

Movimento de uma partícula em um potencial pseudo-harmônico

(Motion of a particle in a pseudo-harmonic potential)

Vagner H.L. Bessa¹, J. Maurício Matos^{1,2} e Ilde Guedes^{1,2}

¹Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Campus do Pici, Fortaleza, CE, Brasil ²Seara da Ciência, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, CE, Brasil

Recebido em 17/3/2010; Aceito em 12/11/2010; Publicado em 12/7/2011

Neste trabalho apresentamos as soluções analítica e numérica da equação de movimento de uma partícula clássica em um potencial pseudo-harmônico, definido como $V(x) = \frac{1}{2}kx^2 + \frac{1}{2}\frac{a}{x^2}$. Também calculamos a função de partição e obtemos algumas funções termodinâmicas do sistema.

Palavras-chave: oscilador pseudo-harmônico, equação de movimento, termodinâmica.

In this work we present the analytical and numerical solutions of the motion equation for a classical particle in a pseudo-harmonic potential given by $V(x) = \frac{1}{2}kx^2 + \frac{1}{2}\frac{a}{x^2}$. Also, we calculate the partition function and obtain some thermodynamic functions of the system.

Keywords: pseudo-harmonic oscillator, equation of motion, thermodynamics.

1. Introdução

Um dos problemas mais importantes de movimento unidimensional e de solução analítica direta é o oscilador harmônico, ou oscilador linear. O exemplo mais simples desse tipo de movimento é aquele do sistema massa-mola. A força restauradora atuando na partícula de massa m é escrita como $F(x) = -kx$, com a energia potencial associada dada por $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$. A solução geral da equação de movimento, quando nenhuma outra força atua sobre a partícula, pode ser escrita como $x(t) = A\sin(\omega_0 t + \theta_0)$, onde A é amplitude do movimento, $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}} = \frac{2\pi}{T}$ é a frequência angular, com T sendo o período do movimento. Como ω_0 depende somente da constante elástica (k) da mola e de sua massa, vemos que o período do movimento é constante, independente das condições iniciais. A importância do oscilador harmônico resulta, também, do mesmo ser o limite de movimentos oscilatórios mais complexos para pequenas amplitudes.

Neste trabalho estudamos outro movimento unidimensional, o de uma partícula clássica submetida a um potencial pseudo-harmônico (PPH), $V(x) = \frac{1}{2}kx^2 + \frac{1}{2}\frac{a}{x^2}$. Determinamos as soluções analítica e numérica da equação de movimento e analisamos o comportamento da posição, $x(t)$, da velocidade, $v(t)$, e da aceleração, $a(t)$, para um dado conjunto de condições ini-

ciais. Também, calculamos algumas funções termodinâmicas do sistema.

O termo pseudo-harmônico foi proposto por Goldman e Krivchenkov [1] no início dos anos 1960, para descrever o potencial $V = V_0(\frac{x}{a} - \frac{a}{x})^2$, onde V_0 e a são dois parâmetros adimensionais. Post, em 1956, introduziu o potencial de interação $\frac{1}{x^2}$ para estudar o problema de muitas partículas interagindo aos pares em uma dimensão [2]. Desde 1961, modelos envolvendo potenciais expressos como a soma de um termo harmônico e um termo inverso quadrático, foram estudados por diversos autores. Por exemplo, Landau e Lifshitz determinaram as soluções exatas da equação de Schrödinger para uma partícula em um potencial pseudo-harmônico em três dimensões [3]. Hurley considerou este potencial para estudar o problema de três corpos em uma dimensão [4]. Calogero abordou o problema de N corpos interagindo através de um potencial pseudo-harmônico [5,6]. Serra, Pedrosa e Guedes utilizaram o método de Lewis e Riesenfeld para obter a solução exata para a equação de Schrödinger para uma partícula em um PPH unidimensional e dependente do tempo [7]. Este trabalho encontra-se dividido da seguinte forma: (i) Na Seção 2. obtemos as soluções analítica e numérica para o sistema; (ii) Na Seção 3. calculamos a função de partição e algumas das funções termodinâmicas para este sistema; e, (iii) Na Seção 4. apresentamos os comentários finais.

¹E-mail: vagner@fisica.ufc.br.

2. Movimento de uma partícula em um potencial pseudo-harmônico

2.1. Solução analítica

Considere uma partícula de massa m cujo potencial é dado pela equação

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 + \frac{1}{2}\frac{\alpha}{x^2}, \quad (1)$$

onde k e α são expressos em unidades de N/m e Nm³, respectivamente. A expressão para a força é facilmente obtida, sendo dada por

$$F(x) = \frac{dV}{dx} = -kx + \frac{\alpha}{x^3}. \quad (2)$$

A Fig. 1 mostra o gráfico da função $V(x)$ para $k = 100$ N/m e $\alpha = 10$ Nm³. Observamos que $V(x)$ é uma função que diverge tanto para $x = 0$ e $x \rightarrow \pm\infty$, possuindo assim um ponto de mínimo em cada região ($x > 0$ ou $x < 0$). Independentemente da magnitude da energia mecânica da partícula, ela nunca passará de uma região para a outra, mantendo-se em movimento oscilatório entre dois pontos da região considerada.

