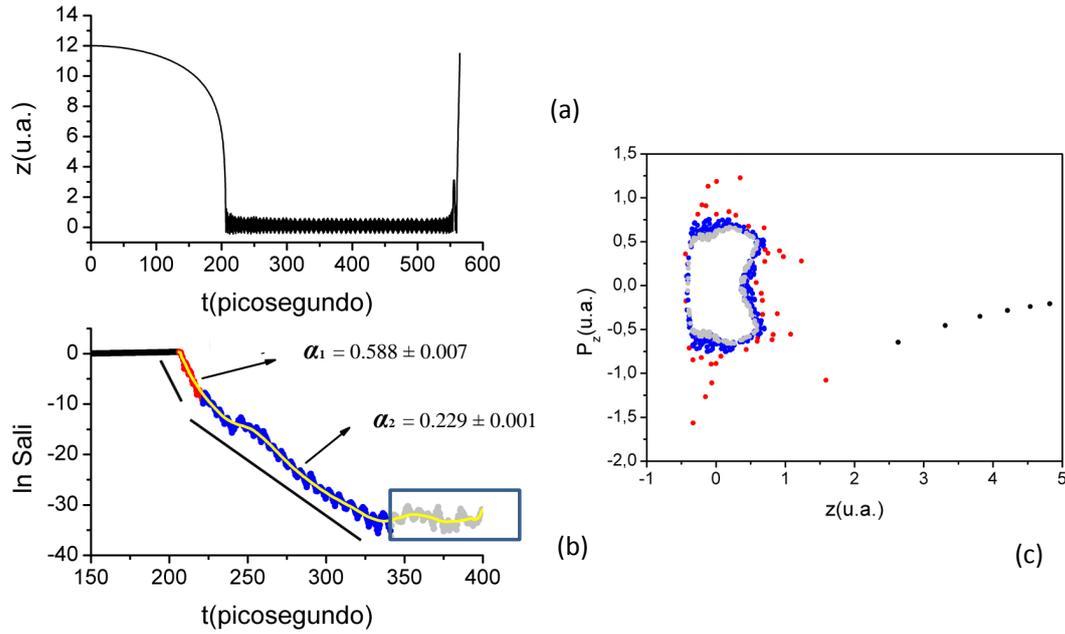


Figura 69: Evolução temporal do $SALI$ correspondente à condição inicial com parâmetro de impacto, normalizado, $b = 0.396430474$, obtida ao considerar a incidência de um átomo de hélio com energia de 21 meV sobre a superfície $Cu(113)$. (a) Gráfico referente ao movimento do átomo de hélio com relação ao tempo $z(t)$. (b) Gráfico referente a evolução temporal do $SALI$. (c) Gráfico referente a seção de Poincaré do sistema dinâmico. Além disso, a curva traçada em amarelo representa a suavização tomada como efeito de redução do ruído apresentado pela evolução temporal do $SALI$.

Análise das Trajetórias Caóticas Correspondentes aos Átomos de Hélio Aprisionados por Curtos Intervalos de Tempo na Região de Espalhamento da Superfície Espalhadora $Cu(113)$

Neste subtópico, são apresentados as evoluções temporais das condições iniciais associadas aos átomos de hélio incidentes que permanecem aprisionados por curtos intervalos na superfície espalhadora. O comportamento das trajetórias caóticas resultantes dessas evoluções apresentam, em diversos pontos, similaridades com as demais trajetórias caóticas apresentadas para o caso da superfície espalhadora $Cu(113)$. Nesse caso, foi avaliada a evolução temporal de um conjunto de condições iniciais, considerando-se os parâmetros de impacto, normalizados, $b = 0.31092155$, $b = 0.41876553$ e $b = 0.371143899$. Assim, como pode ser visto nas figuras 70.(a) – 72.(a), o tempo de aprisionamento dos átomos de hélio na superfície espalhadora não excede o tempo máximo de 500 ps.

Ao acompanhar as evoluções temporais das condições iniciais, com parâmetros de impacto, normalizados, $b = 0.31092155$, $b = 0.41876553$, $b = 0.371143899$, não foi possível observar a existências de voos longos, isto é, voos longos realizados pelos átomos de hélio durante as suas colisões com a superfície de cobre que excedam a altura de 5 *Angstroms*. Dessa forma, quando avaliadas as evoluções temporais do $\ln(SALI)$ não

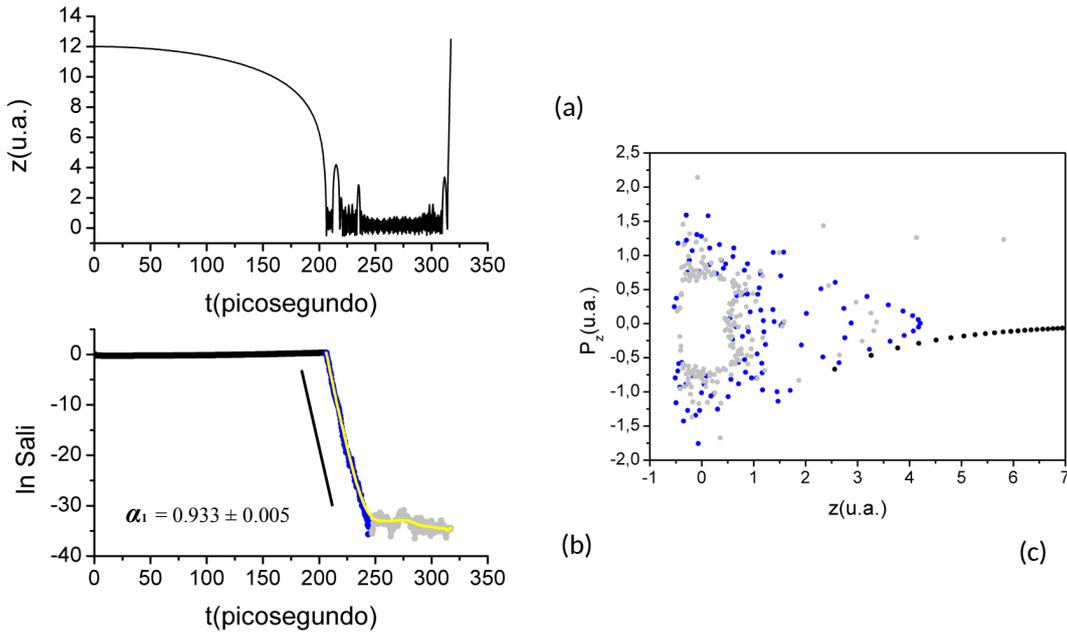


Figura 70: Evolução temporal do $\ln(SALI)$ correspondente à condição inicial com parâmetro de impacto, normalizado, $b = 0.31092155$, obtida ao considerar a incidência de um átomo de hélio com energia de 21 meV sobre a superfície $Cu(113)$. (a) Gráfico referente ao movimento do átomo de hélio com relação ao tempo $z(t)$. (b) Gráfico referente a evolução temporal do $\ln(SALI)$. (c) Gráfico referente a seção de Poincaré do sistema dinâmico. Além disso, a curva traçada em amarelo representa a suavização tomada como efeito de redução do ruído apresentado pela evolução temporal do $\ln(SALI)$.

foram exibidas quaisquer mudanças de inclinações sobre o seu decaimento exponencial. Em particular, foram obtidos para essas trajetórias os seguintes valores máximos absolutos para as inclinações do decaimento exponencial verificados durante a evolução temporal do $\ln(SALI)$, $\alpha_1 = 0.933 \pm 0.005$, $\alpha_1 = 0.87 \pm 0.01$ e $\alpha_1 = 0.8666 \pm 0.001$, o que pode ser visualizado respectivamente nas figuras 70.(b) – 72.(b).

