

# Mecânica Clássica - Pontos de equilíbrio e pontos de retorno

Mario Cezar Bertin<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Affiliation not available

November 2, 2020

## Abstract

Nesta seção, estudaremos pontos de equilíbrio e pontos de retorno de potenciais unidimensionais. Pontos de equilíbrio estão relacionados a estados estáticos estáveis e instáveis de um sistema, através dos pontos críticos do potencial, de primeira derivada nula. Estudaremos, também, pontos de retorno, que são pontos de energia cinética nula de um sistema.

## Introdução

Em seções passadas, vimos que um sistema unidimensional sujeito à conservação de sua energia mecânica fornece formas de se calcular a curva, ou função horária, realizada pelo sistema. No caso de uma partícula sujeita a um potencial unidimensional, se sua energia

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

se conserva, temos

$$\frac{dE}{dt} = 0 \quad \implies \quad m\dot{x}\ddot{x} + \frac{dV}{dx}\dot{x} = 0,$$

leva à equação de movimento

$$m\ddot{x} = -\frac{dV}{dx},$$

que é nada menos que a segunda lei de Newton aplicada ao sistema. Por outro lado, se  $E$  é uma constante de movimento, a eq. (??) resulta na quadratura

$$\Delta t = \pm \sqrt{\frac{m}{2}} \int_{x_0}^x \frac{dx'}{\sqrt{E - V(x')}}.$$

Encontrar a curva solução do sistema implica em resolver (??) ou a quadratura (??), a critério.

Contudo, a quadratura nos fornece um conjunto de informações que a equação de movimento, a princípio, não fornece. Por exemplo, o argumento da raiz do denominador, dado pela expressão  $E - V(x)$ , deve ser sempre maior que zero, sob pena de o denominador da integral ser nulo ou, até mesmo, um número imaginário. Isto implica, em qualquer ponto da trajetória, em que a energia deve ser sempre maior que o valor do potencial naquele ponto. Portanto, uma trajetória com pontos nos quais  $E < V$  é proibida. Por outro lado, pontos em que  $E = V$  são pontos limites do movimento da partícula, em que a energia cinética  $K$  é nula e, portanto, a velocidade é nula. Vamos ver como essas informações são úteis na descrição dos sistemas mecânicos.

## Pontos de equilíbrio

Vamos supor um sistema unidimensional de potencial  $V(x)$ , dependente apenas da posição. Na figura 1, temos um exemplo de gráfico da função

$$V(x) = \frac{1}{4}x^2,$$

que é um exemplo particular do potencial do oscilador harmônico simples.

