

Sistemas Incomensuráveis e a Equação de Seno-Gordon (I)

(Incommensurate Systems and the Sine-Gordon Equation (I))

E. M. do Nascimento, D. S. de Vasconcelos, J. F. M. Rocha e A. Ribeiro Filho

*Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia,
Campus Universitário de Ondina,
40210-340, Salvador, BA, Brazil.*

Trabalho recebido em 13 de maio de 1997

Vários estudos em torno da transição de fase Incomensurável-comensurável ("Lock-in"), em alguns sistemas incomensuráveis (a exemplo de metais de transição com ondas de densidade de carga [*CDW*] e outros) têm revelado importantes analogias com o problema do pêndulo matemático, identificando novas interpretações físicas e melhorando sensivelmente os resultados analíticos. Neste trabalho é discutido algumas dessas analogias.

Incommensurate - commensurate "Lock-in" phase transition has been studied by different authors (eg. charge density waves [*CDW*] in transition metals and others) and some important analogies with the mathematical pendulum problem can be showed as well new physical interpretations and a strong improving of the analytical results are obtained. In this work we discuss some of these analogies.

1 Introdução

Nos últimos anos uma série de compostos identificados como sistemas incomensuráveis têm despertado o interesse dos físicos e matemáticos, ligados aos problemas da Física da Matéria Condensada. A pesquisa experimental tem sido intensificada com a conseqüente descoberta de novos materiais possuidores das denominadas características de incomensurabilidade. Apesar disso muitas dificuldades ainda estão presentes no tratamento teórico de tais sistemas, em vista de limitações impostas por alguns modelos.

Dentre os diferentes modelos teóricos, destaca-se a teoria de transições de fase introduzida por Landau [1] em 1937, a qual, apesar de ser uma formulação de campo médio e que negligencia a contribuição de flutuações próximas à região crítica, tem sido bastante eficaz para descrever as diferentes propriedades de inúmeros ferroelétricos, cristais líquidos ferroelétricos esméticos e metais de transição com ondas de densidade de carga, conforme sumariaremos nas próximas seções deste trabalho.

A denominação incomensurável para tais sistemas

físicos é definida por alguns autores^{[2]-[5]} como caracterizadora de estrutura em que a razão, entre o espaçamento da rede da mesma em relação ao daquela não deformada em que o sistema se encontra à temperatura mais elevada (fase protótipa ou normal) não é comensurável e sim um número irracional. Pynn^[6] enfatiza que essa terminologia define a mencionada estrutura como não adequada, entretanto é importante não esquecermos que o citado nome pode ter sido inspirado na idéia de incomensurabilidade introduzida na antigüidade e que se tornou um marco importante no pensamento grego. São bem conhecidas as contribuições de diferentes pensadores, dentre os quais Aristóteles, assim como o fato de ter sido talvez os indianos os primeiros a se preocuparem com o assunto. Para a Grécia antiga foi importante e surpreendente a descoberta da necessidade de um número irracional para a resolução do problema geométrico do cálculo da diagonal do quadrado. No livro X de Euclides já é observado o impacto do problema da incomensurabilidade sobre a filosofia Pitagórica. Apesar de sua longevidade, o mencionado tema ainda per-

manece sendo um dos mais revisitados por muitos estudiosos de História e Filosofia da Ciência. Schenberg^[7] afirmava que "um acontecimento transcendental foi a descoberta das grandezas incomensuráveis atribuída a Pitágoras e representou uma profunda revolução do pensamento científico. Não só no pensamento científico como em toda a filosofia grega. Foi talvez a primeira grande revolução científica da história da humanidade". Maracchia^[8] e Knorr^[9], retomaram o estudo do citado problema, discutindo diferentes versões da prova da incomensurabilidade da diagonal e do lado do quadrado.

Apesar deste preâmbulo nosso objetivo no presente trabalho não é a discussão da incomensurabilidade e suas implicações filosóficas, mas sim enfatizarmos as analogias mecânicas que surgem nos resultados que envolvem o estudo analítico de transições de fase em alguns sistemas incomensuráveis, a exemplo de sistemas magnéticos e aqueles já citados previamente.