Ao observar as suas seções de Poincaré, vê-se em destaque as trajetórias correspondentes as evoluções temporais de cada uma das condições iniciais, respectivamente nas figuras 70.(c) – 72.(c). Na figura 72.(c), por exemplo, pode-se observar a seção de Poincaré obtida para a evolução temporal da condição inicial com parâmetro de impacto, normalizado, $b = 0.371143899$. Para esse caso, apesar de apresentar um curto tempo de interação entre o átomo de hélio e a superfície de cobre, com um intervalo de tempo estimado em $t = 300$ ps, o comportamento demonstrado pela sua trajetória é similar ao comportamento de trajetórias caóticas cujos átomos de hélio permanecem aprisionados por longos intervalos de tempo na superfície espalhadora. É possível assim notar que o efeito “stickiness” observado nessa trajetória está associado a uma primeira mudança de inclinação para o decaimento exponencial da evolução temporal do $\ln(SALI)$. Esse fato é destacado a partir dos pontos denotados em vermelho na figura 72.(b) correspondente

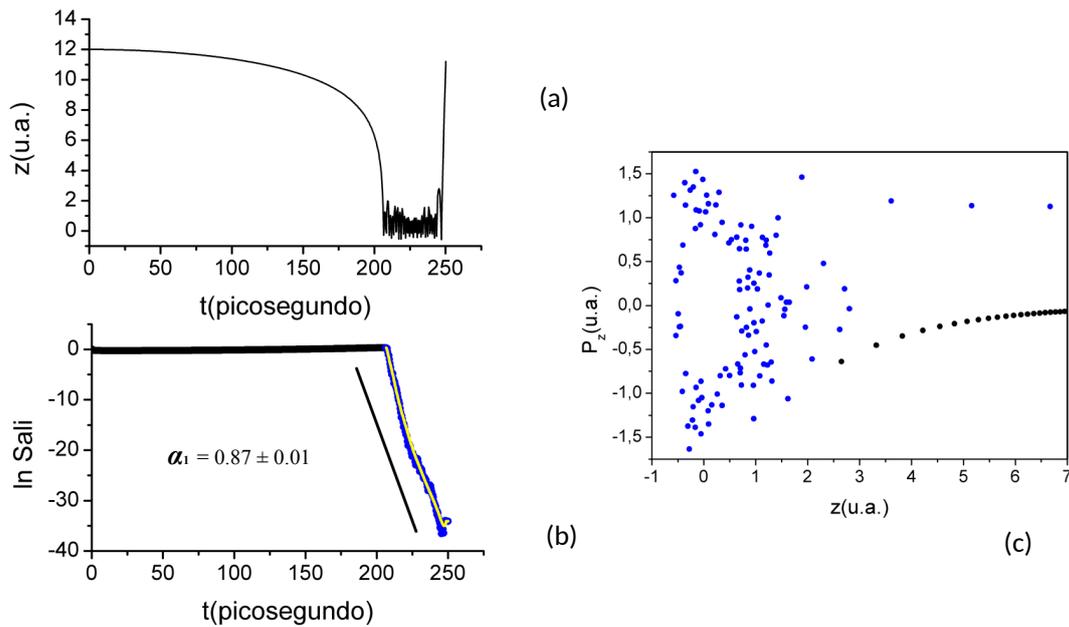


Figura 71: Evolução temporal do $\ln(SALI)$ correspondente à condição inicial com parâmetro de impacto, normalizado, $b = 0.41876553$, obtida ao considerar a incidência de um átomo de hélio com energia de 21 meV sobre a superfície $Cu(113)$. (a) Gráfico referente ao movimento do átomo de hélio com relação ao tempo $z(t)$. (b) Gráfico referente a evolução temporal do $\ln(SALI)$. (c) Gráfico referente a seção de Poincaré do sistema dinâmico. Além disso, a curva traçada em amarelo representa a suavização tomada como efeito de redução do ruído apresentado pela evolução temporal do $\ln(SALI)$.

à evolução temporal do $\ln(SALI)$, o qual indica a inclinação do decaimento exponencial que apresenta um valor máximo absoluto de $\alpha_1 = 0.86 \pm 0.01$. Posteriormente, a partir dos pontos demarcados em azul, aproximadamente no intervalo de tempo $226 \text{ ps} < t < 301 \text{ ps}$, é verificada uma segunda mudança de inclinação, esta, por sua vez apresentando um valor absoluto de $\alpha_2 = 0.311 \pm 0.001$.

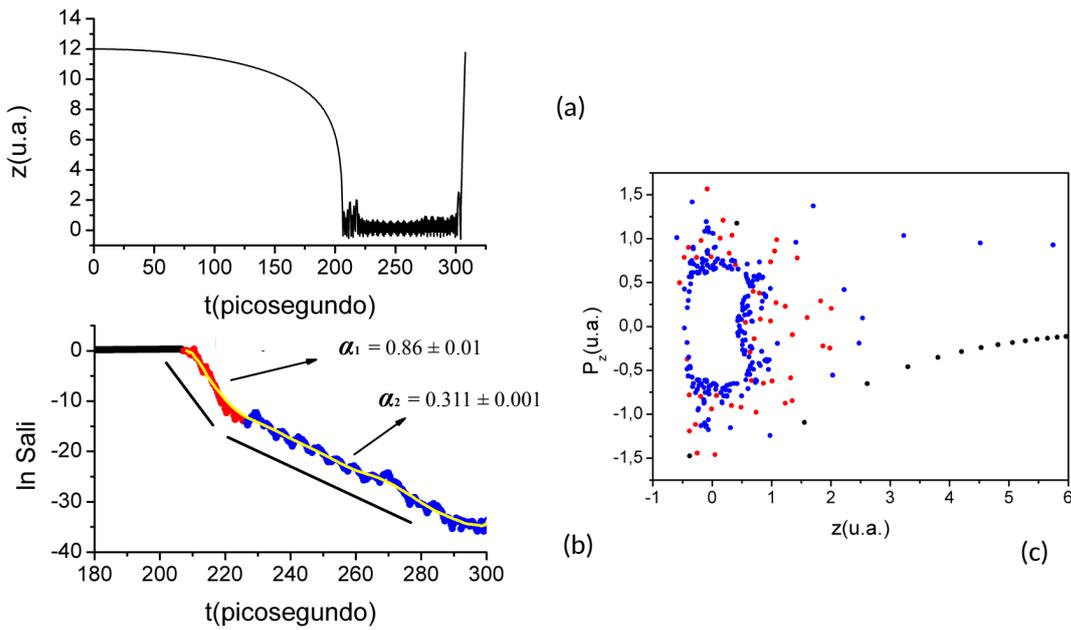


Figura 72: Evolução temporal do $\ln(SALI)$ correspondente à condição inicial com parâmetro de impacto, normalizado, $b = 0.371143899$, obtida ao considerar a incidência de um átomo de hélio com energia de 21 meV sobre a superfície $Cu(113)$. (a) Gráfico referente ao movimento do átomo de hélio com relação ao tempo $z(t)$. (b) Gráfico referente a evolução temporal do $\ln(SALI)$. (c) Gráfico referente a seção de Poincaré do sistema dinâmico. Além disso, a curva traçada em amarelo representa a suavização tomada como efeito de redução do ruído apresentado pela evolução temporal do $\ln(SALI)$.

4.3.2 Análise das Trajetórias Regulares nas Dinâmicas de Espalhamento sobre as Superfícies Espalhadoras $Cu(110)$ e $Cu(113)$

O cálculo do valor do $SALI$ em sistemas dinâmicos, permite não só a distinção de trajetórias caóticas, mas também a distinção de trajetórias regulares. Sabe-se que comportamento das trajetórias regulares no espaço de fases ocorre sobre a região dos toros, i.e., quaisquer trajetórias iniciadas sobre esta região permanece aprisionada por um longo intervalo de tempo. Como visto no capítulo 2, o comportamento das trajetórias que se aproximam das vizinhanças dos toros se assemelha ao comportamento de trajetórias no entorno de um ponto de equilíbrio estável. O comportamento das trajetórias no entorno do ponto de equilíbrio estável, corresponde a uma sequência de rotações ao redor do ponto de equilíbrio. Na figura 73.(a), correspondente a seção de Poincaré obtida para a dinâmica de espalhamento de átomos de hélio com energia de 21 meV sobre a superfície espalhadora $Cu(110)$, pode-se observar em destaque nos pontos demarcados em azul a aproximação da trajetória nas vizinhanças dos toros.

Da mesma forma, quando considerado o espalhamento de átomos de hélio com energia de 21 meV na superfície espalhadora $Cu(113)$, pode-se observar a evolução tempo-

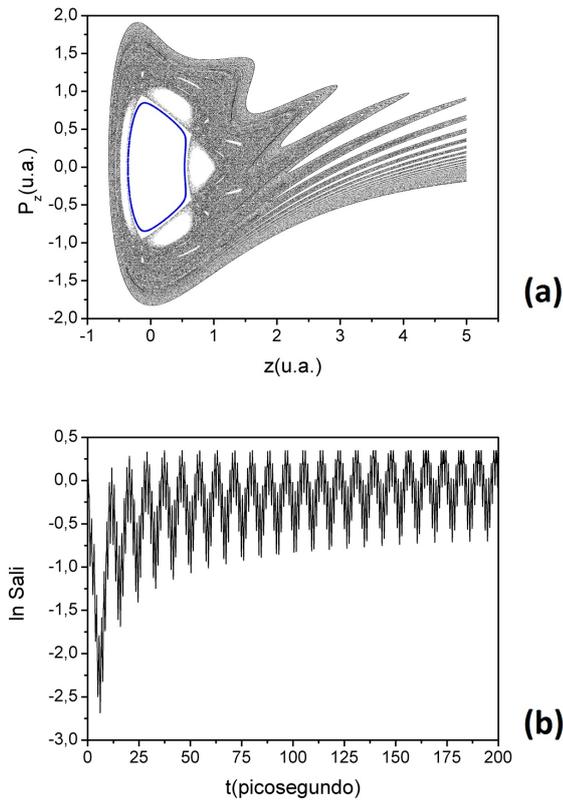


Figura 73: Evolução temporal do $\ln(SALI)$ associado a trajetória regular correspondente a uma condição inicial arbitrária tomada sobre a região dos toros. Para este caso, considerou-se a superfície espalhadora $Cu(110)$ e energia fixada em 21 meV para os átomos incidentes. (a) Seção de Poincaré correspondente as dinâmicas de espalhamento. (b) Evolução temporal do $\ln(SALI)$.

ral de uma condição inicial tomada sobre a região dos toros a partir dos pontos denotados em vermelho na seção de Poincaré da figura 74.(a). Diferentemente das trajetórias caóticas analisadas, o resultado obtido para o $\ln(SALI)$ exibe uma oscilação em torno de valores positivos durante a evolução temporal dessas duas condições iniciais, tal como pode ser visualizado nas figuras 73.(b) e 74.(b). Sendo assim, não foi possível observar a presença do decaimento exponencial durante a evolução do $\ln(SALI)$ para as condições iniciais⁵.