Observemos a partícula localizada na região $x > 0$. O ponto para o qual $V(x)$ é mínimo corresponde ao ponto de equilíbrio, e nesse ponto a força é zero. Da expressão $dV/dx = 0$, obtemos

$$x_{min} = \left(\frac{\alpha}{k}\right)^{\frac{1}{4}}, \quad (3)$$

e, conseqüentemente

$$V(x_{min}) = \sqrt{\alpha k}. \quad (4)$$

Para valores de energia maiores que $\sqrt{k\alpha}$, a partícula oscilará entre os dois pontos de retorno. Sabemos que para forças dependentes somente da posição, a energia mecânica do sistema,

$$E = \frac{mv^2}{2} + \frac{kx^2}{2} + \frac{\alpha}{2x^2}, \quad (5)$$

se conserva. Nos pontos de retorno (x_r) a energia cinética é nula e atendendo à conservação da energia mecânica, escrevemos

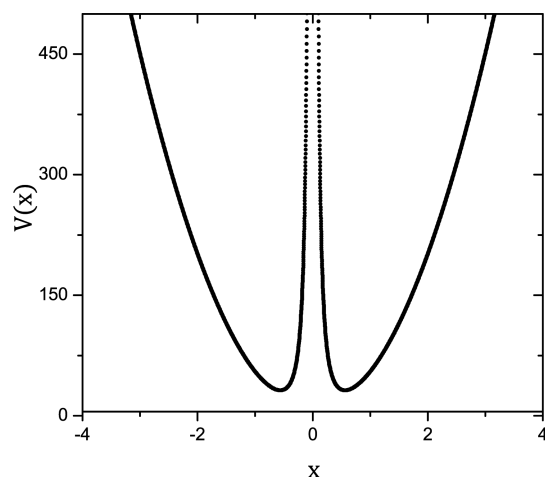


Figura 1 - Gráfico de $V(x)$, Eq. (1), com $k = 100$ N/m e $\alpha = 10$ Nm³.

$$E = \frac{kx_r^2}{2} + \frac{\alpha}{2x_r^2}. \quad (6)$$

Após alguma álgebra, encontramos

$$x_r = \sqrt{\frac{2E \pm \sqrt{(2E)^2 - 4k\alpha}}{2k}}. \quad (7)$$

Para obtermos $x(t)$ usamos a Eq. (5) e resolvemos a equação diferencial

$$\frac{dx}{dt} = \sqrt{\frac{2(E - V(x))}{m}}, \quad (8)$$

onde consideramos a parte da oscilação em que a velocidade é positiva. Se a partícula se desloca de uma posição inicial x_0 em $t = 0$ até a posição x no instante t , obtemos com $V(x)$ dado pela Eq. (1), a seguinte expressão

$$\int_0^t dt = \int_{x_0}^x \sqrt{\frac{m}{2}} \frac{\sqrt{2/k} dx}{\sqrt{\frac{E^2 - k\alpha}{k^2} - \left(x^2 - \frac{E}{k}\right)^2}}. \quad (9)$$

Com as substituições $x^2 - \frac{E}{k} = \frac{\sqrt{E^2 - k\alpha}}{k} \operatorname{sen}\theta$ e $xdx = \frac{1}{2} \frac{\sqrt{E^2 - k\alpha}}{k} \cos\theta d\theta$, na Eq. (9), obtemos, após a integração, a seguinte expressão para $x(t)$

$$x(t) = \sqrt{\frac{E}{k} + \frac{\sqrt{E^2 - k\alpha}}{k} \operatorname{sen} \left[2\sqrt{\frac{k}{m}} t + a \operatorname{sen} \left(\frac{x_0^2 - E/k}{\sqrt{E^2 - k\alpha}} \right) \right]} \quad (10)$$

Podemos reescrever a Eq. (10) como

$$x(t) = \sqrt{C + A \operatorname{sen}(\omega t + \theta_0)}, \quad (11)$$

onde

$$C = \frac{E}{k}, \quad (12)$$

$$A = \frac{\sqrt{E^2 - k\alpha}}{k}, \quad (13)$$

$$\omega = 2\sqrt{\frac{k}{m}} = 2\omega_0, \quad (14)$$

e

$$\theta_0 = \operatorname{asen} \left[\frac{(x_0^2 - E/k)}{\sqrt{E^2 - k\alpha}} \right], \quad (15)$$

$$a(t) = \frac{dv}{dt} = -\frac{\omega^2 A \operatorname{sen}(\omega t + \theta_0)}{\sqrt{C + A \operatorname{sen}(\omega t + \theta_0)}} - \frac{\omega^2 A^2 \cos^2(\omega t + \theta_0)}{4[C + A \operatorname{sen}(\omega t + \theta_0)]^{-3/2}}. \quad (17)$$

Substituindo a Eq. (11) na Eq. (17), teremos

$$a(t) = \frac{dv}{dt} = -\frac{\omega^2 A \operatorname{sen}(\omega t + \theta_0)}{x} - \frac{\omega^2 A^2 \cos^2(\omega t + \theta_0)}{4x^3}. \quad (18)$$

Com um pouco de álgebra e usando as Eqs. (12), (13) e (14) determinamos a partir da Eq. (18), a aceleração $a(t)$

$$a = -\frac{kx}{m} + \frac{\alpha}{mx^3}, \quad (19)$$

que é consistente com $F(x)$ (veja Eq. (2)), verificando assim a exatidão da solução para $x(t)$, dada pela Eq. (11).