Outro aspecto envolvendo o estudo de tais materiais incomensuráveis e que desperta enorme interesse àqueles ligados ao ensino de Física fundamental é o fato que nesses sistemas físicos a decantada periodicidade translacional da rede cristalina tridimensional é quebrada, apesar de tais sistemas apresentarem uma ordenação de longo alcance. Tal característica viola uma das mais importantes suposições da teoria da Física da Matéria Condensada. O fato de os sistemas incomensuráveis permanecerem intermediários entre os cristais periódicos clássicos e aqueles sistemas biológicos não periódicos, tem induzido à crença que o estudo dos mesmos, além da descoberta qualitativa de novos fenômenos físicos, poderá conduzir a um substancial avanço no entendimento dos materiais não periódicos e talvez mesmo da matéria viva^[10].

Nas seções seguintes revisaremos o problema do pêndulo matemático a partir de o seno de Jacobi^[2]; a teoria de transições de fase de Landau^[3] e na seção 4 discutiremos as descomensurações de McMillan (ou solitons de fase do parâmetro de ordem). Finalmente, na seção 5, apresentaremos um sumário e as conclusões envolvendo o caso de metais de transição dicalcogenados, que se apresentam com ondas de densidade de carga, e as analogias com o sistema pendular.

2 O Seno de Jacobi

O problema do pêndulo matemático pode ter como ponto de partida o cálculo da denominada função Seno de Jacobi, a qual é um caso particular de uma outra

função "senoidal" generalizada $s(u)$ que, por definição, é a inversa da integral do tipo

$$u = \int_0^y dz (1 - pz^2 + qz^4)^{-1/2} \quad (1)$$

e que para certos valores definidos dos pares de coeficientes (p, q) do polinômio no integrando acima é possível atingir-se as conhecidas funções "senoidais" trigonométricas para os casos: circular : $(-1, 0)$; hiperbólico: $(1, 0)$; lemniscático: $(0, -1)$; e o elíptico, onde o citado seno de Jacobi é obtido a partir de os valores : $(-1 - k^2, k^2)$ e onde $0 < k < 1$. Uma contribuição marcante para o desenvolvimento desta área da Matemática foi dada pelo jovem Gauss que, no seu diário [final do século XVIII], deixou também pontificado a necessidade da utilização nesses problemas da teoria de variáveis complexas.

A história em torno de o surgimento das funções elípticas jacobianas ($sn, cn, dn, ns, nc, nd, sc, sd, cd, cs, ds, dc$) tem sido recontada por diferentes autores^{[11]–[13]} em vista de sua importância para o desenvolvimento da Análise Matemática e, também, pelas inúmeras aplicações de tais funções aos cálculos envolvendo os sistemas dinâmicos não lineares.

No caso jacobiano $(1 + pz^2 + qz^4)$ tem a forma para $s(u)$ igual a $(1 - z^2)(1 - k^2z^2)$ e a correspondente função elíptica de Jacobi, de módulo k , é denominada de seno de amplitude, sendo denotada por $sn(u, k) = snu = sn(u, m)$, onde $m = k^2$ ^[14]. Esta função é então a inversa da integral,

$$u = \int_0^y dz [(1 - z^2)(1 - k^2z^2)]^{-1/2}, \text{ com } 0 < k < 1 \quad (2)$$

As funções de Jacobi, para variáveis reais, podem ser obtidas a partir da equação 1 e, no caso particular da "sn" pode-se observar que ela cresce monotonicamente de 0 a 1 quando u evolui de 0 a $K(k)$, a denominada integral elíptica completa de primeira espécie, cuja definição pode ser dada por

$$\begin{aligned} K(k) &= \int_0^1 dx [(1 - x^2)(1 - k^2x^2)]^{-1/2} \\ &= \int_0^{\pi/2} d\phi (1 - k^2 \sin^2 \phi)^{-1/2} \end{aligned} \quad (3)$$

No problema do pêndulo tem-se um corpo de massa M , suspenso a um fio fino de comprimento L , que realiza oscilações no plano vertical. A partir da posição de equilíbrio se pode definir um ângulo inicial θ_0 e estudar-se diferentes características deste sistema, dentre as quais a solução de sua equação básica, também chamada de equação de seno-Gordon, cuja solução pode ser escrita no caso geral em termos das funções de Jacobi sn ou sd .