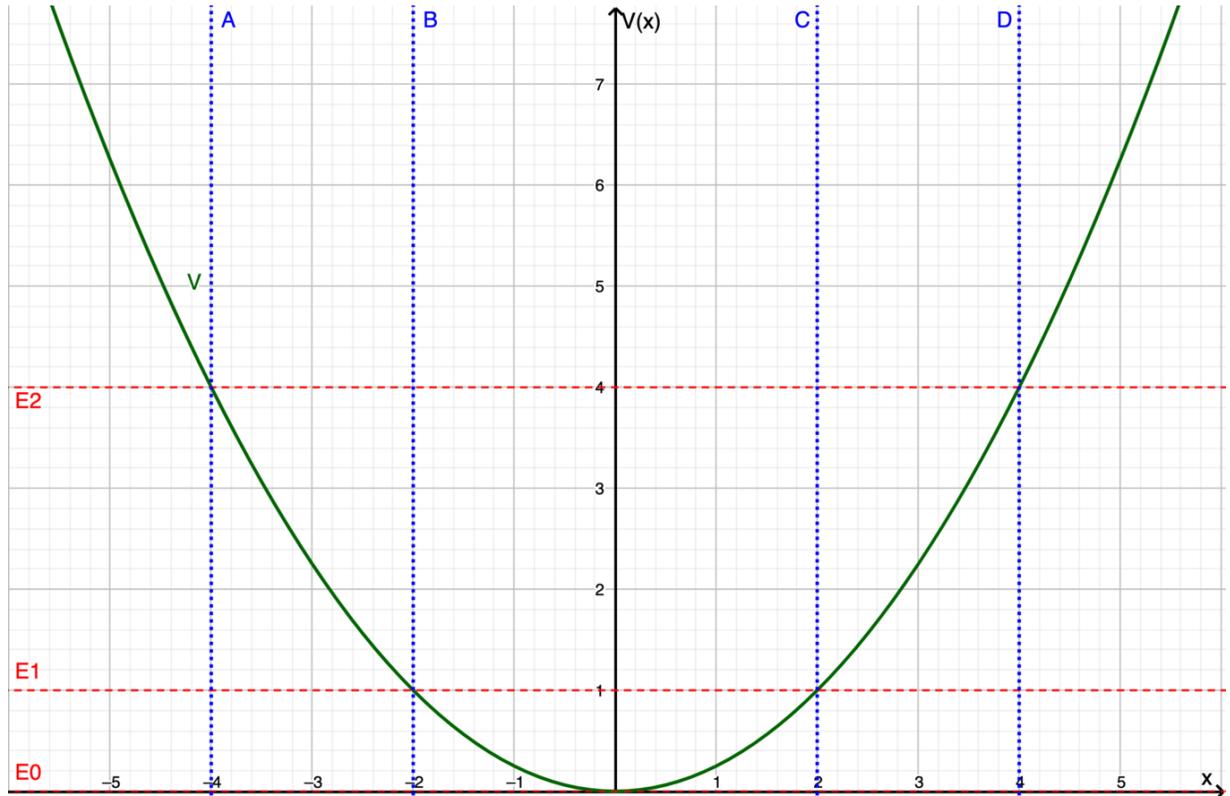


Figure 1: Gráfico do potencial do oscilador harmônico simples.

No gráfico acima, temos também representados três valores de energia mecânica,  $E_0 = 0$ ,  $E_1 = 1$  e  $E_2 = 4$ , por enquanto, vamos ignorar o sistema de unidades utilizado. Como a energia mecânica é constante, seu gráfico é uma reta horizontal com valor igual ao valor da energia. Cada gráfico de energia intersecta o gráfico do potencial em dois pontos: a energia  $E_0$  é igual ao potencial apenas no ponto  $x = 0$ ; a energia  $E_1$  é igual ao potencial nos pontos  $x = \pm 2$ , representados pelas retas  $B$  e  $C$  em azul; por fim, a energia  $E_2$  é igual ao potencial em  $x = \pm 4$ , como mostram as retas  $A$  e  $D$ .

Especialmente no ponto  $x = 0$ , o potencial tem seu valor mínimo global  $V = 0$ , de modo que nenhum ponto do domínio tem valor de potencial menor, ou mesmo igual. Dizemos que  $x = 0$  é um **mínimo global** deste potencial. Este é, também, um ponto de equilíbrio estável, o que significa que qualquer partícula colocada neste ponto tem força instantânea igual a zero, mas se perturbada, tende a voltar a esta posição em razão de uma força restauradora. Isto pode ser visto através da função da força do oscilador:

$$F = -\frac{dV}{dx} = -\frac{1}{2}x,$$

que é negativa para  $x > 0$ , positiva para  $x < 0$  e nula para  $x = 0$ .

Usando esta ideia, definimos os pontos de equilíbrio:

Um **ponto de equilíbrio**, ou **ponto crítico** de um potencial, consiste em um ponto da trajetória no qual a força exercida sobre o sistema é nula.

Como a força é derivada do potencial pela relação  $\mathbf{F} = -\nabla V$ , o que resulta em  $F = -dV/dx$  em uma dimensão, pontos de equilíbrio são encontrados nos pontos nulos da primeira derivada do potencial unidimensional e, portanto, são pontos críticos matemáticos da função  $V(x)$ . Portanto,

Pontos de equilíbrio são raízes da equação

$$\frac{dV(x)}{dx} = 0.$$

## O teorema de Taylor

Para compreender os tipos de pontos de equilíbrio, precisamos recorrer ao [teorema de Taylor](#). O teorema expressa que toda função de uma variável diferenciável  $n$  vezes em um ponto  $x = x'$  pode ser descrita pela série

$$f(x) = f(x') + \frac{1}{1!} \left. \frac{df}{dx} \right|_{x=x'} (x-x') + \frac{1}{2!} \left. \frac{d^2f}{dx^2} \right|_{x=x'} (x-x')^2 + \dots + \frac{1}{n!} \left. \frac{d^n f}{dx^n} \right|_{x=x'} (x-x')^n + R,$$

o que também pode ser escrito por

$$f(x) = \sum_{i=0}^n \frac{1}{i!} \left. \frac{d^i f}{dx^i} \right|_{x=x'} (x-x')^i + R,$$

em que  $R$  é denominada **resto**. Se

$$\lim_{x \rightarrow x'} R = 0,$$

dizemos que  $f$  é uma função analítica em  $x = x'$ .