As condições iniciais são dadas pela posição inicial x_0 e a velocidade inicial v_0 . A energia inicial, E_0 , é dada por $E_0 = \frac{1}{2}mv_0^2 + \frac{1}{2}kx_0^2 + \frac{1}{2}\frac{\alpha}{x_0^2}$.

2.2. Solução numérica

Nesta seção mostraremos um método numérico simples, Euler do ponto final (EPF), que usaremos na solução da equação de movimento de uma partícula sujeita é força definida na Eq. (2).

O método numérico de Euler clássico, para se resolver equações diferenciais, é baseado em um processo seqüencial. Sabendo-se a aceleração iniciamos o processo com uma velocidade e uma posição da partícula num determinado tempo t e obtemos uma nova velocidade num tempo posterior $t + \Delta t$. Para sistemas unidimensionais as relações matemáticas entre posição, velocidade e aceleração são dadas por

$$\frac{dx}{dt} = v, \quad (20)$$

$$\frac{dv}{dt} = a. \quad (21)$$

sendo $\omega_0 = \sqrt{\frac{k}{m}}$ a frequência angular de um oscilador harmônico simples com constante elástica k e massa m . A velocidade é obtida derivando-se $x(t)$,

$$v(t) = \frac{dx}{dt} = \frac{\omega A \cos(\omega t + \theta_0)}{2\sqrt{C + A \operatorname{sen}(\omega t + \theta_0)}}. \quad (16)$$

Substituindo as Eqs. (11) e (16) na Eq. (5), e usando as Eqs. (12), (13) e (14) podemos verificar que $E = E_0$. Verificamos também que $x(t)$ é periódico com período $T = 2\pi/\omega$, pois $x(t + T) = \sqrt{C + A \operatorname{sen}(\omega t + 2\pi + \theta_0)} = x(t)$. Derivando $v(t)$, Eq. (16), obtemos a aceleração em função do tempo,

A aceleração pode ser uma função do tempo, da velocidade e da posição. As Eqs. (20) e (21) podem ser resolvidas numericamente convertendo-as em equações lineares que são iteradas passo a passo. Da definição de derivada escrevemos a Eq. (21) como

$$a = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{v(t + \Delta t) - v(t)}{\Delta t}. \quad (22)$$

Para Δt suficientemente pequeno, podemos escrever

$$v(t + \Delta t) = v(t) + a\Delta t, \quad (23)$$

que indica a possibilidade de substituir as equações do movimento por equações lineares iterativas no tempo. Para Δt constante e fazendo $t_n = t_0 + n\Delta t$, $v(t_n) = v_n$, $a(t_n, v_n, x_n) = a_n$ e $v(t_n + \Delta t) = v_{n+1}$, teremos

$$v_{n+1} = v_n + a\Delta t, \quad (24)$$

e

$$x_{n+1} = x_n + v\Delta t. \quad (25)$$

As Eqs. (24) e (25) são consideradas o ponto de partida para o desenvolvimento de algoritmos elementares. Estas equações compõem o conhecido método de Euler ou método do primeiro ponto (EPP), pois no cálculo de x_{n+1} a velocidade usada é a velocidade v_n no início do intervalo de iteração. O método EPP não é indicado para a integração de sistemas periódicos, pois os erros introduzidos em cada iteração são cumulativos. Por exemplo, aplicado na solução do oscilador harmônico simples, esta aproximação apresenta respostas onde a amplitude de movimento cresce em cada ciclo.

O método mais simples para se resolver equações de movimento em sistemas periódicos é o método de Euler do ponto final (EPF). Este método foi descoberto quase que por acaso [8] e apesar de muito simples,

apresenta resultados estáveis. A velocidade é obtida da mesma maneira que na aproximação anterior, porém, no cálculo da posição, no lugar de se usar a velocidade no começo do intervalo, usamos a velocidade no fim do intervalo. Pode-se mostrar que os erros introduzidos nesta aproximação são limitados, oscilatórios e cujo valor médio, integrado em um dado período é zero. Na Ref. [9] há uma comparação entre os métodos (EPF) de Euler, Diferenças Finitas e Runge-Kutta de quarta ordem para o movimento de um projétil sujeito à força de gravidade, resistência do ar, altitude variável e ventos. Os resultados obtidos com o método (EPF) com $\Delta t = 0,0001$, são idênticos aos métodos mais elaborados.