⁵ Para a dinâmica de espalhamento regular, os dados obtidos para as evoluções temporais das condições iniciais e os respectivos $\ln(SALI)$ foram cedidos por T. A. de Assis *et al.* [84].

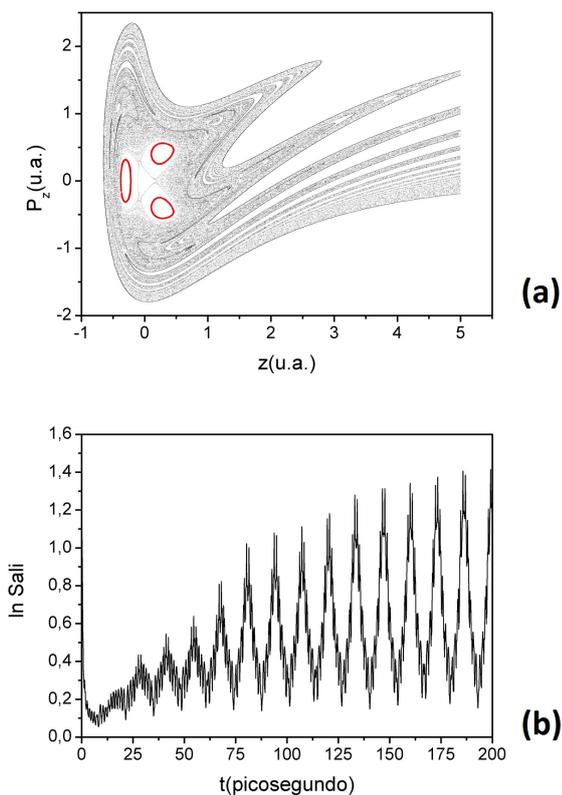


Figura 74: Evolução temporal do $\ln(SALI)$ associado a trajetória regular correspondente a uma condição inicial arbitrária tomada sobre a região dos toros. Para este caso, considerou-se a superfície espalhadora $Cu(113)$ e energia fixada em 21 meV para os átomos incidentes. (a) Seção de Poincaré correspondente as dinâmicas de espalhamento. (b) Evolução temporal do $\ln(SALI)$.

4.3.3 Aplicação do $SALI$ nas Dinâmicas de Espalhamento sobre as Superfícies Espalhadoras $Cu(115)$ e $Cu(117)$

Nesta subseção, de modo semelhante à análise realizada sobre as superfícies espalhadoras com índices de Miller $x = 0, 3$, foram avaliadas as evoluções temporais de um conjunto de condições iniciais associadas ao espalhamento de átomos de hélio sobre as superfícies espalhadoras com índices de Miller $x = 5, 7$. Foram considerados os seguintes conjuntos de variáveis de entrada para o espalhamento dos átomos de hélio sobre as superfícies $Cu(115)$ e $Cu(117)$.

Diferentemente do que ocorre nas superfícies $Cu(110)$ e $Cu(113)$, o espalhamento de átomos de hélio sobre as superfícies espalhadoras $Cu(115)$ e $Cu(117)$ ocorre por curtos intervalos de tempo. Isto se deve principalmente pelo fato de que é observado um decaimento exponencial na taxa de probabilidade dos átomos permanecerem aprisionados na região de espalhamento. Neste caso, o aprisionamento dos átomos na região de espalhamento, em geral, não excede um tempo máximo de 600 ps. Porém, vale ressaltar que o

tempo máximo de aprisionamento sobre a superfície geralmente é alcançado por átomos de hélio que apresentam voos longos durante as suas colisões. Como visto anteriormente, quando avaliadas as dinâmicas de espalhamento sobre as superfícies espalhadoras $Cu(110)$ e $Cu(113)$, a presença desses voos (voos que excedem a altura de 5 *Angstroms*) pode ser identificada através da mudança de inclinação do decaimento exponencial exibido durante a evolução temporal do $\ln(SALI)$. Assim, é esperado que o mesmo venha a ocorrer quando avaliadas as dinâmicas de espalhamento sobre as superfícies $Cu(115)$ e $Cu(117)$.

Análise das Trajetórias Caóticas Correspondentes aos Átomos de Hélio Aprisionados na Região de Espalhamento da Superfície Espalhadora $Cu(115)$

Considerando-se a superfície espalhadora $Cu(115)$, foram observadas as evoluções temporais das condições iniciais correspondentes aos parâmetros de impacto, normalizados, $b = 0.458094109$ e $b = 0.418247866$. Na figura 75, é observada a evolução temporal da condição inicial caracterizada pelo valor do parâmetro de impacto, normalizado, $b = 0.458094109$. A evolução temporal do $\ln(SALI)$ dessa condição inicial apresenta um valor máximo absoluto para a sua inclinação de $\alpha_1 = 1.08 \pm 0.02$, como pode ser visto nos pontos demarcados em laranja na figura 75.(b). Essa inclinação pode ser observada, aproximadamente, durante o intervalo de tempo $205 \text{ ps} < t < 221 \text{ ps}$. Nesse momento, a dinâmica de interação para o átomo de hélio se restringe a regiões próximas da superfície espalhadora, justamente quando iniciado o aprisionamento do átomo sobre a superfície.

Uma análise semelhante pode ser observada na figura 76, em que é acompanhada a evolução temporal da condição inicial associada ao parâmetro de impacto, normalizado, $b = 0.418247866$. Como indicado pelos pontos em vermelho na figura 76.(b), correspondente ao decaimento exponencial da evolução temporal do $\ln(SALI)$, o valor máximo absoluto encontrado para a inclinação desse decaimento apresenta um valor máximo absoluto de $\alpha_1 = 1.385 \pm 0.006$. Posteriormente, como indicado pelos pontos denotados em azul, é destacada a presença de um voo realizado pelo átomo de hélio durante a colisão do átomo com a superfície. Nesse caso, é observada a mudança de inclinação do decaimento exponencial da evolução temporal do $\ln(SALI)$. Contudo, deve-se enfatizar que a detecção de voos através da mudança de inclinação é observada somente em voos que excedam a alturas iguais ou superiores a 5 *Angstroms*. Esse fato é enfatizado ao se observar a figura 76.(b) correspondente a evolução temporal do $\ln(SALI)$ e na figura 76.(c) correspondente a seção de Poincaré.

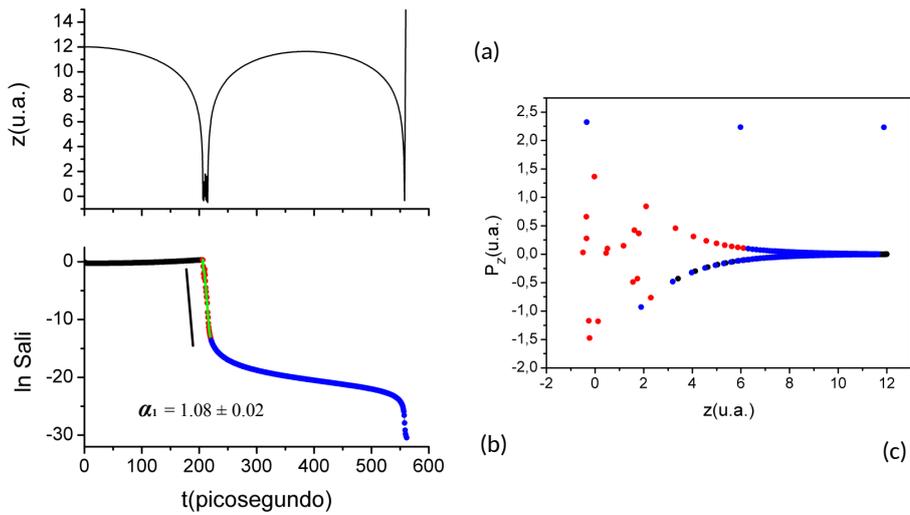


Figura 75: Evolução temporal do $\ln(SALI)$ correspondente à condição inicial com parâmetro de impacto, normalizado, $b = 0.458094109$, obtida ao considerar a incidência de um átomo de hélio com energia de 21 meV sobre a superfície $Cu(115)$. (a) Gráfico referente ao movimento do átomo de hélio com relação ao tempo $z(t)$. (b) Gráfico referente a evolução temporal do $\ln(SALI)$. (c) Gráfico referente a seção de Poincaré do sistema dinâmico. Além disso, a curva traçada em verde representa a suavização tomada como efeito de redução do ruído apresentado pela evolução temporal do $\ln(SALI)$.