Para o mencionado sistema pendular é possível explicitar a função Hamiltoniana

$$H = \frac{1}{2}p^2 L^{-2} - g.L.\cos\theta \quad (4)$$

sendo p o momento linear e g a aceleração da gravidade. A partir do par de equações canônicas de movimento de Hamilton envolvendo a equação 4 obtém-se a mencionada equação do pêndulo ou equação de seno-Gordon estática,

$$\ddot{\theta} + \Lambda^2 \cdot \sin\theta = 0 \quad (5)$$

com $\Lambda^2 = g/L$ e cuja primeira integral é dada por

$$\frac{1}{2}(\dot{\theta})^2 - \Lambda^2 \cdot \cos\theta = E \quad (6)$$

onde E é uma constante de integração, θ é o deslocamento angular do pêndulo de sua posição de equilíbrio ($\theta = 0$). Na Figura 1 esboçamos o retrato de fase do sistema pendular. A partir da equação 6 pode-se definir

$$dt = (g/L)^{-1/2} d\phi (1 - k^2 \sin^2 \phi)^{-1/2} \quad (7)$$

em que escrevemos $E = -(g/L)\cos\Psi$, considerando $\theta = \Psi$ como sendo o deslocamento máximo do pêndulo de sua posição de equilíbrio. Igualmente, para facilitar os cálculos usamos a transformação $\cos\theta = 1 - 2k^2 \sin^2 \phi$, com $k = \sin \frac{1}{2}\Psi$. A partir da equação 7 vê-se que o tempo requerido para o sistema vibrar desde $\theta = 0$ a $\theta = \theta_0$ é

$$t = (g/L)^{-1/2} \int_0^{\phi_0} d\phi (1 - k^2 \sin^2 \phi)^{-1/2} \quad (8)$$

onde $\phi_0 = \sin^{-1}(k^{-1} \sin^{1/2} \theta_0)$ e o período pendular pode ser escrito em termos de k , como

$$T(k) = 4(g/L)^{-1/2} K(k) \quad (9)$$

que no limite de $k = 0 \rightarrow (K(k) = \pi/2)$, o período torna-se independente da energia, correspondendo ao caso senoidal circular referente às pequenas amplitudes,

ou seja a equação 9 se transforma em $T = 2\pi(g/L)^{-1/2}$ que, na analogia com os problemas que discutiremos em torno de sistemas incommensuráveis, corresponderá à aproximação de onda plana incommensurável. A Figura (2) apresenta a variação do período do pêndulo matemático em função do módulo elíptico k . No outro limite $k = 1 \rightarrow K(k) \rightarrow \infty$, para $\Psi = \pi$ que corresponderá ao regime monosolitonico no caso do mencionado problema das ondas de densidade de carga.

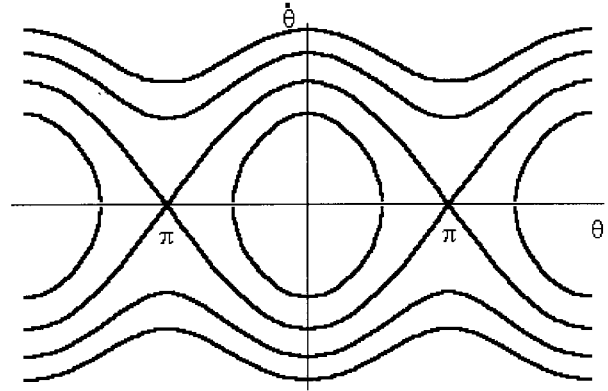


Fig. 1 - Retrato de fase do pêndulo matemático

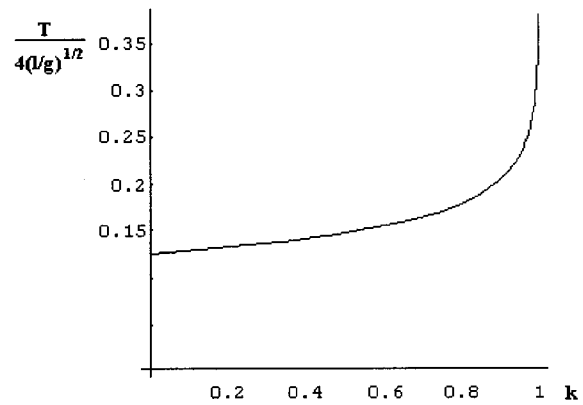


Fig. 2 - Variação do período do pêndulo matemático em função do módulo elíptico k

A solução da equação 5 nos dá o deslocamento angular $\theta(t)$ e é obtida a partir da integração da equação 6, onde definimos $u = t.(g/L)^{1/2}$ implicando que

$$\sin(u|k) = \sin\phi = k^{-1} \sin \frac{1}{2}\theta \quad (10)$$

e, em consequência,

$$\theta = 2 \sin^{-1}[k \cdot \sin(u|k)]. \quad (11)$$

A Figura (3) mostra a função $\sin(u)$, para $k = (0.0, 0.9$ e $1.0)$; enquanto a Figura (4) esboça a solução numérica

do pêndulo matemático para valores de velocidade inicial $v_o = 8.9, 9.0$ e 12.0 (SI).

