



## **ESTADOS RESSONANTES EM BILHARES QUÂNTICOS TRIANGULARES**

Hudson Loch Haskel (Iniciação Científica Voluntária -UNICENTRO),  
Eduardo Vicentini (Orientador), e-mail: [evicentini@unicentro.br](mailto:evicentini@unicentro.br).

Universidade Estadual do Centro-Oeste/Departamento de  
Física/Guarapuava, PR.

**Setor de Ciências Exatas e da Terra/ Física.**

**Palavras-chave:** autovalores de energia, bilhares quânticos, método de contorno nas paredes.

### **Resumo:**

No estudo de bilhares quânticos determina-se os autovalores e autofunções da Eq. de Schrödinger para uma partícula livre com condições de contorno na forma de barreiras de potencial. O problema interno consiste em obter o espectro energético e os autoestados associados. Para isto existem vários métodos. Os mais utilizados são os métodos de decomposição de ondas planas. Neste trabalho, utilizamos principalmente o método contorno nas paredes, que fornece soluções para ambos os lados interno e externo ao bilhar. Adaptamos um programa computacional para bilhares triangulares, e elaboramos um mecanismo para examinar sua precisão e exatidão dos autovalores de energia. Foi também desenvolvido um estudo analítico do Método de Heller, mas sua aplicação não se mostrou satisfatória para o sistema em estudo.

### **Introdução**

Bilhares são sistemas bidimensionais que são descritos pela interação entre uma partícula puntual e as fronteiras (paredes) do sistema. Na sua versão quântica, a partícula pode ser considerada um elétron e as paredes podem ser representadas por barreiras de potencial, sendo a solução do problema a determinação dos autovalores e autofunções da Eq. de Schrödinger para uma partícula livre acrescida das condições de contorno [1-3]. O problema pode ser dividido em interno e externo ao bilhar. O problema interno consiste em obter o espectro energético e os autoestados associados (estados ressonantes) e o problema externo, os estados de espalhamento [2].

Diferentes métodos são utilizados para o estudo de bilhares quânticos [1], mas concentramos nossos estudos nos métodos de decomposições de ondas planas [3-5] e no método de contorno de paredes [1,2].

### **Materiais e métodos**

Estudamos bilhares triangulares e em especial o triângulo (90°, 45°, 45°), com lados (1, 1,  $\sqrt{2}$ ) e área  $A = \frac{1}{2}$ .

Para o estudo do problema interno ao bilhar, deve-se resolver a Eq. de Schroedinger do problema dada por:

$$-\frac{\partial^2 \psi(x, y)}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 \psi(x, y)}{\partial y^2} = k^2 \psi(x, y)$$

onde  $k$  representa os autovalores do sistema e está relacionado à energia  $E$  (espectro energético) do sistema pela relação:

$$k = \frac{\sqrt{2ME}}{\hbar}$$

sendo  $M$  a massa do elétron,  $\hbar$  a constante de Plank. Para o triângulo em questão, o problema pode ser resolvido por decomposição simples de ondas planas [3], fornecendo o resultado exato:

$$k = \pi \sqrt{m^2 + n^2}, \text{ com } 0 < m < n \text{ inteiros.}$$

Pelo seu resultado analítico exato, este bilhar foi utilizado como referência para outros métodos.

O método de Heller [5] também se utiliza de uma decomposição de ondas planas, mas com a limitação que para bilhares que apresentam quinas, como polígonos, por exemplo, o método pode exigir outros estados na solução, além das ondas planas, conhecidos como estados evanescentes. Para aplicação do método de Heller utiliza-se uma base que trabalha com superposição de ondas planas, todas com o mesmo número de onda mas diferentes direções de propagação.

Uma solução para este problema é dada por:

$$\psi_k(x, y) = \sum_{l=1}^M a_l \sin(k_x^{(l)} x) \sin(k_y^{(l)} y) \quad (1)$$

onde os autovalores de energia  $k$  são dados por:

$$k^2 = k_x^{(l)2} + k_y^{(l)2} \quad (2)$$

O propósito do método é encontrar uma combinação de coeficientes  $a_l$  que tenha valores nulos nas fronteiras do bilhar, mas como isso não é possível, normaliza-se a função de onda e determina-se o parâmetro chamado tensão de Heller, que visa minimizar esses coeficientes. Este parâmetro é dado por:

$$\sigma^2(k) = \sum_{i=1}^{8M} [\psi_k(x_i, y_i)]^2 \quad (3)$$

onde os pontos  $(x_i, y_i)$  são pontos sobre a fronteira do sistema.

O método de contorno de paredes utiliza a equação de Lippmann-Schwinger:

$$\psi(r) = \phi(r; k) + \int_c ds \gamma(s) G_0(r, r(s); k) \psi(r(s))$$

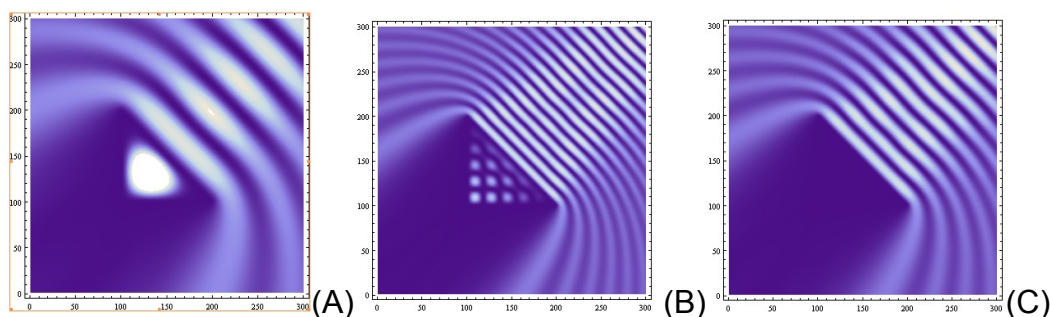
Este método define as paredes utilizando potenciais na forma delta de Dirac, e utiliza as condições de contorno de Dirichlet. Distribui-se uniformemente os pontos sobre as paredes do bilhar e calcula-se a interação destes com os demais pontos, fora e dentro das paredes. O método fornece os estados

internos e externos ao bilhar, mas apenas para os estados ressonantes a função de onda tem valores não nulos dentro do bilhar.