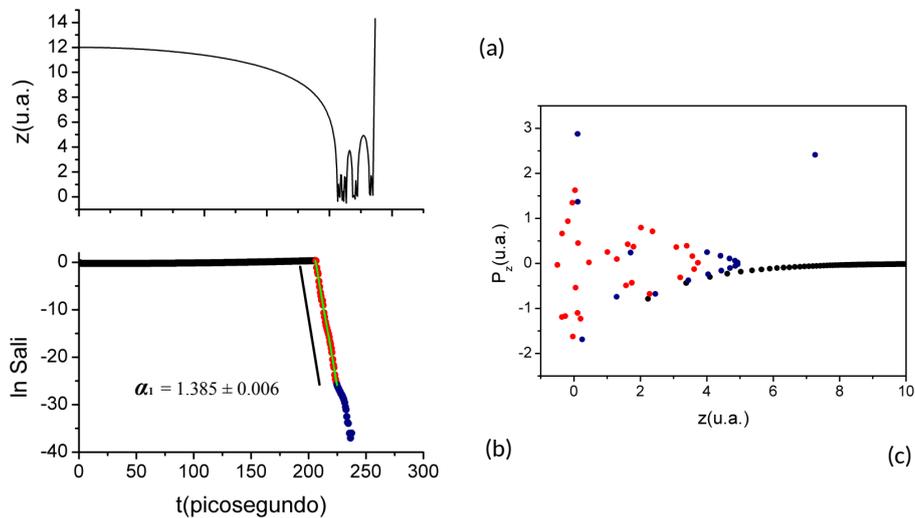


Figura 76: Evolução temporal do $\ln(SALI)$ correspondente à condição inicial com parâmetro de impacto, normalizado, $b = 0.418247866$, obtida ao considerar a incidência de um átomo de hélio com energia de 21 meV sobre a superfície $Cu(115)$. (a) Gráfico referente ao movimento do átomo de hélio com relação ao tempo $z(t)$. (b) Gráfico referente a evolução temporal do $\ln(SALI)$. (c) Gráfico referente a seção de Poincaré do sistema dinâmico. Além disso, a curva traçada em verde representa a suavização tomada como efeito de redução do ruído apresentado pela evolução temporal do $\ln(SALI)$.

Análise das Trajetórias Caóticas Correspondentes aos Átomos de Hélio Aprisionados na Região de Espalhamento da Superfície Espalhadora $Cu(117)$

Considerando-se a superfície espalhadora $Cu(117)$, foram observadas as evoluções temporais das condições iniciais correspondentes aos parâmetros de impacto, normalizados, $b = 0.9695521116$ e $b = 0.960169575$. Nesses dois casos observou-se uma situação similar as evoluções temporais das condições iniciais para a superfície espalhadora $Cu(115)$. Como indicado pelos pontos denotados em azul na figura 77.(b), para a condição inicial correspondente ao parâmetro de impacto, normalizado, $b = 0.9695521116$, o valor máximo absoluto da inclinação do decaimento exponencial verificado durante a evolução temporal do $\ln(SALI)$ que ocorre durante o intervalo de tempo $220 \text{ ps} < t < 230 \text{ ps}$ é de $\alpha_2 = 1.01 \pm 0.03$. Porém, deve-se enfatizar que essa inclinação está associada a uma colisão subsequente do átomo de hélio sobre a superfície de cobre, logo após o seu primeiro voo.

A presença do segundo voo garante um valor numericamente inferior para a inclinação do decaimento exponencial, quando comparado ao valor exibido pela inclinação relacionada ao primeiro voo. Para esse caso, o valor máximo absoluto encontrado para a inclinação do decaimento exponencial é de $\alpha = 0.68 \pm 0.03$. Além disso, na figura 77.(c) referente à seção de Poincaré, pôde-se observar uma menor distribuição de pontos quando comparado as seções de Poincaré obtidas para as superfícies espalhadoras $Cu(110)$ e $Cu(113)$. Isso se deve ao fato de que é observado um decaimento exponencial na taxa de probabilidade das trajetórias permanecerem aprisionadas por longo intervalos de tempo.

Quando considerada a evolução temporal da condição inicial correspondente ao parâmetro de impacto, normalizado, $b = 0.960169575$, foi obtida uma única inclinação para o decaimento exponencial com o valor de $\alpha_1 = 1.36 \pm 0.03$. Essa inclinação é claramente observada nos pontos denotados em azul na figura 78.(b) correspondente a evolução temporal do $\ln(SALI)$ e na figura 78.(c) correspondente a seção de Poincaré. A interação entre o átomo de hélio e a superfície de cobre ocorre durante o intervalo de tempo aproximado de $0 \text{ ps} < t < 229 \text{ ps}$ (ver figura 78.(a)). Apesar de apresentar um curto tempo de interação entre o átomo e a superfície, ainda é possível detectar a inclinação do decaimento exponencial da evolução temporal do $\ln(SALI)$. É demonstrando nesse caso que mesmo para curtos intervalos de tempo de interação entre o átomo de hélio e a superfície de cobre a inclinação para o decaimento exponencial do $\ln(SALI)$ pode ser obtida.

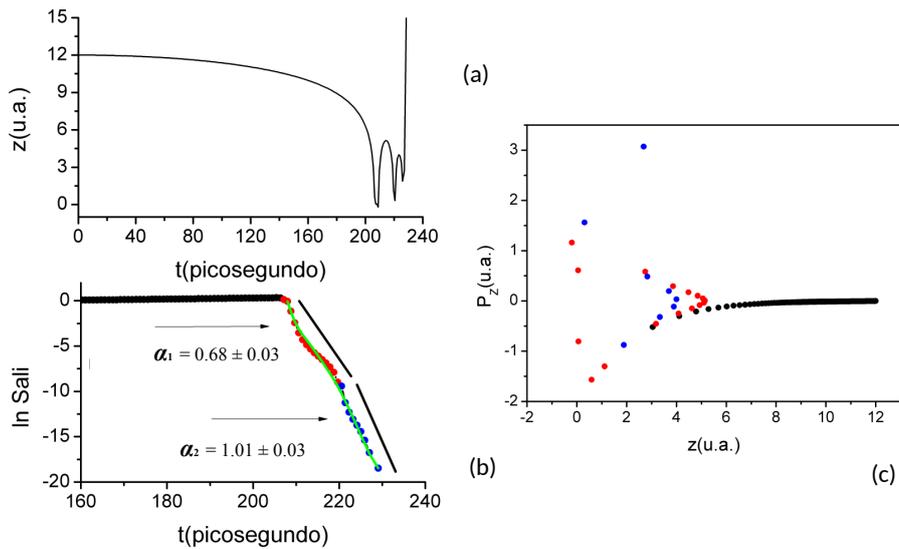


Figura 77: Evolução temporal do $\ln(SALI)$ correspondente à condição inicial com parâmetro de impacto, normalizado, $b = 0.9695521116$, obtida ao considerar a incidência de um átomo de hélio com energia de 21 meV sobre a superfície $Cu(117)$. (a) Gráfico referente ao movimento do átomo de hélio com relação ao tempo $z(t)$. (b) Gráfico referente a evolução temporal do $\ln(SALI)$. (c) Gráfico referente a seção de Poincaré do sistema dinâmico. Além disso, a curva traçada em verde representa a suavização tomada como efeito de redução do ruído apresentado pela evolução temporal do $\ln(SALI)$.