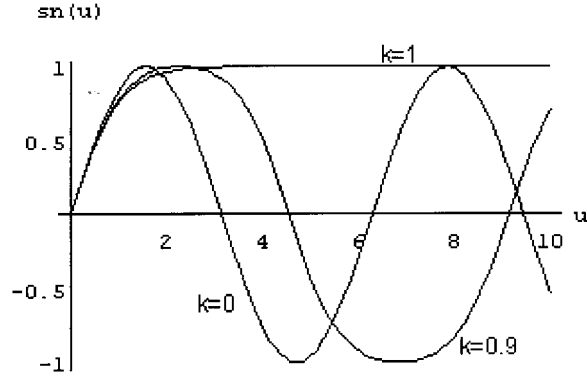


Fig. 3 - Função elíptica jacobiana $sn(u)$ para $k=(0.0, 0.9$ e $1.0)$

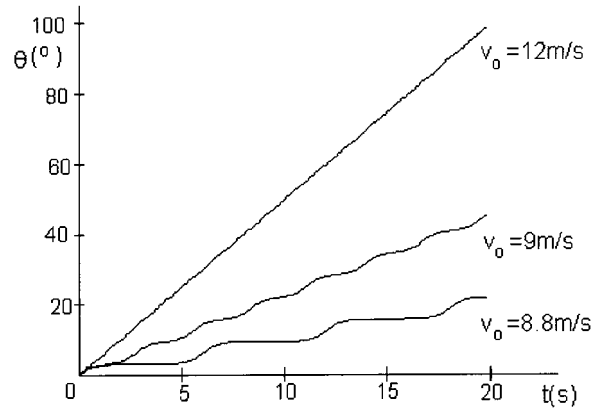


Fig. 4 - Solução numérica do pêndulo para $v_o=(8.9, 9.0$ e $12.0)$ (SI)

3 Teoria de Landau

Os problemas envolvendo o estudo das transições de fase [TF] em sistemas incomensuráveis são encontrados em diferentes intervalos de temperatura. A caracterização de uma dada TF (de primeira ordem ou "descontínua" e de segunda ordem ou "contínua") pode ser obtida através de considerações termodinâmicas básicas, a partir da definição de um potencial termodinâmico e de suas derivadas na transição. Na teoria de Landau^[15] o critério para se estudar a ordem de uma TF é dado através da definição de uma densidade de energia livre em potências de um parâmetro de ordem, onde argumentos envolvendo a simetria do sistema limitam os termos permitidos na citada expansão. No formalismo de Teoria de Campos o parâmetro de ordem escolhido é um campo e um desenvolvimento paralelo, e mais rigoroso, pode ser obtido para tais estudos, conforme enfatizaremos posteriormente. Na presente

discussão nos limitaremos à apresentação, mais usual, de um potencial termodinâmico F , em termos de um parâmetro de ordem complexo cuja amplitude é A e fase ϕ , correspondente à deformação da rede periódica que ocorre abaixo de alguma temperatura crítica T_i , de tal maneira que nas TF incomensuráveis existem deslocamentos atômicos fortemente anarmônicos descritos através de termos "Umklapp" de ordem " p " na mencionada expansão, $\Delta F = F - F_0$:

$$\Delta F = 1/2aA^2 + bA^4 + VA^p \cos p\phi \quad (12)$$

com a e b sendo parâmetros e onde somente o primeiro, por hipótese, é definido como dependente da temperatura, isto é, $a = a'(T - T_0)$, sendo a' uma constante e T_0 uma temperatura crítica. F_0 é a energia livre de "background" independente de A e ϕ e que não tem influência na discussão do problema.