A prova deste teorema foge ao escopo dessas aulas, mas podemos utilizá-lo para analisar o que ocorre com um potencial que pode ser aproximado pela série de Taylor (??) na forma

$$V(x) \approx V(x') + \frac{1}{1!} \left. \frac{dV}{dx} \right|_{x=x'} (x-x') + \frac{1}{2!} \left. \frac{d^2V}{dx^2} \right|_{x=x'} (x-x')^2.$$

para  $x - x'$  suficientemente pequeno. Aqui, o resto é considerado muito pequeno para contribuir para o valor de  $V$ , portanto, a expressão (??) é uma aproximação adequada para  $V(x)$  desde que  $x$  esteja suficientemente próximo de  $x'$ .

## Tipos de equilíbrio

Agora, vamos supor que  $x = x'$  seja um ponto de equilíbrio de  $V$ . Neste caso, definindo-se  $\Delta V \equiv V(x) - V(x')$ , temos

$$\Delta V \approx \frac{1}{2!} \left. \frac{d^2V}{dx^2} \right|_{x=x'} (x-x')^2,$$

visto que  $dV/dx = 0$  para  $x = x'$ , como condição de criticidade. Agora, temos dois casos:

1. A segunda derivada de  $V$  em  $x = x'$  é positiva: Neste caso, a diferença de potencial  $\Delta V$  é positiva, o que significa  $V(x) > V(x')$ . Neste caso,  $x = x'$  é um ponto de mínimo local do potencial.

Vamos verificar o que ocorre com a força nesta aproximação. Note, primeiro, que

$$\frac{d}{dx} \Delta V = \frac{dV}{dx} \approx \frac{d^2V}{dx^2} \Big|_{x=x'} (x - x') = F(x).$$

Assim, se  $x = x'$  é um ponto de mínimo,  $F(x) > 0$  para  $x < x'$  e  $F(x) < 0$  para  $x > x'$ . Esta é uma força restauradora. Neste caso, dizemos que

Um ponto de mínimo local de um potencial é um **ponto de equilíbrio estável**.

Como comentamos anteriormente, um ponto de equilíbrio estável é caracterizado pela existência de forças restauradoras contra qualquer ação que retire o sistema do equilíbrio. No caso do oscilador harmônico simples da figura 1, o ponto  $x = 0$  é um ponto de equilíbrio estável. De fato, o potencial do oscilador já possui forma quadrática típica da expressão (??), portanto, a série de Taylor do oscilador é exata, tendo resto zero.

2. A segunda derivada de  $V$  em  $x = x'$  é negativa: Neste caso, a diferença de potencial  $\Delta V$  é negativa, o que significa  $V(x) < V(x')$ . Neste caso,  $x = x'$  é um ponto de máximo local do potencial.

No caso 2, observando-se a equação (??), temos que a força é positiva para  $x > x'$  e negativa para  $x < x'$ , portanto, esta é uma força de escape, pois seu módulo aumenta com o aumento da distância absoluta  $|x - x'|$ . Por esta razão,

Um ponto de máximo local de um potencial é um **ponto de equilíbrio instável**.

O oscilador harmônico simples não possui pontos de equilíbrio instáveis. Mas um potencial do tipo  $V = \cos x$ , por exemplo, possui infinitos desses pontos para  $x \in \mathbb{R}$ . Em contrapartida o mesmo potencial possui também infinitos pontos de equilíbrio estáveis.