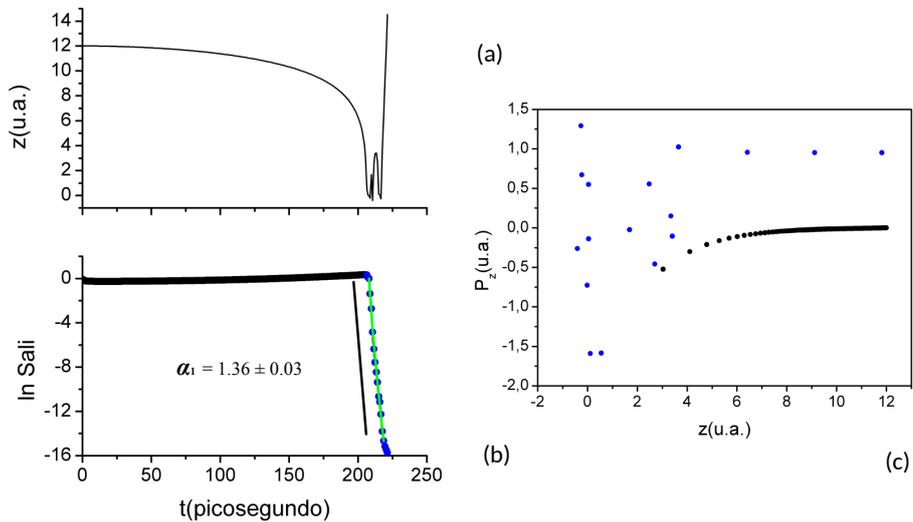


Figura 78: Evolução temporal do $\ln(SALI)$ correspondente à condição inicial com parâmetro de impacto, normalizado, $b = 0.960169575$, obtida ao considerar a incidência de um átomo de hélio com energia de 21 meV sobre a superfície $Cu(117)$. (a) Gráfico referente ao movimento do átomo de hélio com relação ao tempo $z(t)$. (b) Gráfico referente a evolução temporal do $\ln(SALI)$. (c) Gráfico referente a seção de Poincaré do sistema dinâmico. Além disso, a curva traçada em verde representa a suavização tomada como efeito de redução do ruído apresentado pela evolução temporal do $\ln(SALI)$.

5 Conclusões e Perspectivas

Neste trabalho, investigamos as características apresentadas nas funções de espalhamento obtidas para o espalhamento classicamente caótico entre átomos de hélio e uma superfície de cobre enrugada, consistindo de dois tipos de abordagens: uma primeira abordagem qualitativa¹ e outra quantitativa.

Em um primeiro momento, tomando como base o trabalho realizado por Guantes *et al.* [19], foram construídas as seções de Poincaré e as funções de espalhamento (a função deflexão $\theta(b)$ e a função tempo de atraso $T(b)$) correspondentes as dinâmicas de espalhamento sobre as superfícies de espalhamento. Com isso, foram analisadas qualitativamente, o comportamento das trajetórias caóticas no espaço de fases e a presença das singularidades que surge na função de espalhamento. Posteriormente, através de uma análise quantitativa, foi realizado um estudo sistemático da dimensão de incerteza correspondente a região de singularidades que surge na função de espalhamento.

Tendo em vista os resultados obtidos para o estudo sistemático da dimensão de incerteza, observamos a aproximação do valor absoluto da dimensão de incerteza com a unidade, quando avaliadas as dinâmicas de espalhamento sobre as superfícies espalhadoras $Cu(110)$ e $Cu(113)$. No entanto, esse mesmo resultado, não foi observado quando consideradas as dinâmicas de espalhamento sobre as superfícies espalhadoras $Cu(115)$ e $Cu(117)$, que apresentaram valores absolutos para a dimensão de incerteza que se distanciam da unidade.

Uma característica importante é obtida através da relação entre o regime para o espalhamento observado a partir da seção de Poincaré e o valor absoluto da dimensão de incerteza. Assim, quando avaliadas as dinâmicas de espalhamento sobre as superfícies espalhadoras $Cu(110)$ e $Cu(113)$, é sugerido que o valor da dimensão de incerteza esteja associada à presença de um regime não hiperbólico para o espalhamento e neste caso corroborando com trabalhos prévios para outros sistemas dinâmicos [6], [84], [81], [74], [80], [19]. Entretanto, quando consideradas as dinâmicas de espalhamento sobre as superfícies espalhadoras $Cu(115)$ e $Cu(117)$, é sugerida uma associação entre o valor absoluto da dimensão de incerteza e o regime hiperbólico para o espalhamento.

Um ponto importante verificado no cálculo da dimensão de incerteza envolve a escolha de diferentes intervalos para o refinamento, que correspondem as distintas escolhas de intervalos de parâmetros de impacto, normalizados, b . Foram também selecionados, em determinadas regiões do intervalo de refinamento inicialmente escolhido, subintervalos

¹ Para este caso a abordagem qualitativa realizada a partir da aplicação do método da seção de Poincaré consiste de uma visualização das regiões caóticas e regulares que compõe o espaço de fases de sistemas dinâmicos.

que correspondem simplesmente a ampliações dessas regiões. O objetivo da escolha de distintos subintervalos está centrado na obtenção de um intervalo de refinamento adequado para a análise da dimensão de incerteza correspondente a região de singularidades. Com isso, de forma similar ao trabalho realizado por Lau, mostrou-se a relação entre o valor apresentado para a dimensão de incerteza e a escolha para o intervalo de refinamento. Nesse caso, para a análise da dimensão de incerteza no sistema hélio-cobre considerou-se a escolha do quarto intervalo para o refinamento. Quando nos referimos a escolha de um intervalo de refinamento (ou o intervalo de parâmetro de impacto, normalizado) adequado, considera-se a exclusão de grande parte das bacias observadas em determinadas regiões da função deflexão. Essas bacias, como observado no capítulo 4, correspondem as colisões regulares entre os átomos de hélio e a superfície de cobre e, nesse caso, podem interferir no cálculo da dimensão de incerteza.

Em uma última análise para a dimensão de incerteza, consideramos a aplicação da aproximação semiclássica em um sistema hipotético de espalhamento caótico similar ao sistema de espalhamento hélio-cobre. Este sistema hipotético é descrito através das colisões elásticas entre partículas, cujas massas correspondem a 200 e 400 vezes a massa do hélio, e uma superfície enrugada (com os mesmos parâmetros utilizados para a superfície de cobre). Assim, tomando por base o princípio de correspondência de Bohr, quando assumido o limite de grandes massas para o sistema de espalhamento, a dinâmica pode ser aproximada e analisada a partir de tratamentos clássicos [78].

Os resultados obtidos a partir da análise da dimensão de incerteza, sugerem que no limite de grandes massas o valor encontrado para a dimensão tende a se aproximar da unidade quando considerados as distintas faces cristalográficas. Esta aproximação pôde ser verificada quando considerado o regime não hiperbólico para a dinâmica do espalhamento, ou seja, quando avaliadas as dinâmicas de espalhamento sobre as superfícies espalhadoras $Cu(110)$ e $Cu(113)$. O mesmo efeito pode ser observado para o regime hiperbólico, porém a aproximação do valor da dimensão com a unidade é comparativamente menor quando consideradas as dinâmicas de espalhamento associadas ao regime não hiperbólico. Com isso, pode-se dizer que o aumento da massa da partícula ocasiona uma supressão do caos neste sistema e, como consequência, a dinâmica caótica exibida pela interação entre a partícula e a superfície espalhadora tende a se tornar mais regular.

Em vista dos resultados apresentados para a dimensão de incerteza, pode-se concluir que a aplicação do método da dimensão de incerteza no sistema de espalhamento classicamente caótico hélio-cobre se caracteriza como um indicador do grau de hiperbolicidade ou não hiperbolicidade do sistema de espalhamento classicamente caótico, possibilitando discernir características implícitas as dinâmicas de espalhamento.

Para a avaliação das dinâmicas de colisões entre os átomos de hélio sobre a superfície de cobre, a aplicação do $SALI$, a partir da construção do gráfico $\ln(SALI)$ em

função do parâmetro de impacto normalizado, permitiu a observação direta das regiões de singularidades exibidas nas funções espalhamento. Contudo, apesar de identificar as regiões de singularidades, vale enfatizar que o valor calculado para o $SALI$, no tempo máximo de integração, não se apresenta como um indicador confiável de caos, uma vez que o caos presente neste sistema dinâmico é transiente. Logo, com o objetivo de contornar o problema apresentado pelo valor do $SALI$ calculado no tempo máximo de integração, buscamos a avaliação da evolução temporal do $\ln(SALI)$ correspondente a um conjunto de condições iniciais. Sendo assim, a cada passo de tempo dessa evolução, foram obtidas informações sobre o comportamento da dinâmica das respectivas trajetórias. Uma dessas informações refere-se à evolução temporal do $\ln(SALI)$.

Um ponto importante encontrado durante a avaliação da evolução temporal do $\ln(SALI)$ de trajetórias caóticas foi a observação da mudança de inclinação do seu decaimento exponencial. Quando consideradas as distintas superfícies espalhadoras, a mudança de inclinação observada durante a evolução temporal do $\ln(SALI)$ é relacionada com a presença de dois efeitos distintos: i) a presença de voos longos realizados pelos átomos após as suas colisões e ii) a presença do efeito “*stickiness*” sobre as trajetórias no espaço de fases.