No caso em que somente exista deformação senoidal em uma única direção x , ou seja, $u = u_0 \sin[qx + \phi(x)]$, a amplitude do deslocamento atômico $u = u_0 \sin qx$ é uma onda comensurável com a rede não deformada. A fase $\phi(x)$ é o "shift" dos átomos em relação ao potencial mínimo - a denominada energia potencial "lock-in"^[16]. No caso em que $V = 0$, a deformação ondulatória incomensurável não perturbada é linear em x , ou seja, $\phi(x) = \delta x$, e permanece em regime de Onda Plana Incomensurável onde δ é o deslocamento ("misfit" ou "mismatch") entre os espaçamentos atômicos nas sub-redes comensurável e incomensurável. Se existe contribuição da energia potencial "lock-in" ($V \neq 0$) então haverá variações locais na fase $\phi(x)$ em um arranjo de descomensurações (ou solitons de fase) de acordo com o clássico trabalho de McMillan^[17].

A configuração no estado fundamental que minimiza a energia livre dada por 12 é encontrada entre as soluções da equação de seno-Gordon estática unidimensional de modos normais acoplados

$$\frac{d^2 \phi_p}{dx^2} - p^2 V \sin \phi_p = 0 \quad (13)$$

que é semelhante à equação 5 quando fazemos as transformações $t \rightarrow x$, $\theta \rightarrow \phi_p = p\phi$ e $\Lambda^2 \rightarrow -p^2 V$. As soluções da equação 13 têm a forma de um pacote de ondas solitárias ou "solitons" que descreve uma rápida variação de fase sobre uma região estreita, que na terminologia de McMillan é a descomensuração (ou "domain wall") que separa duas regiões do domínio comensurável. Para o caso assintótico ($k \rightarrow 1$) de um único

soliton (regime monosolitônico), a equação 13 tem como solução,

$$\phi(x) = 4p^{-1} \tan^{-1}[\exp(p \cdot V^{1/2} x)] \quad (14)$$

também denominada de "kink". Na Figura 5 temos a super-rede solitônica para um sistema incomensurável com parâmetros $p = 4$ e $V = 1$. A Figura 6 apresenta o denominado regime monosolitônico para um sistema incomensurável com $p = 4$ e $V = 1$

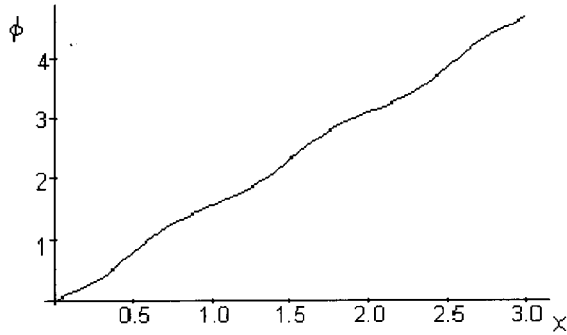


Fig. 5 - Super-rede solitônica para sistema incomensurável com parâmetros $p=4$ e $V=1$

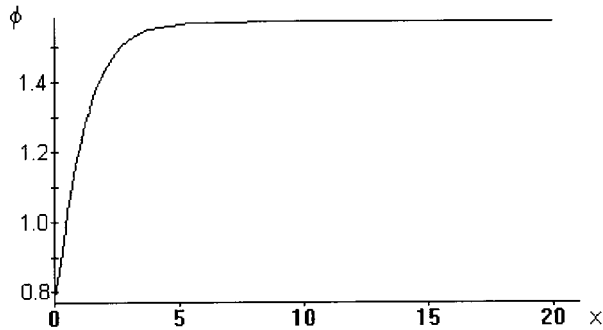


Fig. 6 - Regime monosolitônico para sistema incomensurável com $p=4$ e $V=1$

4 Descomensurações de McMillan

A onda de densidade de carga (*CDW*) é definida como uma modulação da carga eletrônica, em um material, com um período que pode ter ou não qualquer relação simples com a periodicidade da rede. Peierls^[18] foi quem primeiro sugeriu que um metal unidimensional é instável para formação de uma distorção da rede periódica associada com uma modulação periódica espacialmente da densidade de carga eletrônica (*CDW*).

De acordo com este autor o vetor de onda \vec{Q} da *CDW* é igual a $2 \vec{k}_F$ (vetor de onda de Fermi) e, em consequência, a formação de uma *CDW* abre um "gap" no nível de Fermi, abaixando a energia cinética dos elétrons de condução.