Há, ainda, o caso em que a segunda derivada do potencial é nula. Se isso ocorrer, a aproximação (??) não é adequada para  $x \rightarrow x'$ . Assim, devemos recorrer a termos de ordem superior da série de Taylor, como por exemplo o termo

$$\Delta V \approx \frac{1}{3!} \frac{d^3V}{dx^3} \Big|_{x=x'} (x - x')^3,$$

que é representado como exemplo pelo gráfico abaixo:

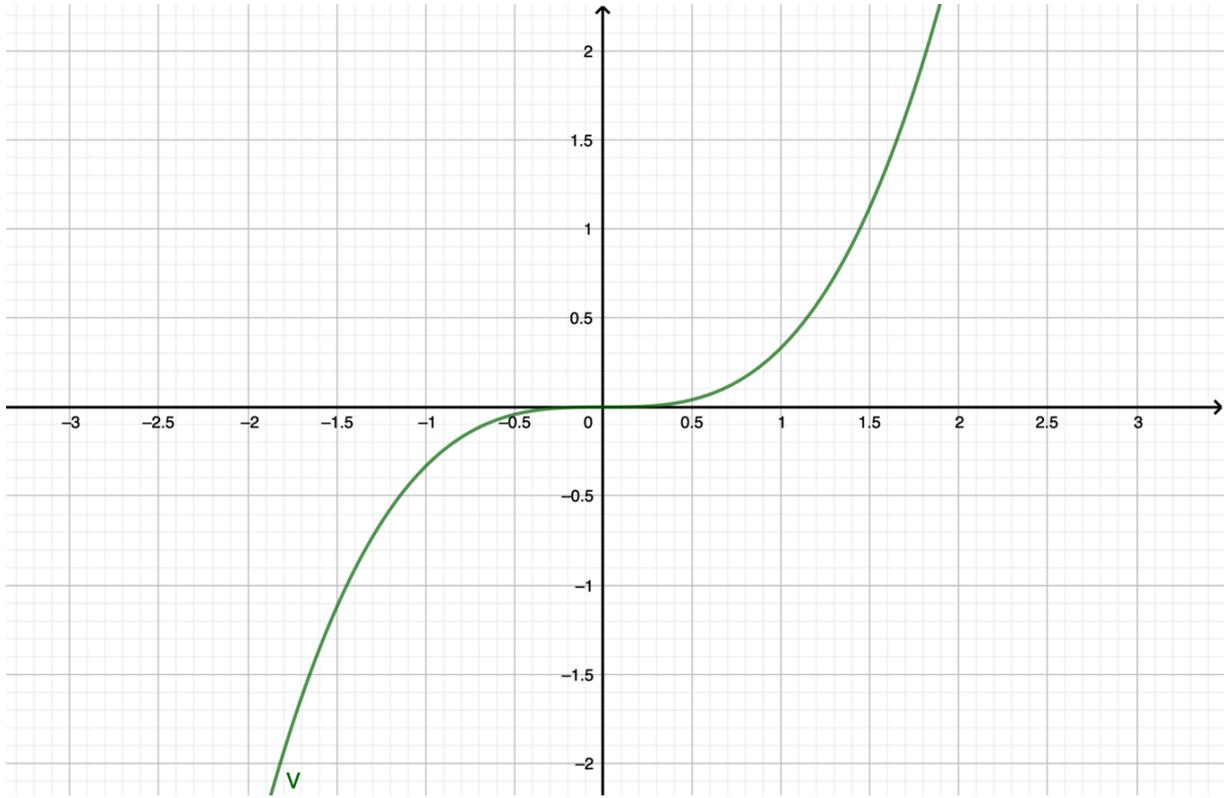


Figure 2: Gráfico da função  $x^3/3$ .

No gráfico 2, o ponto  $x = 0$  não é um ponto de máximo ou de mínimo. Mas é claramente um ponto de equilíbrio instável, visto que qualquer perturbação sobre a partícula vai resultar, eventualmente, em uma força de escape.

Caso a terceira derivada seja nula, devemos ir à quarta ordem de aproximação, e assim por diante. Se todas as derivadas ao redor de  $x = x'$  forem nulas, o potencial é constante e temos, por consequência, uma partícula livre. Uma partícula livre está sempre em equilíbrio.

## Pontos proibidos e pontos de retorno

A função potencial de um sistema também define regiões proibidas no domínio do sistema. São as regiões nas quais a energia cinética possui valores negativos no caso de problemas unidimensionais.

