ANALISE DE MÉTODOS DE DETERMINAÇÃO DE AUTOVALORES DEENERGIA EM BILHARES QUÂNTICOS

Hudison Loch Haskel (iniciação cientifica voluntaria) e-mail:hudisonhaskel@hotmail.com, Eduardo Vicentini (Orientador) e-mail:evicentini@unicentro.br

Universidade Estadual do Centro Oeste – UNICENTRO/ Setor deCiências Exatas e Tecnologia.

Palavras chave: Bilhares quânticos, autovalores, estados ressonantes.

Resumo:

O presente trabalho visa avaliar diferentes métodos de determinação dos autovalores de energia em bilhares, verificando a correta identificação destes níveis. Também pretende compreender a limitação dos métodos que provocam os chamados estados evanescentes, tais como os métodos que empregam a sobreposição de ondas planas. Em um estudo preliminar, foi utilizado o bilhar triangular que produz resultados exatos para algumas geometrias e também é possível construir uma base que se cancelada em seus limites, para qualquer geometria do bilhar triangular, sendo possível desenvolver o método tradicional de superposição de ondas planas e calcular, por meio de métodos numéricos, os níveis de energia. Também trabalhamos com o método de Heller de superposição de ondas planas, que utiliza uma base simples e geral, e está preocupado apenas com uma minimização do parâmetro chamado tensão nas fronteiras do bilhar. No entanto, utilizando este método em bilhares, alguns dos estados podem estar ausentes (estado evanescente). Recentemente, foi proposto o método de contorno de paredes, que trabalha com o problema do espalhamento através de paredes finas, usando a equação de Lippmann-Schwinger que, no que diz respeito ao bilhar estádio, determina corretamente os estados que estão ausentes na solução do problema pelo método de Heller. Os resultados preliminares mostram que o método parede na fronteira apresenta os mesmos resultados como o método tradicional de superposição de ondas planas. Desta forma, esperamos compreender os mecanismos de exclusão dos Estados do método de Heller para este grupo de bilhar.

Introdução.

Bilhares, na sua versão clássica, são sistemas bidimensionais, compostos por partículas puntuais, não interagentes, com massa unitária e módulo da velocidade constante também unitário, cujas trajetórias são linhas retas que mudam de direção após reflexões com as fronteiras do sistema. São considerados bons modelos pois associam simplicidade, em relação à sua geometria e interações, com comportamento dinâmico variado, podendo apresentar propriedades como ergodicidade, *mixing* e caos [1]. Em Mecânica Quântica, o problema de bilhares tem provado ser um modelo muito útil [2,3], pois pode ser usado para modelar pontos quânticos [4], dispositivos nanoeletromecânicos [5], ressonadores micro-ópticos [6], entre outros. Acrescentamos ainda, que os bilhares quânticos são usados como modelos para compreender o caos quântico e sua conexão com a dinâmica clássica subjacente [7].

Materiais e métodos

O problema interno ao bilhar consiste em resolver a equação Helmholtz para obter o espectro energético e os autovalores associados. Existem diferentes abordagens para resolver este problema. Neste trabalho, usamos a decomposição em ondas planas [2,8], em duas versões, e o método de contorno de paredes [3]. A decomposição em onda planas utiliza um conjunto de funções que se anulam na fronteira do bilhar e procedimentos padrões para diagonalização de matrizes. O método de contorno de paredes utiliza as funções delta de Dirac para representar as paredes do bilhar como o potencial na equação de Lippmann-Schwinger. Trabalhamos com um triângulo isósceles reto, com ângulos internos $\left(90_o, 45_o, 45_o\right)$, laterais $\left(1, 1, \text{raiz de } 2\right)$ e área A = ½ e resolvemos a equação de Schrödinger para uma partícula no interior do triângulo:

$$\frac{-\hbar^2}{2M}\left[\frac{\partial^2 \psi(x,y)}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 \psi(x,y)}{\partial y^2}\right]-E\,\psi(x,y)=0 \qquad (1)$$

Para este triângulo, existe uma solução exata com valores de energia:

$$E_{mn}=\frac{\pi^2\hbar^2}{4\mathrm{MA}}\left(m^2+n^2\right) \quad \text{para} \quad 0<n<m \qquad (2)$$

1) Decomposição simples em onda planas:

Este método é descrito na ref. [8]. Consiste em fazer a mudança de variáveis:

$$u=x-y \quad \text{e} \quad v=y$$

e reescrever a Eq. (1) na forma:

$$\frac{1}{4\pi}\frac{\partial^2 \phi(u,v)}{\partial u^2}+\frac{1}{8\pi}\frac{\partial^2 \phi(u,v)}{\partial v^2}-\frac{1}{4\pi}\frac{\partial^2 \phi(u,v)}{\partial u\,\partial v}+\varepsilon\,\phi(u,v)=0 \qquad (3)$$

O conjunto completo de estados ortonormais utilizados que se cancelam na fronteira do triângulo é:

$$\phi_{m,n}(u,v)=2\left[\sin(m\pi u)\sin(n\pi v)-(-1)^{m+n}\sin(n\pi u)\sin(m\pi v)\right] \qquad (4)$$

A solução da Eq.. (3) expandida em termos destas funções básicas (Eq.(4)) é:

$$\phi(u,v)=\sum_i c_i\phi_i(u,v) \quad \text{com} \quad 0<n<m \qquad (5)$$

Onde *i = 1, 2, 3 ...* correspondente a um certo par (m,n).

2) O método de Heller de decomposição em ondas planas.