McMillan, em 1976, identificou uma das mais importantes características dos sistemas incomensuráveis ao introduzir a noção de descomensuração, que é um defeito topológico, do tipo solitônico, da fase da onda de densidade de carga incomensurável, próximo à TF "lock-in" (incomensurável-comensurável). Para estudar as ondas de densidade de carga (*CDW*) que se apresentam em diferentes metais de transição dicalcogenados (ex. $2H - TaSe_2$), este autor introduziu uma nova expansão de energia livre (tipo Ginzburg-Landau), que apresenta algumas similaridades com a de outros autores^{[19]–[20]}, onde o parâmetro de ordem natural era a densidade de carga eletrônica da banda de condução relativo ao estado não distorcido, embora a distorção da rede periódica possa também ser escolhida como tal parâmetro.

A expansão acima mencionada é escrita em termos de parâmetros complexos $\Psi_j(\vec{r})$ relacionados com as três componentes da *CDW* presentes nos mencionados metais de transição. Eles são introduzidos a partir da expressão da densidade de carga eletrônica

$$\rho(\vec{r}) = \rho_0(\vec{r})[1 + \alpha(\vec{r})] \quad (15)$$

onde α_0 é a densidade de elétrons (não perturbada) de condução do estado normal e

$$\alpha(\vec{r}) = \text{Re} \sum_j \Psi_j(\vec{r}) \quad (16)$$

Uma outra expansão de energia livre, mais abrangente, para esses materiais, foi introduzida por Jacobs e Walker^[22], entretanto há um grande interesse histórico no trabalho numérico de McMillan que, além de ser mais simples, foi a partir do mesmo que surgiu o conceito de descomensuração. Ele considerou o caso ideal de uma única componente da *CDW*, ou seja uma modulação periódica da carga eletrônica, com um período que pode ter ou não uma relação comensurável com o período da rede original. Em síntese, McMillan ao realizar o seu estudo numérico em torno da transição "lock-in", no metal de transição $2H - TaSe_2$, ele introduziu a *ansatz* de que somente a fase do parâmetro de ordem apresentava variação com o espaçamento da rede do cristal, permanecendo constante sua amplitude. Bak

e Emery, em 1976, estudando o mesmo problema obtiveram a solução analítica e verificaram que a condição de extremo do funcional de energia livre do sistema conduzia a uma equação diferencial não linear conhecida como a equação de seno-Gordon estática (ou equação do pêndulo). A solução de McMillan e dos demais autores mostraram que próximo à transição de fase "lock-in", o estado mais estável da fase incomensurável é descrito por uma sequência de domínios comensuráveis, separados por paredes de domínios relativamente bem definidas, denominadas por ele de descomensurações (que são, matematicamente, solitons de fase).

Moncton et al^[23] detetaram os aspectos fenomenológicos de tais defeitos topológicos, no mesmo composto, sob a forma de distorções da *CDW* incomensurável próximo à citada TF. A hipótese de McMillan foi confirmada, experimentalmente, por Suits et al^[24] que usaram a técnica de ressonância magnética nuclear. Na literatura recente tal *ansatz* tem sido denominada de aproximação de amplitude constante (ou limite de acoplamento fraco ou aproximação solitônica) e para ilustrá-la pode-se escrever para o citado sistema o potencial termodinâmico de energia livre ,

$$\Delta F = \int dx^2 [A_1(\nabla\phi - 1)^2 + A_2(1 - \cos 3\phi)] \quad (17)$$

onde a condição de extremo implica na equação,

$$\frac{d^2\phi_3}{dx^2} - \Lambda^2 \sin\phi_3 = 0, \quad (18)$$

sendo $\phi_3 = 3\phi$ e $\Lambda^2 = \frac{1}{2}9A_2A_1^{-1}$, que equivale à equação do pêndulo 5 quando utiliza-se a transformação: $t \rightarrow x$ e $\theta \rightarrow \phi_3$. Na equação 17, A_1 e A_2 são parâmetros fenomenológicos, enquanto ϕ é a fase do parâmetro de ordem.

5 Sumário e Conclusões

A equação de seno-Gordon estática é um caso particular da equação de Klein-Gordon não linear, que apresenta na sua expressão um termo de derivada parcial de segunda ordem no tempo, ou seja,

$$\phi_{xx} - \phi_{tt} - \sin\phi = 0 \quad (19)$$

Esta equação é também conhecida por equação de seno-Gordon dependente do tempo e que, por apresentar soluções tipo ondas solitárias (em particular solitons) tem despertado um contínuo interesse entre os físicos.