Podemos ver a proibição de funções horárias com energia cinética negativa mais facilmente na integral de quadratura

$$t - t_0 = \sqrt{\frac{m}{2}} \int_{x_0}^x \frac{dx'}{\sqrt{E - V(x')}}.$$

O denominador no argumento da integral contém uma raiz quadrada, que deve ser real e diferente de zero. Portanto, a condição

$$E - V(x) > 0$$

é condição necessária para a existência de curvas físicas que representem o movimento do sistema.

O caso do oscilador harmônico simples, mais uma vez, fornece um exemplo clássico. Na figura , apresentam-se linhas de energia constante, através das funções  $E_0 = 0$ ,  $E_1 = 1$  e  $E_2 = 4$ . Essas retas intersectam o potencial nos pontos  $x = 0$ ,  $x = \pm 2$  e  $x = \pm 4$  respectivamente. Esses pontos marcam as ocasiões nas quais a energia cinética é nula e  $E = V$ , caso limite da condição (??). Energia cinética nula implica em módulo da velocidade nula. Esses pontos são chamados **pontos de retorno** do potencial.

Vamos começar com o sistema descrito pelo gráfico ?? com  $E = E_0 = 0$ . Como a partícula é proibida de frequentar qualquer subconjunto do domínio em que  $E < V$ , o único ponto permitido é a posição  $x = 0$ , que é precisamente o mínimo do potencial. Este é o único ponto de equilíbrio, e é um ponto de equilíbrio estável, como já vimos. Portanto, a única configuração possível para um oscilador com energia zero é o repouso no ponto de equilíbrio. Não são permitidas energias negativas neste sistema, pois o zero é o menor valor possível para o potencial.

Podemos aumentar a energia do sistema empregando um impulso com certa velocidade inicial, para imprimir à partícula certa energia cinética. Como a energia mecânica total se conserva, esta energia é precisamente a energia cinética empregada no ponto  $x = 0$ . Vamos supor que, no caso do sistema do gráfico 1, esta energia seja  $E = E_1 = 1$ . Neste caso, os pontos proibidos serão todos aqueles à esquerda de  $x = -2$  e aqueles à direita de  $x = 2$ , ou seja, os pontos permitidos são aqueles  $x \in (-2, 2)$ . Com um pouco mais de impulso, podemos imprimir ao sistema uma energia maior, digamos  $E = E_2 = 4$ . Neste caso, o intervalo permitido é dado por  $x \in (-4, 4)$ . Em qualquer desses casos, se  $E > V_{min}$ , a partícula percorre sua trajetória em um intervalo de valores permitido pela limitação da sua energia cinética. Ao encontrar um ponto de retorno, a partícula atinge um ponto de velocidade nula e retoma o movimento em sentido contrário. Sempre que um sistema possui dois pontos de retorno fixos em sua trajetória, o movimento é denominado oscilatório.

Portanto, os pontos de retorno do oscilador harmônico simples são raízes da equação

$$E - V(x) = 0 \quad \implies \quad \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = E,$$

que resulta em

$$x^2 = \frac{2E}{m\omega^2} \quad \implies \quad x_{\pm} = \pm \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}.$$

Portanto, o potencial quadrático possui dois pontos de retorno, que denominamos  $x_{\pm}$ .

## O Potencial de Lennard-Jones

Um exemplo mais interessante vem a ser o [potencial de Lennard-Jones](#). Este é um potencial efetivo (falaremos disso mais adiante), o que significa que ele modela uma interação unidimensional em um sistema tridimensional. O sistema em questão é uma molécula diatômica neutra. Este potencial tem a forma

$$V(r) = \frac{\alpha}{r^{12}} - \frac{\beta}{r^6},$$

com constantes  $\alpha$  e  $\beta$  reais positivas. A coordenada  $r$  representa a distância de separação entre os núcleos dos átomos que formam a molécula. Uma molécula diatômica é um sistema em três dimensões, que possui seis graus de liberdade, o que pode ser um sistema bastante complicado. Contudo, a aproximação para um potencial do tipo Lennard-Jones é bastante utilizada. Um exemplo de gráfico deste potencial está na figura 3.