Para as superfícies espalhadoras $Cu(110)$ e $Cu(113)$, quando consideradas as trajetórias cujos átomos de hélio permanecem aprisionados por longos intervalos de tempo na região de espalhamento, a mudança da inclinação pôde ser verificada quando associada à presença do efeito “*stickiness*”. Nesse caso, o comportamento exibido para as trajetórias durante o sua aproximação nas vizinhanças dos toros é que elas tendem a se tornar “menos caóticas”, quando comparadas as trajetórias que não se aproximam da região dos toros. Além disso, a mudança de inclinação observada durante a evolução temporal do $\ln(SALI)$ para essas superfícies também está associada à presença de voos longos exibidos durante as colisões dos átomos sobre a superfície de cobre. Para as superfícies espalhadoras $Cu(115)$ e $Cu(117)$, as mudanças de inclinações exibidas pelo decaimento exponencial, durante a evolução temporal do $\ln(SALI)$, são exclusivamente relacionadas a presença do voos longos realizados pelos átomos.

O valor máximo absoluto obtido para a inclinação α do decaimento exponencial da evolução temporal do $\ln(SALI)$ pode ser caracterizado como um indicador de caoticidade ou não caoticidade para as trajetórias, permitindo assim a determinação de características implícitas as dinâmica de espalhamento, como a presença de voos longos ou a presença do efeito “*stickiness*” nas trajetórias. Portanto, pode-se dizer que, o uso da inclinação α como um indicador de caoticidade para as trajetórias corrobora com os resultados obtidos a partir da aplicação do método da dimensão de incerteza, permitindo uma completa caracterização do efeito das singularidades da função de espalhamento em sistemas dinâmicos.

Como perspectiva, propõe-se a inserção de um termo dependente do tempo no potencial do Hamiltoniano do sistema, representando a adição de efeitos de temperatura sobre a superfície espalhadora. Um questionamento natural refere-se à análise das dinâmicas de espalhamento, quando relacionado o efeito de temperatura para as distintas superfícies espalhadoras.

APÊNDICE A – Equação de Movimento para o Par de Vetores Desvio

Neste apêndice, será apresentado o conjunto de equações responsáveis pela evolução temporal do par de vetores desvio tomados para o cálculo do *SALI*. Como observado na seção 3.4 do capítulo 3, o valor para o *SALI* é obtido após acompanhar as evoluções temporais de uma condição inicial de referência $\chi(0)$ e de um par de condições iniciais $\chi_1(0)$ e $\chi_2(0)$ tomados sobre a vizinhança de $\chi(0)$ no espaço de fases. Para o par de condições iniciais $\chi_1(0)$ e $\chi_2(0)$ é tomado um par de vetores desvio $\vec{v}_i^T = (\delta q_{1i}, \delta q_{2i}, \delta p_{1i}, \delta p_{2i})$ ¹ associado a condição inicial de referência. Assim, em cada passo da evolução temporal das condições iniciais e da condição inicial de referência são observadas as direções finais do par de vetores desvio, como pode-se visto na figura 79. Dessa forma, define-se o par de condições iniciais $\chi_1(0)$ e $\chi_2(0)$, e a condição inicial de referência $\chi(0)$, como:

$$\chi_1(0) = \begin{pmatrix} q_1 + \delta q_{11} \\ q_2 + \delta q_{21} \\ p_1 + \delta p_{11} \\ p_2 + \delta p_{21} \end{pmatrix}, \quad \chi_2(0) = \begin{pmatrix} q_1 + \delta q_{12} \\ q_2 + \delta q_{22} \\ p_1 + \delta p_{12} \\ p_2 + \delta p_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{A.1})$$

e

$$\chi(0) = \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ p_1 \\ p_2 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.2})$$

Como visto anteriormente na equação 2.18 (Capítulo 2), as equações de Hamilton de um sistema com n graus de liberdade podem ser reescritas através da notação simplética, apresentando o seguinte formato: $\dot{\chi} = J \cdot \frac{\partial H(\chi)}{\partial \chi}$. Neste caso, as equações de movimento que definem a evolução temporal para a condição inicial de referência e para as condições iniciais tomados sobre a vizinhança de $\chi(0)$ são descritas através da notação simplética, como

$$\dot{\chi} = J \cdot \frac{\partial H(\chi)}{\partial \chi} \quad (\text{A.3})$$

e

$$\dot{\chi}_i = J \cdot \frac{\partial H(\chi + \delta \chi_i)}{\partial \chi}, \quad (\text{A.4})$$

¹ Nesta representação o T equivale a transposta para o vetor e os índices $i = 1, 2$ indicam cada um dos vetores desvio.

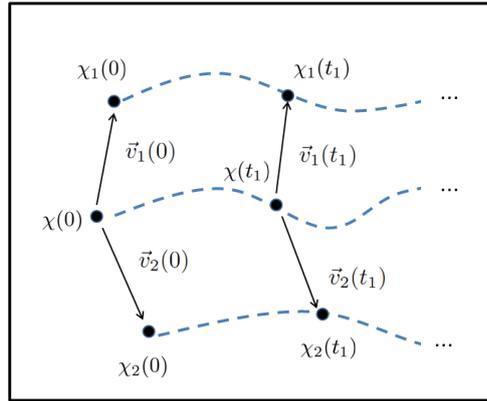


Figura 79: Figura esquemática representando as evoluções temporais dos vetores desvio \vec{v}_1 e \vec{v}_2 , associados à condição inicial de referência no espaço de fases. Além disso, pode-se observar as evoluções temporais das condições iniciais $\chi_1(0)$ e $\chi_2(0)$, tomadas sobre a vizinhança de χ .

em que $\delta\chi_i = \chi_i - \chi$, e $i = 1, 2$.

Para a obtenção das equações de movimento referentes aos vetores desvio, é realizada a expansão em primeira ordem no termo $H(\chi + \delta\chi_i)$ da equação A.4. Com isso, tem-se que

$$H(\chi + \delta\chi_i) \approx H(\chi) + \frac{\partial H(\chi)}{\partial \chi} \delta\chi_i. \quad (\text{A.5})$$

Logo, ao substituir a equação A.5 na equação A.4, chega-se a

$$\begin{aligned} \dot{\chi}_i &= J \cdot \frac{\partial H(\chi)}{\partial \chi} + J \cdot \frac{\partial^2 H(\chi)}{\partial \chi^2} \delta\chi_i \\ \dot{\chi}_i - \dot{\chi} &= J \cdot \frac{\partial^2 H(\chi)}{\partial \chi^2} \delta\chi_i. \end{aligned}$$

A equação de movimento responsável pela evolução temporal do par de vetores desvio pode ser obtida com o uso da relação $(\delta\dot{\chi}_i) = \dot{\chi}_i - \dot{\chi}$, ou seja,

$$(\delta\dot{\chi}_i) = J \cdot \frac{\partial^2 H(\chi)}{\partial \chi^2} \delta\chi_i. \quad (\text{A.6})$$

Dessa forma, utilizando-se das componentes dos vetores \vec{v}_1^t e \vec{v}_2^t , a equação de

movimento A.6 pode ser reescrita em sua forma matricial, de tal modo que

$$\begin{pmatrix} \delta \dot{q}_{1i} \\ \delta \dot{q}_{2i} \\ \delta \dot{p}_{1i} \\ \delta \dot{p}_{2i} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 H}{\partial q_1^2} & \frac{\partial^2 H}{\partial q_1 \partial q_2} & \frac{\partial^2 H}{\partial q_1 \partial p_1} & \frac{\partial^2 H}{\partial q_1 \partial p_2} \\ \frac{\partial q_2 \partial q_1}{\partial^2 H} & \frac{\partial q_1^2}{\partial^2 H} & \frac{\partial q_2 \partial p_1}{\partial^2 H} & \frac{\partial q_2 \partial p_2}{\partial^2 H} \\ \frac{\partial p_1 \partial q_1}{\partial^2 H} & \frac{\partial p_1 \partial q_2}{\partial^2 H} & \frac{\partial p_1^2}{\partial^2 H} & \frac{\partial p_1 \partial p_2}{\partial^2 H} \\ \frac{\partial p_2 \partial q_1}{\partial^2 H} & \frac{\partial p_2 \partial q_2}{\partial^2 H} & \frac{\partial p_2 \partial p_1}{\partial^2 H} & \frac{\partial p_2^2}{\partial^2 H} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \delta q_{1i} \\ \delta q_{2i} \\ \delta p_{1i} \\ \delta p_{2i} \end{pmatrix} \quad (\text{A.7})$$

Assim, a equação A.7 em sua forma matricial pode ser reescrita como

$$\begin{pmatrix} \delta \dot{q}_{1i} \\ \delta \dot{q}_{2i} \\ \delta \dot{p}_{1i} \\ \delta \dot{p}_{2i} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 H}{\partial p_1 \partial q_1} & \frac{\partial^2 H}{\partial p_1 \partial q_2} & \frac{\partial^2 H}{\partial p_1^2} & \frac{\partial^2 H}{\partial p_1 \partial p_2} \\ \frac{\partial p_2 \partial p_1}{\partial^2 H} & \frac{\partial p_2 \partial q_2}{\partial^2 H} & \frac{\partial p_2 \partial p_1}{\partial^2 H} & \frac{\partial p_2^2}{\partial^2 H} \\ -\frac{\partial q_1^2}{\partial^2 H} & -\frac{\partial q_1 \partial q_2}{\partial^2 H} & -\frac{\partial q_1 \partial p_1}{\partial^2 H} & -\frac{\partial q_1 \partial p_2}{\partial^2 H} \\ -\frac{\partial q_2 \partial q_1}{\partial^2 H} & -\frac{\partial q_2^2}{\partial^2 H} & -\frac{\partial q_2 \partial p_1}{\partial^2 H} & -\frac{\partial q_2 \partial p_2}{\partial^2 H} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \delta q_{1i} \\ \delta q_{2i} \\ \delta p_{1i} \\ \delta p_{2i} \end{pmatrix} \quad (\text{A.8})$$

onde os termos $\frac{\partial^2 H}{\partial p_j \partial q_j}$, $\frac{\partial^2 H}{\partial q_j \partial p_j}$ e $\frac{\partial^2 H}{\partial p_j \partial p_j}$ para os sub-índices iguais ou cruzados se anulam, com sub-índices $j = 1, 2$.