Apesar de tal característica ter sido observada no início dos anos cinquenta, entretanto, é relevante lembrar que esta equação foi de fato introduzida com outra denominação em 1875 na Geometria Diferencial^[25], no estudo sobre transformações de superfícies com curvatura gaussiana constante $K = -1$ em R^3 . A equação 19 na sua forma canônica é escrita como

$$\phi_{uv} - \sin\phi = 0 \quad (20)$$

quando se utiliza a transformação $u = \frac{1}{2}(x + t)$ e $v = \frac{1}{2}(x - t)$.

Nas seções iniciais deste trabalho, discutimos as analogias existentes nos cálculos envolvendo o problema do pêndulo matemático e aquele das transições de fase "lock-in" (usando o modelo fenomenológico de Landau), em um sistema metálico incomensurável com uma onda de densidade de carga, quando é utilizada a aproximação de amplitude constante do parâmetro de ordem. Vimos que em ambos os sistemas a equação básica é a equação de seno-Gordon estática, que no caso dos sistemas incomensuráveis citados ganha uma nova interpretação, visto que as suas possíveis soluções indicam, matematicamente, a presença de um arranjo multisolitônico, significando que próximo à transição de fase "lock-in" (incomensurável-comensurável) a fase do parâmetro de ordem consiste de largos domínios quase comensuráveis separados por paredes de domínios estreitas (solitons) onde a fase varia rapidamente. Esta transição, decorrente da super-rede solitônica, é o resultado da competição entre a energia de interação com a rede do substrato (termo "Umklapp" local), que favorece a ordenação comensurável, e o termo de energia elástica (quadrático na amplitude), que favorece à fase incomensurável, contidos na expressão do potencial termodinâmico, conforme a equação 12.

Apesar de toda esta discussão se basear na hipótese de McMillan (1976), entretanto a confirmação experimental da existência de descomensurações (solitons de fase) nesses sistemas, tornou o cálculo das mesmas necessário para a caracterização de tais sistemas físicos. É importante observarmos que a expressão do período pendular em termos da integral elíptica completa de primeira espécie (equação 9) apresenta similaridades com aquela que calcula a distância intersolitônica para o caso dos sistemas incomensuráveis citados, ou seja, nesta analogia o período do pêndulo é substituído por uma expressão matemática que tem, também, uma dependência funcional com $K(k)$ e que calcula a distância

entre dois solitons adjacentes. Isto é melhor visualizado nos limites em que o módulo da integral elíptica, $K(k)$, tem valores zero ou um. No primeiro ($k = 0$) correspondendo no pêndulo ao caso de pequenas amplitudes, implica que no citado sistema incomensurável o mesmo se encontra no denominado regime de onda plana incomensurável, ou seja, o deslocamento angular do pêndulo varia senoidalmente com o tempo, enquanto a fase do parâmetro de ordem do sistema incomensurável varia linearmente com o espaçamento na rede do cristal. No outro limite ($k = 1$) para o caso do pêndulo tem-se um período que cresce indefinidamente, enquanto no sistema incomensurável a fase do parâmetro de ordem atinge o regime monosolitônico (solução tipo "kink"). No intervalo $0 < k < 1$ temos o arranjo multisolitônico para a fase do parâmetro de ordem no caso incomensurável (e algo similar para o deslocamento angular do pêndulo) indicando que à medida que a temperatura do sistema vai diminuindo a distância intersolitônica vai aumentando (até atingir a temperatura crítica "lock-in"), com a subsequente diminuição do número de solitons por unidade de comprimento, indicando que a densidade solitônica serve como um possível parâmetro de ordem para o sistema físico em estudo. Na figura 1, representamos o retrato de fase do pêndulo matemático obtido a partir da equação 6. Na figura seguinte obtivemos a variação do período pendular para diferentes amplitudes usando a equação geral (9) em termos do módulo k das integrais elípticas, onde $k = 0$ reproduz o resultado clássico para pequenas amplitudes e $k = 1$ indica um limite assintótico, que na analogia com as ondas de densidade de carga representa o citado limite monosolitônico que coincide com a temperatura crítica (T_c) entre as fases incomensurável e comensurável. A figura 3 ilustra o comportamento da função elíptica jacobiana $sn(u|k)$ para valores diferentes de k , enquanto a figura 4 apresenta o comportamento da solução pendular quando estipulamos valores diferentes para a velocidade inicial v_0 . Observa-se um comportamento similar àquele dos arranjos multisolitônicos nos sistemas incomensuráveis e, em particular, no caso das *CDW* onde as descomensurações (solitons de fase do parâmetro de ordem) apresentam-se para diferentes temperaturas, num quadro semelhante em que à medida que a temperatura vai diminuindo e se aproximando da mencionada T_c , o arranjo das descomensurações varia desde uma situação quase retilínea (onde a distância intersolitônica é pequena), até o caso monosolitônico (onde a distância in-