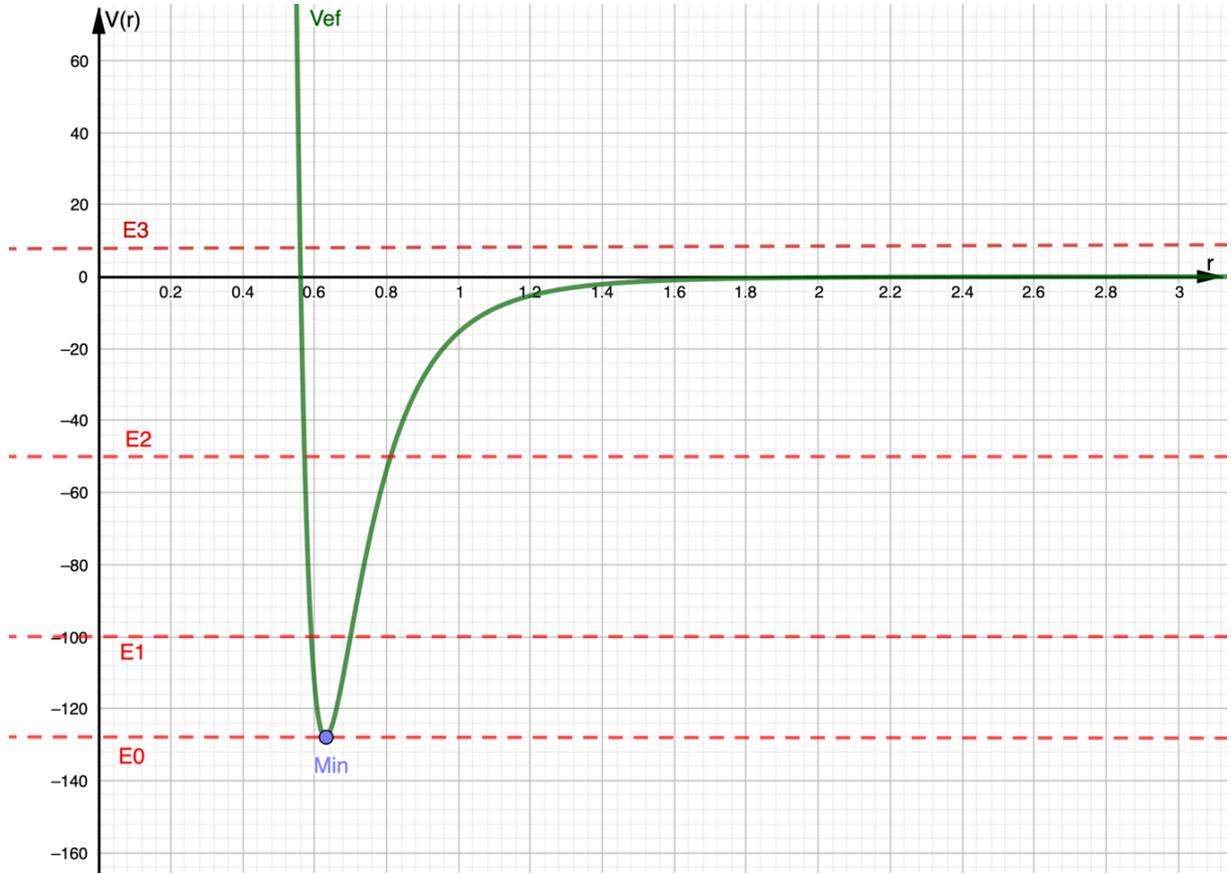


Figure 3: Gráfico do Potencial de Lennard-Jones.

No gráfico 3, vemos que o potencial de Lennard-Jones possui apenas um ponto de mínimo, de equilíbrio estável global, aproximadamente em  $r = 0,62$ . Também possui energia mínima em  $E = E_0 \approx -124$ , e para  $E_0 < E < 0$ , existem dois pontos de retorno. Para energias positivas, o potencial tem apenas um ponto de retorno.

Esses valores são calculados através do próprio potencial. No caso do ponto de equilíbrio, temos

$$\frac{dV}{dr} = -12\frac{\alpha}{r^{13}} + 6\frac{\beta}{r^7} = \frac{6}{r^7} \left[ \beta - 2\frac{\alpha}{r^6} \right],$$

que tem raízes definidas pela equação

$$\beta - 2\frac{\alpha}{r^6} = 0 \quad \Rightarrow \quad r_0 = \left[ \frac{2\alpha}{\beta} \right]^{1/6},$$

ou seja, apenas uma raiz positiva  $r_0$ .