Usando o programa em FORTRAN, listado no Apêndice A, baseado no método (EPF), resolvemos a equação do movimento para o (PPH) com aceleração dada pela Eq. (19) e comparamos com a solução analítica, Eq. (10). Na Fig. (2) mostramos a comparação entre a solução analítica e a numérica da Eq. (19), para $m = 1,0$ kg, $k = 1,0$ N/m, $\alpha = 1,0$ Nm³, com as condições iniciais, $t_0 = 0$, $x_0 = x_{min}$ e $v_0 = 1,0$ m/s. No cálculo numérico usamos $\Delta t = 0,00001$ s. Observamos que os resultados exatos e numéricos coincidem em cinco casas decimais com um erro percentual relativo (EPR), definido por $EPR = \frac{|x_{exato} - x_{num}|}{x_{exato}} 100\%$, nulo para o tempo total de 100 períodos do movimento. portanto, em todos os cálculos numéricos assumimos $\Delta t = 10^{-5}$ s.

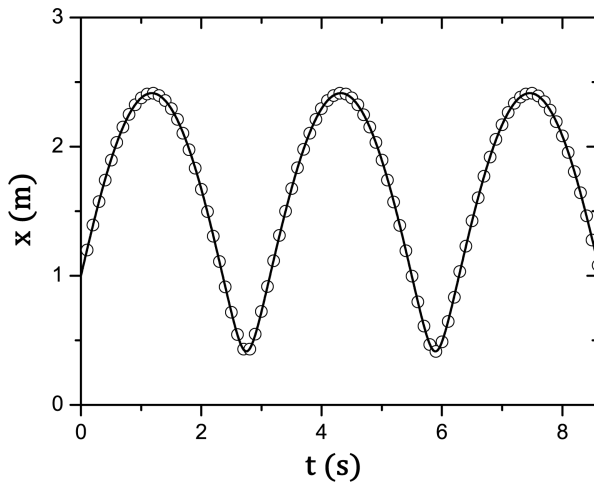


Figura 2 - Comparação entre as soluções analítica e numérica da Eq. (19). Os valores utilizados foram $k = 1,0$ kg/m, $\alpha = 1,0$ Nm³, $m = 1,0$ kg, $t_0 = 0,0$ s, $x_0 = x_{min}$ e $v_0 = 1,0$ m/s.

Considere que a partícula tem massa unitária, $E_0 = 100$ J e encontra-se na região $x > 0$. Os valores de k e $\alpha = 10$ são 100 N/m e 10 Nm³, respectivamente. De acordo com as Eqs. (3) e (7) o ponto de mínimo é $x_{min} = 0,562$ m, e os pontos de retorno para o PPH são $x_{r1} = 1,396$ m e $x_{r2} = 0,227$ m, respectivamente. Considerando que inicialmente a partícula está em $x_{r1} = 1,396$ m com $v_0 = 0$, e utilizando o método de Euler do ponto final mostramos nas Figs. (3)(a)-(c) os gráficos

(linhas sólidas) correspondentes as variações de $x(t)$, $v(t)$ e $a(t)$, respectivamente. Para efeito de comparação também mostramos as respectivas variações (linhas tracejadas) para para esta partícula oscilando harmonicamente com frequência angular ω_0 , para os mesmos valores de E_0 e k . Com estes valores, os pontos de retorno para a partícula no potencial harmônico simples (PHS) são $x_r = \pm 1,415$ m.

Observamos da Fig. (3) a periodicidade dos movimentos, sendo que o período do movimento para o PPH é metade do período do movimento para o PHS. Observamos também que $x(t)$ do PPH não é uma função harmônica (seno ou cosseno). Assim, por fornecer para $x(t)$ uma função periódica, mas não harmônica, o potencial $V(x) = \frac{1}{2}kx^2 + \frac{1}{2}\frac{\alpha}{x^2}$ é denominado de pseudo-harmônico.

Pelo teorema de Fourier [10] sabemos que qualquer função contínua e periódica, pode ser expandida em uma série de Fourier. Para o PPH, $x(t)$ pode ser expressa como

$$x(t) = \frac{1}{2}A_0 + \sum_{n=1}^{\infty} [A_n \cos(n\omega t) + B_n \sin(n\omega t)]. \quad (26)$$

As frequências $n\omega$ ($\omega = 2\pi f$) participantes na expansão de $x(t)$, Eq. (30), podem ser obtidas do cálculo da transformada rápida de Fourier (FFT) [11] de $x(t)$. Nas Figs. 4(a) e (b) apresentamos o gráfico da FFT para o PPH e o PHS, respectivamente. $f_0 (= 1,6$ Hz, para $m = 1$ kg e $k = 100$ N/m) corresponde ao valor da frequência de oscilação para a partícula no PHS.