Para a utilização do método de contorno de paredes utilizou-se de métodos numéricos e programa computacional já desenvolvido foi adaptado para o bilhar triangular.

## Resultados e Discussão

Utilizando o método de contorno de paredes, foi possível determinar os estados internos e externos ao bilhar triangular. A Fig. 1 mostra a função densidade de probabilidade fora do bilhar e os estados ressonantes internos (Fig1-A e B), quando existem. Quando os estados ressonantes não existem a função de onda é nula dentro do bilhar (Fig. 1-C).



**Figura 1**– Função densidade de probabilidade para o bilhar triangular, com suas representações interna e externa ao bilhar, para os vetores de onda  $k = 7.26$  (A),  $24.536$  (B) e  $16.019$  (C). Nas figuras A e B aparecem os estados ressonantes característicos da solução interna. A figura C mostra que para o  $k$  escolhido não existe solução interna.

A fim de verificar a eficácia do método, determinamos os autovalores de vários estados ressonantes e comparamos com os resultados exatos, obtidos para o triângulo  $(90^\circ, 45^\circ, 45^\circ)$ . Calculamos os primeiros 65 autovalores de energia para o bilhar triangular, sendo que alguns deles estão mostrados na tabela abaixo:

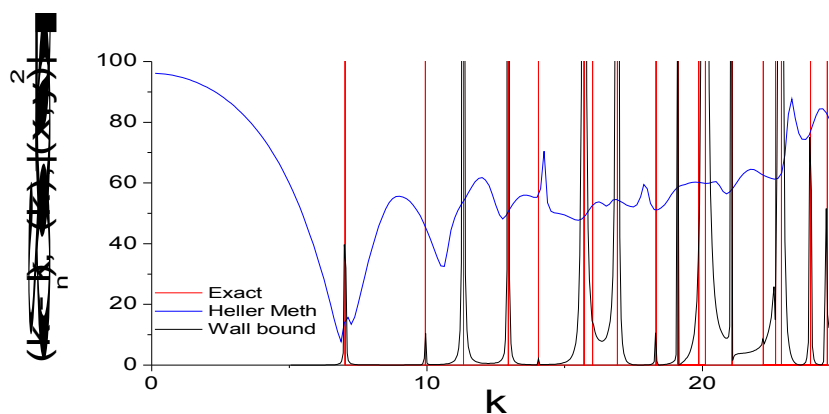
ESTADOS RESSONANTES DO BILHAR TRIANGULAR $(45^\circ, 45^\circ, 90^\circ)$					
Nível		Número de onda ( $k$ )		Precisão	Exatidão
$n$	$m$	Exato	Calculado		
2	1	7.024814731	7.025	0.01	0.001
5	2	16.9179942	16.95	0.01	0.04
6	5	24.536623	24.51	0.01	0.02
7	4	25.32832971	25.325	0.01	3

Os critérios utilizados para identificar a eficácia foram os seguintes:

- Precisão: Qual a precisão necessária mínima para encontrar o estado ressonante?
- Exatidão: Qual a diferença entre o estado calculado e o exato?

Para a utilização do Método de Heller, foi criada uma base utilizando apenas ondas planas, na forma da Eq. (1), com a restrição da Eq. (2). Foi

desenvolvido programa computacional para aplicação do método onde se utilizou  $M = 300$  (Eq. (1)). Os resultados não coincidiram com o resultado exato. A figura 2 mostra uma análise comparativa entre os resultados obtidos para o método de contorno de paredes, e o método de Heller, ambos comparados com o método exato, para o triângulo  $(90^\circ, 45^\circ, 45^\circ)$ .



**Figura 2** – As linhas em vermelho mostram os resultados exatos, em preto o método de contorno de paredes, e em azul o método de Heller

## Conclusões

O método de contorno de paredes mostrou-se bastante preciso para o cálculo de autovalores de energia em bilhares quânticos. O método de Heller não apresentou bons resultados comparado com o exato, indicando que este não é um bom método para bilhares triangulares e que provavelmente exija a adição de estados evanescentes na solução, mesmo para o triângulo  $(90^\circ, 45^\circ, 45^\circ)$ , que possui solução exata [4].

## Agradecimentos

Agradecemos ao MEC- Ministério da Educação, por parte do financiamento deste trabalho por meio do Programa de Educação Tutorial (PET)

## Referências

1. da Luz, M. G. E.; Lupo-Sax, A. S.; Heller, E. J. Quantum Scattering From Arbitrary Boundaries. *Phys. Rev. E*. 1995, 56, 2496.
2. Zanetti, F. M.; Vicentini, E.; da Luz, M. G. E. Eigenstates and scattering solutions for billiard problems: A boundary wall approach. *Ann. Phys.* 2008, 323, 1644.
3. Miltenburg, A. G.; Ruijgrok, TH. W. Quantum aspects of triangular billiards. *Physica A*. 1994, 210, 476.
4. Kaplan, I.; Heller, E. J. Linear and nonlinear theory of eigenfunction scars. *Ann. Phys.* 1998, 264, 171.
5. Vega, J. L.; Uzer, T.; Ford, J. Plane-wave quantization for polygonal billiards. *Phys. Rev. E*. 1995, 52, 1490.