Usamos o método de Heller descrito na ref. [2]. Este método trabalha com a solução:

$$\Psi_k(x, y) = \sum_{l=1}^{M} a_l \sin(k_x^{(l)} x) \sin(k_y^{(l)} y) \tag{6}$$

que, para qualquer l ,

$$k_x^2 + k_y^2 = k^2 .$$

Esta proposta corresponde à M superposições de ondas planas, todas com o mesmo k, mas com diferentes direções de propagação. Temos de encontrar uma solução que se anula em M pontos nas fronteiras do triângulo. Depois disso, é preciso verificar se a solução é apropriada para outros pontos da fronteira. Para este efeito, computamos o parâmetro chamado de "tensão", definido como:

$$\sigma^2(k) = \sum_{l=1}^{M} [\Psi(x_i y_i)]^2 \tag{7}$$

onde os pontos (x_i, y_i) estão na fronteira. Os valores de k que tornam σ mínimos são os autovalores do bilhar.

4) Método de Contorno de paredes

Nós utilizamos o método descrito na ref. [3], que utiliza paredes de potenciais e a equação de Lippmann-Schwinger:

$$\psi(r) = \phi(r, k) + \int ds\, y(s)\, G_0(r, r(s); k)\, \psi(r(s)) \tag{8}$$

Este método mostra os valores da função de onda dentro e fora do bilhar. No entanto, apenas para os permitidos vetores de onda k (estados ressonantes), ψ (x, y) não deverá ser nulo no interior do bilhar. Assim, observamos os valores de $(\psi(x, y))^2$ em um ponto situado no interior do bilhar e que registramos os valores de k que não tornam $(\psi(x, y))^2$ nulo.

Resultados

A Figura 1 resume os resultados de nossos estudos preliminares sobre os estados ressonantes em um bilhar triangular. Os valores do vetor de onda $k = 2M\ E\ /\hbar^2$, determinados pelos diferentes métodos acima citados, estão mostrados na Figura 1. As linhas vermelhas indicam os resultados exatos dados pela Eq. (2) e pelo Método 1 de decomposição de ondas planas, que coincidem para esta geometria. A linha azul indica os resultados do Método 2, de Heller de ondas planas e a linha preta os resultados pelo Método 3, de contorno de paredes. Nota-se que o Método 3 também coincide com o resultado exato. O Método 2, de Heller, que pode ocultar os estados (estados evanescentes), mas ainda necessita de ajustes numéricos. Apesar do Método 1 também coincidir com o exato, não é garantido que ele não vá apresentar os estados evanescentes para outras geometrias de bilhares triangulares. Apenas o Método 3, nos limites da precisão numérica utilizada, irá sempre coincidir com o exato.

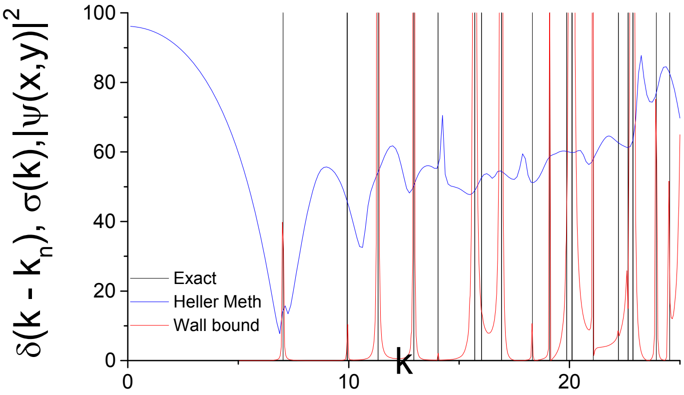

Figura 1 – Resultados para os estados ressonantes em um bilhar triangular (90°, 45°, 45°) por diferentes metodos descritos no texto. O resultado indicado como exato coincide com o chamado Método 1 de decomposição de ondas planas. O método de contorno de paredes coincide como o exato e o método de Heller necessita de ajustes numéricos, mas pode indicar os chamados estados evanescentes..

Conclusões

Com nossos estudos foi possível identificar um método de referência (Método de contorno de paredes) para comparação com outros métodos os quais apresentam os estados evanescentes. O Método de Heller ainda necessita de ajustes numéricos. Em nossas futuras investigações pretendemos variar a geometria do bilhar triangular (ângulos internos) e verificar sua relação com os estados evasnecentes.

Referências

1. Sinai, Y.G. *Russ. Math. Surveys* 1970 25 137.
2. Vega, J. L.; Uzer, T.; Ford, J. (Plane-wave quantization for polygonal billiards) *Phys. Rev.* E 1995, 52, 1490.
3. Zanetti, F. M.; Vicentini, E.; Luz, M. G. E. (Eigenstates and scattering solutions for billiards problems: a boundary wall approach) *Ann. Physics* 2008, 323, 1644.
4. Beenakker, C. W. J.; (Random-Matrix Theory of Quantum Transport) *Review Modern Physics*. 1997, 69, 731.
5. Gusso, A.; Luz, M. G. E.; Rego, L. C. G. (Eigenstates and scattering solutions for billiard problems: A boundary wall approach) *Phys Rev.B*. 2006, 73, 035436.
6. Hentschel, M.; Richter, K. (Quantum chaos in optical systems: the annular billiard) *Phys. Rev. E*. 2002, 66, 056207.
7. Sridhar, S.; Heller, E. J.; (*Physical* and Numerical Experiments on the Wave Mechanics of Classically Chaotic Systems) *Phys. Rev. A.* 1992, 46, 1728.
8. Miltenburg, A. G.; Ruijgrok, TH. W. (Origin of chaos in soft interactions and

signatures of nonergodicity) Physica A. 1994, 210, 476