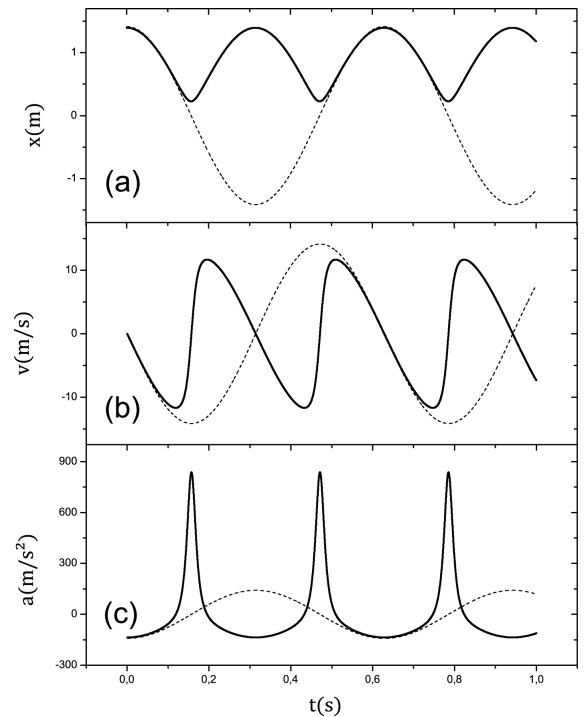


Figura 3 - Posição (a), velocidade (b) e aceleração (c) de uma partícula no PPH (linha sólida) e oscilando harmonicamente (linha tracejada), calculadas através do método EPF.

Na Fig. (4) (a) observamos a presença das quatro frequências mais importantes na expansão de $x(t)$ do PPH. A presença de harmônicos, múltiplos da frequência f_0 , na Fig. (4)(a) estão associada ao fato que a partícula no PPH está sujeita a uma força não-linear (veja Eq. (2)).

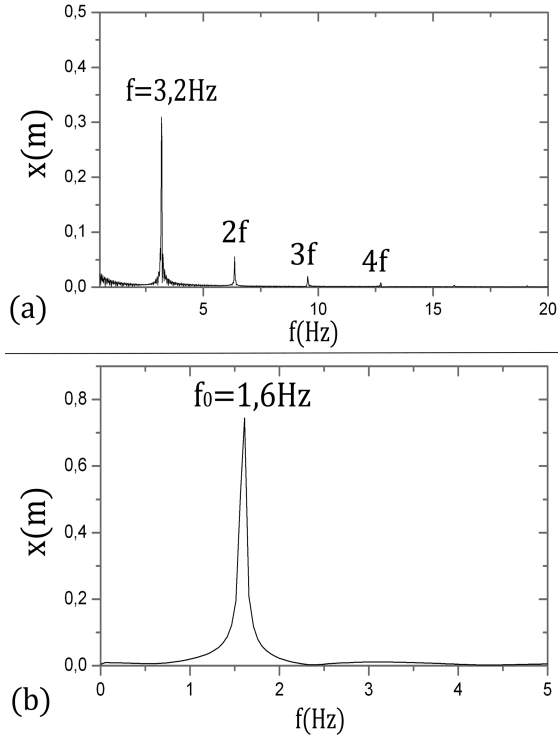


Figura 4 - Transformada rápida de Fourier (FFT) de $x(t)$ do (a) PPH e (b) oscilador harmônico. Os valores utilizados foram $k = 100 \text{ N/m}$ e $\alpha = 10 \text{ Nm}^3$.

Podemos entender melhor o comportamento da partícula no PPH analisando o diagrama do espaço de fase $(x(t) \times p(t))$, mostrado na Fig. (5). Observamos que a partícula após partir do ponto de retorno x_r com $v_0 = 0$, começa a ser acelerada em direção a x_{min} , onde sua velocidade é máxima e a aceleração nula. Em seguida é fortemente desacelerada até atingir o repouso em x_r . Novamente é acelerada em direção ao ponto de mínimo onde atinge sua velocidade máxima, para depois ser desacelerada e alcançar o ponto de retorno x_r com $v = 0$, completando um período de oscilação.

Quando a partícula oscila próximo ao ponto de equilíbrio estável x_{min} do PPH é possível encontrar uma solução harmônica aproximada para esse movimento. Vamos expandir o PPH, Eq. (1), numa série de Taylor em torno da posição de equilíbrio, a saber

$$V(x) = V(x_{min}) + (V')_{x_{min}}(x - x_{min}) + \frac{1}{2}(V'')_{x_{min}}(x - x_{min})^2 + \frac{1}{6}(V''')_{x_{min}}(x - x_{min})^3 + \dots \quad (27)$$

Fazendo $x' = x - x_{min}$, o que desloca o ponto de mínimo do potencial para a origem, e observando que $V(x_{min})$ é uma constante, $(V')_{x_{min}} = 0$, e $(V'')_{x_{min}} = 4k$, reescrevemos a Eq. (27) como