A segunda derivada do potencial é dada por

$$\frac{d^2V}{dr^2} = 156\frac{\alpha}{r^{14}} - 42\frac{\beta}{r^8},$$

enquanto o valor da segunda derivada no ponto de equilíbrio vem a ser

$$\left. \frac{d^2V}{dr^2} \right|_{r=r_0} = 156 \cdot \alpha (r_0)^{-14} - 42 \cdot \beta (r_0)^{-8},$$

que resulta em

$$\left. \frac{d^2V}{dr^2} \right|_{r=r_0} = 36 (2\alpha)^{-4/3} \beta^{7/3},$$

que é positivo. Portanto, o ponto  $r_0$  de fato é um único ponto de equilíbrio estável. O valor do potencial neste ponto é dado por

$$V(r_0) = -\frac{\beta^2}{4\alpha},$$

que é também o valor da energia mínima do sistema. Portanto, neste sistema, a energia mecânica pode assumir valores negativos.

Vamos calcular os pontos de retorno do potencial de Lennard-Jones. Os pontos de retorno são raízes da equação  $E - V(r) = 0$ , ou seja,

$$\frac{\alpha}{r^{12}} - \frac{\beta}{r^6} = E.$$

Para  $E > 0$ , esta equação resulta em

$$r^{12} + r^6 \frac{\beta}{E} - \frac{\alpha}{E} = 0,$$

portanto,

$$r^6 = \frac{\beta}{2E} \left( \sqrt{1 + \frac{4\alpha E}{\beta^2}} - 1 \right).$$

A solução negativa implicaria em  $r^6$  negativo, o que não é uma solução aceitável. Finalmente, temos

$$r_- \equiv \sqrt{\left( \frac{\beta}{2E} \right)^{1/3} \left( \sqrt{1 + \frac{4\alpha E}{\beta^2}} - 1 \right)^{1/3}}.$$

Esta é uma única raiz positiva, portanto, um único ponto de retorno. Assim, para energias positivas, temos apenas um ponto de retorno, que é o ponto de maior aproximação entre os dois átomos. Na figura 3, este caso corresponde ao sistema com energia  $E_3$ , por exemplo.

Se a energia é negativa, temos a equação

$$r^{12} - r^6 \frac{\beta}{|E|} + \frac{\alpha}{|E|} = 0,$$

ou seja,

$$r^6 = \frac{1}{2} \frac{\beta}{|E|} \left( 1 \pm \sqrt{1 - \frac{4\alpha}{\beta^2} |E|} \right).$$

Desde que  $E > -\beta^2/4\alpha$ , resultado que já conhecemos, não teremos problemas com raízes imaginárias ou raízes negativas dessas soluções. Ainda, temos que

$$r_{\pm} \equiv \sqrt{\left( \frac{\beta}{2|E|} \right)^{1/3} \left( 1 \pm \sqrt{1 - \frac{4\alpha}{\beta^2} |E|} \right)^{1/3}}$$

são os pontos de retorno do sistema. Estes pontos estão ilustrados para o exemplo específico da figura 3, nas interseções entre as retas  $E_1$  e  $E_2$  com o potencial  $V$ .

Como  $r_{\pm}$  são pontos de retorno para  $E < 0$ , ainda que a dinâmica temporal seja muito complexa para ser calculada pela quadratura, sabemos que os átomos adquirem um movimento radial oscilatório entre  $r_-$  e  $r_+$  para cada valor possível de energia. Muitas vezes, como neste caso, o conhecimento dos pontos de retorno é mais significativo que o conhecimento da função horária em si.

Quando um sistema possui um regime de movimento oscilatório entre dois pontos de retorno, dizemos que o sistema se encontra em um **estado ligado**. No caso das moléculas diatômicas, os estados ligados são aqueles de energia negativa. Os estados de energia positiva são denominados estados de **espalhamento**, pois após alcançar a distância  $r_-$  em (??), os átomos entrarão em movimento de escape entre eles, até se tornarem partículas livres.

Um ponto limite para os estados de movimento é o de energia nula. Neste caso, temos também um único ponto de retorno, dado por

$$r_- = \left( \frac{\alpha}{\beta} \right)^{1/6} .$$

Veremos, que, no caso do átomo de hidrogênio, considerações similares podem ser feitas.