Portanto, as equações de movimento para os vetores desvio obtidas através das equações A.8, são:

$$(\delta \dot{q}_{1i}) = \frac{\partial^2 H}{\partial p_1^2} \delta p_{01}; \quad (\delta \dot{p}_{1i}) = - \left(\delta q_{01} \frac{\partial^2 H}{\partial q_1^2} + \frac{\partial^2 H}{\partial q_1 \partial q_2} \delta q_{02} \right), \quad (\text{A.9})$$

e

$$(\delta \dot{q}_{2i}) = \frac{\partial^2 H}{\partial p_2^2} \delta p_{02}; \quad (\delta \dot{p}_{2i}) = - \left(\delta q_{01} \frac{\partial^2 H}{\partial q_2 \partial q_1} + \frac{\partial^2 H}{\partial q_2^2} \delta q_{02} \right), \quad (\text{A.10})$$

em que, $\vec{v}_i(0) = (\delta q_{01}, \delta q_{02}, \delta p_{01}, \delta p_{02})$, com $i = 1, 2$, é o par de vetores desvio inicial, como indicado na seção 4.3 do capítulo 4.

Referências

- [1] E. Ott e T. Tél. “Chaotic Scattering: A Introduction”, *Chaos* 3, (4) 417(1993).
- [2] C. Jung, H. J. Scholz. “Cantor Set Structures in the Singularities of Classical Potential Scattering”, *J. Phys. A: Math. Gen.* **20**, 3607(1987).
- [3] B. Eckardt. “Irregular Scattering”, *Physica. D*, **33**, 89(1988).
- [4] B. P. Koch e B. Bruhn. “Chaotic Scattering in a Near-Integrable System”, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **25**, 3945-3954(1992).
- [5] J. M. Seoane e M. A. F. Sanjuán. “New Developments in Classical Chaotic Scattering”, *Rep. Prog. Phys.*, **76**, 016001, 53pp, (2013).
- [6] J. M. Seoane e M. A. F. Sanjuan. “Exponential Decay and scaling laws in Noisy Chaotic Scattering”, *Phys. Letters A*, **372**, 110(2008).
- [7] Y. Lau, J. M. Finn e E. Ott. “Fractal Dimension in Nonhyperbolic Chaotic Scattering”, *Phys. Rev. Lett.*, **66**, 978(1991).
- [8] C. Vidal. “Notas Sobre Sistemas Hamiltonianos e Aplicações a Mecânica Celeste”, Universidade Del Bío Bío, Chile, Outubro de 2009, 77p.
- [9] G. Jr. Wolken. “Collision of a Diatomic Molecule with a Solid Surface”, *J. Chem. Phys.*, **58**, 3047(1973).
- [10] K. Amano, D. Narimatsu, S. Sotome, S. Tashiro, A. Uchida e S. Yoshimori. “Fractal Dimension of Chaotic Light Scattering in Regular Polyhedral Mirror Ball Structures”, *Phys. Rev. E*, **76**, 046213(2007).
- [11] D. Sweet, B. W. Zeff, E. Ott e D. P. Lathrop. “Three Dimensional Optical Billiard Chaotic Scattering”, *Physica D*, **154**, 207(2001).
- [12] J. Aguirre, R. L. Viana e M. A. F. Sanjuán. “Fractal Structures in Nonlinear Dynamics”, *Rev. Mod. Phys.*, **81**, 333(2009).
- [13] J. Kennedy e J.A. Yorke. “Basins of Wada”, *Physica D*, **51**, 213-225, (1991).
- [14] C. C. Rankin e W. H. Miller. “Classical S-matrix for Linear Reactive Collisions of H^+Cl_2 ”, *J. Chem. Phys.*, 55:3150, (1971).
- [15] B. Eckhardt e C. Jung. “Regular and Irregular Potential Scattering”, *J. Phys. A*, **19**, L829-L833(1986).

- [16] M. J. Davis e S. K. Gray. “Unimolecular Reactions and Phase Space Bottlenecks”, *J. Chem. Phys.*, **84**, 5389-5411(1986).
- [17] D. W. Noid, S. K. Gray e S. A. Rice. “Fractal Behavior in Classical Collisional Energy Transfer”, *J. Chem. Phys.*, **84**, 2649-52(1986).
- [18] D. Gorse, B. Salanon, F. Fabre, A. Kara, J. Perreau, G. Armand e J. Lapujoulad. “Diffraction of Helium from *Cu*(110), *Cu*(113), *Cu*(115) e *Cu*(117); Interaction Potential and Surface Crystallography”, *Surface Science*, **147**, 611(1984).
- [19] R. Guantes, F. Borondo e S. Miret-Artés. “Periodics Orbits and the Tangle in Atom-Surface Chaotic Scattering”, *Phys. Review E*, **56**, 1(1997).
- [20] K. H. Rieder. “Experimental investigation of the Energy Dependence and Evidence for the Softness of the *He/Ni*(110) Potential”, *Surface Science*, **117**, 13-22(1982).
- [21] K. H. Rieder e W. Stocker. “The *He/Pd*(110) Interaction Potential”, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **16**, L783-L788(1983).
- [22] Ch. Skokos. “Alignment indices: A New, Simple Method for Determining the Ordered or Chaotic Nature of Orbits”, *J. Phys. A: Math. Gen.* **34** 10029(2001).
- [23] V. I. Arnold, “Mathematical Methods in Classical Mechanics”. Springer, New York, (1978).
- [24] H. Goldstein. “Classical Mechanics”, 2nd Edition, Addison-Wesley, (1981).
- [25] N. A. Lemos. “Mecânica Analítica”, Livraria da Física, São Paulo (2007).
- [26] M. A. M. de Aguiar. “Caos em Sistemas Hamiltonianos: Notas de Física IFGW”, n.4, Unicamp, Campinas-SP, (1992).
- [27] E. Ott. “Chaos in Dynamical System”, New York, Cambridge University Press, (1993).
- [28] M. A. M. Aguiar. “Caos em Sistemas Clássicos Conservativos”, *Rev. Brasileira de Ens. de Física*, **16**, 1-4 (1994).
- [29] N. P. Maffione, L. A. Darriba, P. M. Cincotta, C. M. Giordano. “A Comparison of Different Indicators of Chaos Based on the Deviation Vectors: Application to Symplectic Mappings”, *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*, **111**, 285(2011).
- [30] T. Tél e M. Guriz. “Chaotic Dynamics: An introduction Basead on Classical Mechanics”, Cambridge University Press, New York, 427p, (2006).

- [31] T. Tél e M. Gruiz. “Chaotic Dynamics”, Cambridge University Press, Cambridge, (2006).
- [32] L. H. A. Monteiro. “Sistemas Dinâmicos”, Editora Livraria da Física, São Paulo, 2011.
- [33] H. D. I. Abarbanel, R. Brown, J. J. Sidorowich e Sh. Tsimring. “The Analysis of Observer Chaotic data in Physical System”, *Reviews of Modern Physics*, **65**, 4(1993).
- [34] I. C. Moreira. “Sistemas Caóticos em Física-Uma Introdução”, *Revista Brasileira de Ensino de Física*, **15**, n. (1-4), (1993).
- [35] I. Stewart. “Será que Deus Joga Dados?-A nova Matemática do Caos”, Ed. Jorge Zahar, (1991).
- [36] R. Blümel e W. P. Reinhardt. “Chaos in atomic Physics”, Cambridge University Press, 1st edition, New York, 342p, (1997).
- [37] B. Eckhardt. “Fractal Properties of Scattering Singularities”, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **20**, 5971(1987).
- [38] I. M. Jánosi, T. Tél. “Time-Series Analysis of Transiente Chaos”, *Phys. Review E*, **45**, 4(1994).
- [39] C. Grebogi, E. Ott e J. A. Yorke. “Fractal Basin Boudaries, Long-lived Chaotic Transients, and Unstable-Unstaible Pair Bifurcation”, *Phys. Rev. Lett.*, **50**, 13(1983).
- [40] Y. -C. Lai, T. Tél. “Transient Chaos: Complex Dynamics on Finit-time Scales. Applied Mathematical Sciences”, Springer, New York, **73**, (2010).
- [41] G. H. Hsu, E. Ott, e C. Grebogi. “Strange Saddles and Dimensions of their Invariant Manifolds”, *Phys. Lett. A*, **127**, 199(1988).
- [42] J. Aguirre, F. d’Ovidio e M. A. F. Sanjuán. “Controlling Chaotic Transients: Yorke’s Game of Survival”, *Phys. Review E*, **69**, 016203(2004).
- [43] A. Wolf, J. B. Swift, H. L. Swinney e J. A. Vastano. “Determining Lyapunov Expoent from a Time Series”, *Phys. D*, **16**, 285(1985).
- [44] P. Gaspard e G. Nicolis. Transport Properties. “Lyapunov Exponents, and Entropy Per Unit Time”, *Phys. Rev. Lett.*, **65**, 1693(1990).
- [45] B. R. Hunt, E. Ott e J. A. Yorke. “Fractal Dimensions of Chaotic Saddles of Dynamical Systems”, *Phys. Rev.*, **54**, 4819(1996).