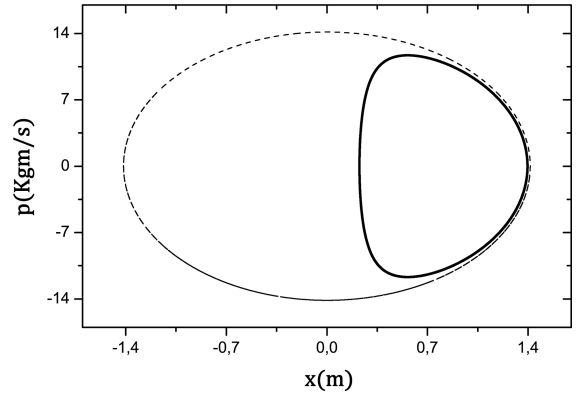


Figura 5 - Diagrama do espaço de fase para uma partícula no PPH (linha sólida) e no PHS (linha tracejada).

$$V(x') = V(x) - V(x') = \frac{1}{2}(4k)(x')^2 + \dots \quad (28)$$

No regime de pequenas oscilações os termos de ordem superior podem ser desprezados e $V(x')$ torna-se um potencial harmônico com frequência dada pela Eq. (14). Com $m = 1,0 \text{ kg}$, $k = 100,0 \text{ N/m}$, $\alpha = 10,0 \text{ Nm}^3$, $t_0 = 0,0\text{s}$, $x_0 = x_{min}$ e $v_0 = 0,5 \text{ m/s}$, usamos o programa do Apêndice A para simular o regime em baixas amplitudes. Nas Figs. (6)(a)-(c) mostramos os gráficos de $x'(t)$, de sua FFT e de seu respectivo diagrama do espaço de fase, respectivamente. Verificamos assim que nesse regime o movimento corresponde ao de um oscilador harmônico simples.

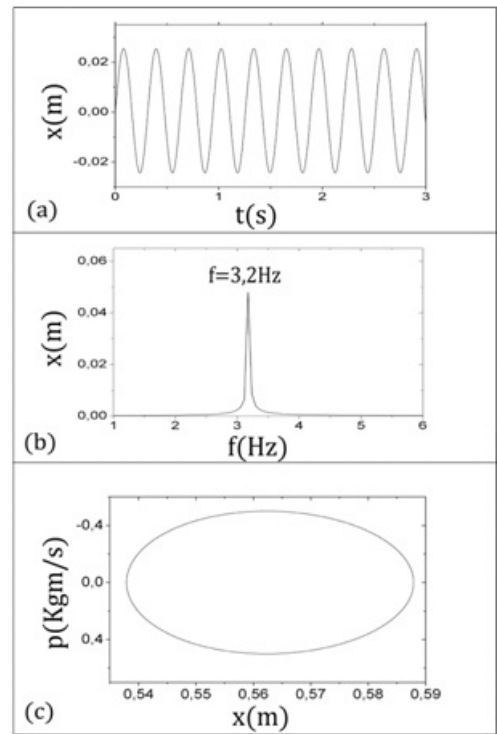


Figura 6 - Posição (a), FFT (b) e diagrama do espaço de fase (c) para uma partícula no PPH no regime de pequenas oscilações.

3. Propriedades termodinâmicas

Estudaremos agora as propriedades termodinâmicas deste sistema em equilíbrio com um reservatório térmico infinitamente grande, com temperatura absoluta T . As funções termodinâmicas podem ser obtidas a partir da função de partição clássica, dada por [12]

$$Z = \int \frac{dx dp}{h} e^{-\beta \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} k x^2 + \frac{1}{2} \frac{\alpha}{x^2} \right)}, \quad (29)$$

onde $E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} k x^2 + \frac{1}{2} \frac{\alpha}{x^2}$ é a energia do sistema, h é a constante de Planck incluída para que a função de partição não dependa da escolha dimensional do espaço de fase, e $\beta = 1/k_B T$, sendo k_B a constante de Boltzmann. A integração nos momenta é feita sobre todo o domínio. Para as coordenadas x_i devemos integrar no intervalo $(0, +\infty)$. A Eq. (29) pode ser escrita na forma

$$Z = \frac{1}{h} \int dx dp e^{-\beta \left(\frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} k x^2 + \frac{1}{2} \frac{\alpha}{x^2} \right)}. \quad (30)$$

A integral em dp é simples e o resultado igual a $\sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}}$. A integral em dx pode ser encontrada na Ref. [13], sendo o resultado igual a $\frac{1}{2} \sqrt{\frac{2\pi}{\beta k}} e^{-\beta \sqrt{k\alpha}}$. Assim a expressão para a função de partição clássica para a partícula no PPH é dada por

$$Z = \frac{k_B T}{2\hbar\omega_0} e^{-\frac{\sqrt{k\alpha}}{k_B T}} = \frac{k_B T}{\hbar\omega} e^{-\frac{\sqrt{k\alpha}}{k_B T}}, \quad (31)$$

onde $\hbar = \frac{2\pi}{h}$. Para uma partícula no PHS, Z é dada por

$$Z = \frac{k_B T}{\hbar\omega_0}. \quad (32)$$

A diferença entre ambas reside no valor da frequência de oscilação e na presença do termo $e^{-\beta \sqrt{k\alpha}}$. Começamos calculando a energia interna u do sistema. Da expressão, $u = \partial \ln Z / \partial \beta$ e utilizando a Eq. (31), encontramos

$$u = K_B T + \sqrt{k\alpha}, \quad (33)$$

que, a menos do fator $\sqrt{k\alpha}$ é análoga à expressão para a energia interna de uma partícula no PHS. Ou seja, o potencial inverso quadrático $\frac{1}{2} \frac{\alpha}{x^2}$, modifica a energia interna apenas por uma constante que depende da sua magnitude α .