tersolitônica cresce indefinidamente). As figuras 5 e 6, respectivamente, representam tal situação para os citados sistemas. No caso do sistema incomensurável com *CDW* e $p = 3$ (ex: $2H - TaSe_2$) a variação de temperatura contribui para o comportamento da fase do parâmetro de ordem em termos da distância na rede, mostrando resultados similares. Para a obtenção das figuras citadas foram efetuados cálculos de integrais elípticas e de funções elípticas jacobianas utilizando-se "softwares" matemáticos e de simulação, a partir dos textos citados na bibliografia^{[11]–[14]}. Outras aplicações de tais analogias com o problema do pêndulo a diferentes sistemas incomensuráveis serão discutidas na parte II deste trabalho.

Agradecimentos

A. Ribeiro Filho agradece Ao CNPq e à CAPES o apoio a este projeto através de bolsa junto ao CDI-Programa Suplementar de Apoio à Qualificação Docente.

References

- [1] L. D. Landau, *Physik Z. Sowjetunion*, **11**, 26, (1937).
- [2] A. D. Bruce, *Adv. Phys.*, **29**, 111 (1980).
- [3] R. A. Cowley, *Adv. Phys.*, **29**, 1 (1980).
- [4] A. D. Bruce and R. A. Cowley, *Adv. Phys.*, **29**, 219 (1980); *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **11**, 3609 (1978).
- [5] A. D. Bruce, R. A. Cowley and A. F. Murray, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **11**, 3591 (1978).
- [6] R. Pynn, *Nature*, **281**, 433 (1979).
- [7] M. Schenberg, *Pensando a Física*, Nova Stella Editorial, 148 pp, (1988).
- [8] S. Maracchia, *Arch. for Hist. of Exact Sciences*, **21**, 201 (1980).
- [9] W. Knorr, *Arch. for Hist. of Exact Sciences*, **24**, 1, 1, (1981); **27**, 4, 391 (1982).
- [10] R. Blink, *Phys. Rept.*, **79**, 5, 331 (1981).
- [11] A. Ribeiro Filho e D. S. de Vasconcelos, *Introdução ao Cálculo das Funções Elípticas Jacobianas*, EDUFBA, 88pp, (1994).
- [12] G. Mittag-Leffler, *Ann. of Math.*, **24**, 271 (1923).
- [13] E. Almkvist and B. Berndt, *Amer. Math. Monthly*, 585-608, (1988).
- [14] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook*, Dover Inc. (1972).
- [15] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Statistical Physics*, Pergamon Press, (1962).
- [16] R. F. Willis, *Long - and Short Range Order Fluctuations in the H/W(100) System*, Springer, (1989).

- [17] W. L. McMillan, Phys. Rev. **B14**, 1496, (1976).
- [18] R. Peierls, *Quantum Theory of Solids*, Oxford Press, 1955; G. Grüner and A. Zentl, Phys. Rpt., **119**, 3, 117, 232 (1985); H. Frölich, Proc. Roy. Soc., **A223**, 29 (1954).
- [19] F. C. Frank and J. H. Van der Merwe, Proc. Roy. Soc., **A198**, 216 (1949).
- [20] M. Luban, D. Mukamel and S. Shtrikman, Phys. Rev. **A10**, 360 (1976).
- [21] P. Bak and V. J. Emery, Phys. Rev. Lett., **36**, 978 (1976).
- [22] A. E. Jacobs and M. B. Walker, Phys. Rev., **B21**, 9, 4132 (1980).
- [23] D. E. Moncton, J. D. Axe and F. J. Di Salvo, Phys. Rev., **B16**, 801 (1977).
- [24] B. H. Suits, S. Conturie and C. P. Slichter, Phys. Rev. Lett., **45**, 3, 194 (1980).
- [25] H. H. Torriani, *Espalhamento Inverso e Métodos de Hirota: Alguns Aspectos Clássicos*, IMEUSP, 118pp, (1985).