- [46] B. B. Mandelbrot. “The Fractal Geometry of Nature”, Freeman, New York, (1983).
- [47] Ch. Skokos, T.C. Bountis e Ch. Antonopoulos. “Geometrical Properties of Local Dynamics in Hamiltonian Systems: The Generalized Alignment Index (*GALI*) Method”, *Phys. D nonlinear Phenomena*, **231**, 34-54(2007).
- [48] Ch. Skokos, C. Antonopoulos, T. C. Bountis e M. N. Vrahatis. “How does the Smaller Alignment Index (*SALI*) Distinguish order from Chaos”, *Progress of Theoretical Phys. Supplement*, **150**, 439-443(2003).
- [49] P. Gaspard e S. A. Rice. “Scattering from a Classically Chaotic Repeller”, *J Chem. Phys.*, **90**, 4(1989).
- [50] Ch. Skokos. *The Lyapunov Characteristic Exponents and their Computation, Lecture Notes in Physics*, **790**, pp 63-135(2010).
- [51] T. A. de Assis, J. G. V. Miranda, F. B. Mota, R. F. S. Andrade, C. M. C. de Castro. “Geometria Fractal: Propriedades e Características de Fractais Ideais”, *Revista Brasileira de Ensino de Física*, **30**, n.2, 2304(2008).
- [52] A. L. Barabási e H. E. Stanley, “Fractal Concepts in Surface Growth”, Cambridge University Press, Cambridge, (1995).
- [53] C. Jung e H. J. Scholz. “Cantor Set Structure in the Singularities of Classical Potencial Scattering”, *J. Phys. A*, **20**, 3607(1987).
- [54] D. Sweet, E. Ott e J. A. Yorke. “Topology in Chaotic Scattering”, *Nature* **339**, 315(1999).
- [55] G. Troll e U. Smilansky. “A Simple Model For Chaotic Scattering”, *Phys. D*, **35**, 34-64(1989).
- [56] E. Pollak e P. Pechuka. “Transition States, Trapped Trajectories, and Classical Bound States Embedded in the Continuum”, *J. Chem. Phys.*, **69**, 1218 (1978).
- [57] K. Someda, R. Ramaswamy e H. Naramura. “Decoupling Surface Analysis of Classical Irregular Scattering and Clarification of its Icicle Structure”, *J. Chem. Phys.*, **98**, 1156(1993).
- [58] Y. C. Lai, T. Tél and C. Grebogi. “Conditions for the Abrupt Bifurcation to Chaotic”, *Phys. Rev. E*, **48**, 709(1993).
- [59] M. Founargiotakis, S. C. Farantos, C. Skokos e G. Contopoulos. *Chem. Phys. Lett.*, **277**, 456(1997).

- [60] P. Gaspard. “Chaos Scattering and Statistical Mechanics”. Cambridge University Press, Cambridge, UK, 3rd edition, (1998).
- [61] T. Baba. “Photonic Crystals and Microdisk Cavities Based on *GaInAsP – InP* System, IEEE Select Top Quantum Electron”, **3**, 808-830(1997).
- [62] K. Richter e D. Wintgen. J. Phys. B, At. Mol. Opt., **23**, L197(1990).
- [63] T. Yamamoto e K. Kaneko. “Helium Atom as a Classical Three-Body Problem”, Phys. Rev. Lett., **70**, 1928(1993).
- [64] D. Wintgen, K. Richter e G. Tanner. Chaos 2, 19(1992).
- [65] Ch. Skokos, Ch. Antonopoulos, T. C. Bountis e M. N. Vrahatis. “Detecting Order and Chaos in Hamiltonian Systems by the *SALI* Method”, J. Phys. A: Math. Gen., **37**, 6269(2004).
- [66] J. Guckenheimer e P. J. Holmes. “Nonlinear Oscillations, Dynamical Systems, and Bifurcations of Vector Fields”, Springer, New York, (1983).
- [67] S. Smale. “Differentiable Dynamics Systems”, Bull. Am. Math. Soc., **73**, 747(1967)
- [68] C. Jung e T. Té. Chaos 3, 555(1993).
- [69] N. Esbjerg e J. K. Norskov. “Dependence of the *He*-Scattering Potential at Surfaces on the Surface-Electron-Density Profile”, Rev. Phys. Letters, **45**, 807(1980).
- [70] J. Perreau e J. Lapujoulade. “Selective Adsorption of *He*, *H₂*, on Copper Surfaces”, Surface Science, **122**, 341(1982).
- [71] A. Liebsch, J. Harris, B. Salanon e J. Lapujoulade. “Interaction of Helium with a Metal Surface. I. Determination of Density Profile of *Cu*(110) via Analysis of Diffraction Intensities”, Surface Sci., **123**, 338(1982).
- [72] J. Harris e A. Liebsch. “Interaction of Helium with a Metal Surface”, J. Phys. C, **15**, 2275(1982).
- [73] A. Luntz, L. Mattera, N. Rocca, S. Terreni, F. Tommasini e U. Valbusa. “Study of the *Ag*(110) Surface by *He* Diffraction Surface”, Sci., 126, 695(1983).
- [74] R. Guantes, F. Borondo e C. Jaffé. “Diffraction of Atoms from Stepped Surfaces: A semiclassical Chaotic S-matrix Study”, Physical Review B, vol.53, n.21, (1996).
- [75] K. H. Rieder e N. Garcia. “Energy Dependence and Softness of the Potential for *He* Scattering from *Ni*(110)”, Phys. Rev. Letters, **49**, 43(1982).

- [76] T. A. de Assis. “Fenomenos Caoticos y Emision Electronica en Superficies Conductoras Irregulares”, Tese de Doutorado, Universidad Politecnica de Madrid (2011).
- [77] B. Salanon, G. Armand, J. Perreau e J. Lapujoulade. “Diffraction of *He* from *Cu*(110) in the 20 – 240 meV Range; Comparison with a Realistic Model Potential Surface”, *Sci.*, **127**, 135(1983).
- [78] A. S. Sanz e S. Miret-Artés. “Quantum Trajectories in Elastic Atom-Surface Scattering: Threshold and Selective Adsorption Resonances”, *The Journal of Chem. Phys.*, **122**, 014702(2005).
- [79] F. L. Moraes Barboza, A. J. Costa, N. F. Ribeiro e E. Dieogo Filho. “Solução Analítica do Potencial de Morse em Mecânica Clássica”, *Rev. Brasileira de Ens. de Física*, **20**, n.4, 543(2007).
- [80] F. Borondo, R. Guantes e S. Miret-Artés. “Quantum Manifestations of Chaos in Elastic Atom-Surface Scattering”, *Phys. Review B*, **63**, 235401 (2001).
- [81] S. Miret-Artés, J. Margalef-Roing, R. Guantes, F. Borondo e C. Jaffé. “Classical Singularities in Chaotic Atom-Surface Scattering”, *Physical Review B*, **54**, 15(1996).
- [82] G. Benettin, L. Galgani, A. Giorgilli e J-M Strelcyn. “Lyapunov Characteristic Exponents for Smooth Dynamical Systems and for Hamiltonian Systems; A Method for Computing all of them”, *Meccanica*, **15**, 9 (1980).
- [83] G. A. Monerat, E. V. Corrêa Silva, G. Oliveira-Neto, A. R. P. de Assumpção e A. R. R. Pada. “Explorando Sistemas Hamiltonianos: Estudos Analítico”, *Revista Brasileira de Ensino de Física*, **28**, n. 2, 177(2006).
- [84] T. A. de Assis, J. C. Losada, R. F. S. Andrade, F. Borondo. *XXXVII Encontro Nacional de Física da Matéria Condensada* ID: 385-3 (2014).