Uma vez obtida a energia interna, o calor específico pode ser facilmente calculado, e o resultado é

$$c = \left(\frac{\partial u}{\partial T} \right)_N = k_B. \quad (34)$$

Da expressão para a entropia, $s = k_B (\ln Z + \beta u)$, obtemos

$$s = k_B \left[\ln \left(\frac{k_B T}{\hbar\omega} \right) + 1 \right]. \quad (35)$$

Observe que tanto o calor específico quanto a entropia independem da magnitude α do potencial inverso quadrático. Enquanto as expressões para o calor específico são iguais para os dois potenciais, as expressões para a entropias diferem apenas no valor da frequência oscilação.

Recentemente, Dong e cols. [14] consideraram a solução da equação de Schrödinger para uma partícula no PPH unidimensional e independente do tempo. Também determinaram a função de partição, Z , e calcularam algumas de suas funções termodinâmicas. Eles também obtiveram expressões para o calor específico e a entropia que independiam de α . Nas palavras dos autores, "It is both interesting and surprising to find that both vibrational specific heat and entropy are independent of the potential strength α ". A seguir tentaremos entender porque tanto o calor específico quanto a entropia para uma partícula no PPH independem de α .

Do ponto de vista da Mecânica Clássica o comportamento de uma partícula que se move em uma dimensão pode ser representado em um espaço de fase bidimensional, onde cada ponto (x, p) , que depende do valor da energia E , caracteriza o estado dinâmico da partícula.

Cada ponto deste plano representa um estado possível para a partícula. Assim, o número de estados acessíveis à partícula é proporcional à área ($dx dp$) de uma região desse plano. De uma forma geral, o elemento de área $dx dp$, pode ser expresso por

$$dx dp \propto g(E) dE, \quad (36)$$

onde $g(E)$ é a densidade de estados de energia.

Para um oscilador harmônico unidimensional, seus possíveis estados no diagrama de fase (x, p) estão ao longo de uma elipse (veja Fig. (3), linha pontilhada), cuja área é proporcional à energia, E . Logo, um elemento de área $dx dp$ é proporcional ao elemento de energia dE . Nesse caso, a densidade de estados para um oscilador harmônico clássico é uniforme e, simplesmente dada por $g(E) = 1$.

O mesmo raciocínio segue para o oscilador pseudo-harmônico, visto que seus possíveis estados estão ao longo da curva mostrada na Fig. (3) (linha cheia). Novamente $dx dp \propto dE$, e, conseqüentemente, $g(E) = 1$. Ou seja, a densidade de estados é a mesma para ambos os osciladores. Assim, o potencial inverso quadrático, $\frac{1}{2} \alpha/x^2$, não modifica a densidade de estados, e, portanto, tanto o calor específico quanto a entropia, que dependem da densidade de estados, não dependem de α .

A diferença entre de entropia (Δs) entre os sistemas PHS e PPH é dada por $\Delta s = -k_B \ln 2$. Esta quantidade surge no modelo de Szilard de 1929 [15] que é considerado como o precursor da teoria de informação. Entretanto, podemos entender este valor a partir de um modelo mais simples tratado em livros textos de termodinâmica (16).

Considere uma caixa termicamente isolada dividida por uma parede em dois compartimentos, cada um com volume V . Inicialmente n moles de um gás ideal a uma temperatura T está contido em um dos compartimentos. Ao removermos a parede, o gás se expande e passa a ocupar completamente os dois compartimentos. Podemos calcular a variação de entropia relacionada a este processo irreversível (adiabático, mas isentrópico), imaginando um processo reversível que possua os mesmos pontos extremos, uma vez que a variação de entropia de um processo reversível depende apenas dos estados inicial e final do sistema. Assim, considerando uma expansão isotérmica desde V até $2V$, observamos que o gás realiza um trabalho W durante a expansão de modo que seria necessário fornecer uma igual quantidade de calor Q para manter a energia interna constante. O trabalho realizado por n moles de um gás ideal em uma expansão isotérmica de um volume V até $2V$ é dado por $W = nRT \ln(2V/V) = nRT \ln 2$. A variação de entropia é $s = Q/T = nR \ln 2$. Para um sistema com uma molécula ($N = 1$), temos $nR = k_B$.

Este é o ganho de entropia do sistema quando a parede é removida. Agora podemos entender o que ocorre. Quando a partícula está no PPH, seu movimento é restrito, dependendo da escolha inicial, ao semi-espaço $x > 0$ (ou $x < 0$), enquanto que no PHS, seu movimento ocorre em todo o espaço $x \in (-\infty, +\infty)$. Isto explica por que a entropia do sistema PPH é menor que aquela do PHS.

Apêndice A

```
*****
c Este programa calcula a aceleracao, a velocidade e a posicao de uma
c partícula movendo-se segundo o potencial  $V(x) = k*x*x + a/(x*x)$ 
c
c Referências sobre o método numérico:
c
c   A. Cromer, Am. J. Phys. 49, 455 (1981)
c
c   Justino Fazuri, J. Mauricio O. Matos, Rev. Bras. de Ensino de Física,
c   20, 327, (1998).
c
c*****
22  implicit double precision (a-h,o-z)
    format(5f10.4)
    to=0.0d0
    n=0
    tmax=10.0d0
    write(*,*) 'k,a'
    read(*,*) xk,a
    write(*,*) 'xo,vo'
    read(*,*) xo,vo
    open(3, file='xv.dat')
    dt=1.0d-5
    eps=50000
```

4. Conclusão

Neste trabalho estudamos o movimento de uma partícula clássica de massa m no potencial pseudo-harmônico, $V(x) = \frac{1}{2}kx^2 + \frac{1}{2}\alpha/x^2$. Ao resolvermos a equação diferencial de 1ª ordem que surge da expressão da energia mecânica da partícula, obtivemos uma expressão analítica para $x(t)$. Observamos que neste potencial a partícula oscila com o dobro da frequência em comparação a que teria ao mover-se em um potencial harmônico simples. Utilizando o método de Euler do ponto final para solução de equações diferenciais, obtivemos o comportamento de $x(t)$, $v(t)$ e $a(t)$ quando a partícula encontra-se inicialmente em um dos pontos de retorno na região $x > 0$. Interpretamos o movimento da partícula a partir do espaço de fase $(x(t), p(t))$. Determinamos a função de partição e algumas funções termodinâmicas para este sistema. Explicamos porque o calor específico e a entropia independem da magnitude (α) do potencial inverso quadrático.

5. Agradecimentos

Os autores gostariam de agradecer o apoio do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e Fundação Cearense de Apoio ao Desenvolvimento Científico e Tecnológico (FUNCAP).

```

eko=0.5d0*(vo*vo)
epo=0.5d0*xk*xo*xo+a/(2.d0*xo*xo)-dsqrt(xk*a)
eo=eko+epo
open(1, file='tavx.dat')
open(2, file='ener.dat')
write(2,22)xo,epo,eko,eo
10 continue
ax=-xk*xo+a/(xo*xo*xo)
vx=vo+ax*dt
x=xo+vx*dt
t=to+dt
n=n+1
if(n.eq.eps) then
ek=0.5d0*(vx*vx)
ep=0.5d0*xk*x*x+a/(2.d0*x*x)-dsqrt(xk*a)
e=ek+ep
write(1,22)t,ax,vx,x
write(2,22)x,ep,ek,e
n=0
end if
if(t.gt.tmax)go to 99
vo=vx
xo=x
to=t
go to 10
99 continue
close(unit=1)
close(unit=2)
stop
end
C*****

```

Referências

- [1] I.I. Goldman and V.D. Krivchenkov, *Problems in Quantum Mechanics* (Pergamon, London, 1961).
- [2] H.R. Post, *Proc. Phys. Soc. (London) A* **69**, 936 (1956).
- [3] L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Quantum Mechanics, Non-Relativistic Theory* (Pergamon, London, 1965), 3rd ed., Sec. 36.
- [4] J. Hurley, *J. Math. Phys.* **8**, 813 (1967).
- [5] F. Calogero, *J. Math. Phys.* **10**, 2191 and 2197 (1969).
- [6] F. Calogero, *J. Math. Phys.* **12**, 419 (1971).
- [7] I.A. Pedrosa, G.P. Serra e I. Guedes, *Physical Review A*, **56**, 4300 (1997)
- [8] A. Cromer *Am. J. Phys.* **51**, 275 (1983).
- [9] Justino Fazuri e J. Mauricio O. Matos, *Revista Brasileira de Ensino de Física* **20**, 327, (1998)
- [10] Tom W.B. Kibble and Frank H. Berkshire, *Classical Mechanics* (Imperial College Press, 2009), 5th ed.
- [11] Paul L. DeVries, *A First Course in Computational Physics* (John Wiley & Sons, Inc., 1993).
- [12] S.A. Salinas, *Introdução à Física Estatística* (edUSP, São Paulo, 2008), 2^a d.
- [13] I.S. Gradshteyn, *Table of Integrals, Series and Products* (Elsevier and Academic Press, 2007), 7th ed.
- [14] S. Dong, M. Lozada-Cassou, Jiang Yu, F. Jiménez-Ángeles and A.L. Rivera, *J. Q. Chem.* **107**, 366 (2007)
- [15] H.S. Leff and A.F. Rex, in: *Maxwell's Demon, Entropy, Information, Computing*, edited by H.S. Leff and A.F. Rex (Adam Hilger, Bristol, 1990).
- [16] H.D. Young e R.A. Freedman, *Física II - Termodinâmica e Ondas* (Addison Wesley, 2007), 10^a ed.