

FABIO MARCEL ZANETTI

**APLICAÇÕES DO MÉTODO DE CONTORNO DE  
PAREDES A ALGUNS PROBLEMAS DE  
ESPALHAMENTO QUÂNTICO**

Tese apresentada ao Curso de Pós- Graduação em Física do Setor de Ciências Exatas da Universidade Federal do Paraná, como requisito parcial para a obtenção do grau de Doutor em ciências

Orientador: Prof. Dr. Marcos Gomes Eleutério da Luz

**Curitiba**

2008

## Resumo

A finalidade geral da presente contribuição é aplicar o método de contorno de paredes (LUZ et al., 1997) a vários problemas que admitem tratamento por técnicas de espalhamento. O método foi desenvolvido originalmente para o cálculo de espalhamento de elétrons por paredes de formatos e condições de contorno variadas, porém, pode ser aplicado a qualquer problema que possa ser resolvido pela equação de Helmholtz, obedecendo a condições de contorno con-dizentes. Neste sentido, será explorada aqui a conexão entre alguns problemas de espalhamento de elétrons e seu paralelo na fotônica, além da utilização do método no estudo de bilhares quânticos abertos e fechados.

Através de uma ampla discussão do método, seu objeto principal, a matriz  $T$ , será analisada em detalhe. Várias características de  $T$  serão obtidas e utilizadas para discutir características gerais de bilhares, tais como, sua relação com o princípio da dualidade dentro-fora, da transparência e com o formalismo da matriz  $S$ .

Além disso, será apresentada uma versão numérica simples e eficiente do método de contorno de paredes, que será aplicada na simulação e discussão dos seguintes problemas bidi-mensionais: i) cristais fotônicos: será focada a transmissão e criação de modos em vários tipos de redes semelhantes àquelas das quais são formados os cristais fotônicos; ii) dispositivo cole-tor de fótons: é analisada a cavidade de um dispositivo fotodetector. O propósito é otimizar o aprisionamento de luz, melhorando então sua eficiência; iii) bilhar quântico aberto formado por três discos: serão analisadas a formação ressonante dos quase-estados de longa vida e as pro-priedades de espalhamento do sistema de espalhadores formado por paredes rígidas, testando também a estabilidade das soluções para discos com condição de contorno permeável; iv) bi-lhares acoplados: serão discutidos os autoestados e as propriedades de transmissão em bilhares quânticos acoplados, abertos e fechados, em função de diferentes geometrias da guia de onda de acoplamento.



## Abstract

The general goal of the present contribution is to apply the boundary wall method (LUZ et al., 1997) to a great variety of problems, which admit a treatment by scattering approaches. The method was originally developed for the calculation of electronic scattering by walls of various shapes and boundary conditions, however, it can be used to any problem which can be solved by the Helmholtz equation, obeying the suitable boundary conditions. In this way, here it is explored the connection between some electron scattering problems and the the field of photonics, as well as it is addressed the application of the method in the study of open and closed quantum billiards.

Throughout a comprehensive discussion of the method, its main tool, namely the  $T$ -matrix will be analyzed in detail. Several characteristics of  $T$  will be presented and used to discuss general properties of billiards, like the inside-outside duality, the transparency principle and the  $S$ -matrix formalism.

Moreover, it will be considered a simple and efficient numerical version of the boundary wall method, which will be applied in the simulations and discussions of the following bi-dimensional problems: i) photonic crystal-like structures: focusing the transmission and mode creation in several kinds of “lattices” that resembles photonic crystals; ii) light harvesting device: analyzing the geometry of the organic photovoltaic devices cavity. The purpose is to optimize the trapping of the incident light, so to improve systems efficiency; iii) open quantum billiard formed by three scattering discs: analyzing the resonant formation of long life quasi-states and scattering properties of systems with hard walls. Also testing the stability of the solutions for the discs with penetrable boundary conditions; iv) coupled billiards: discussing the eigenstates and transmission properties in coupled quantum billiards, open and closed, as function of the different geometries of the coupling waveguides.

*The most merciful thing in the world, I think, is the inability of the human mind to correlate all its contents. We live on a placid island of ignorance in the midst of black seas of infinity, and it was not meant that we should voyage far. The sciences, each straining in its own direction, have hitherto harmed us little; but some day the piecing together of dissociated knowledge will open up such terrifying vistas of reality, and of our frightful position therein, that we shall either go mad from the revelation or flee from the deadly light into the peace and safety of a new dark age.*

H.P. Lovecraft, "The Call of Cthulhu"

## **Agradecimentos**

Sem o apoio das seguintes pessoas este trabalho nunca teria sido possível:

- Profº Marcos Gomes;
- Minha filha, Ingrid;
- Minha Família. Em especial meus pais, Pedro e Márcia, minha irmã, Carina, meus avós, Giocondo e Jovina, e tia Célia;
- Giovana, *my burning love*, e Família;
- Membros da banca de pré-defesa: Profº Marlus Koehler, Profº Kleber Daum Machado e Profª Lucimara Stolz Roman;
- Membros da banca de defesa: Profº Fernando Pablo Devecchi, Profº Ricardo Luiz Viana, Profº Roberto Andre Kraenkel e Profº Luiz Roberto Evangelista;
- Amigos, Colegas e Professores da pós-graduação e graduação;
- Profº Carlos de Carvalho;
- CAPES.

# Conteúdo

<b>1</b>	<b>Introdução.....</b>	<b>p. 1</b>
1.1	Bilhares.....	p. 1
1.2	Método de Contorno de Paredes.....	p. 2
1.3	Problemas abordados e divisão da tese.....	p. 4
<b>2</b>	<b>Desenvolvimento teórico do método de contorno de paredes.....</b>	<b>p. 7</b>
2.1	Escolha do potencial do espalhador.....	p. 8
2.2	Desenvolvimento analítico.....	p. 9
2.3	Alguns resultados analíticos para bilhares.....	p. 15
2.3.1	Solução interna e mecanismo de filtro.....	p. 17
2.3.2	Solução externa e a matriz $S$ .....	p. 19
2.4	Dualidade dentro-fora.....	p. 20
2.4.1	Autovalores da matriz $S$ e os autoestados da solução interna.....	p. 20
2.4.2	Versão forte da dualidade dentro-fora e o princípio da transparência.....	p. 23
2.5	Solução analítica de $T$ para o bilhar circular.....	p. 25
2.6	Tratamento numérico.....	p. 28
2.7	Conclusões Parciais.....	p. 31
<b>3</b>	<b>Cristais Fotônicos.....</b>	<b>p. 33</b>
3.1	Cristais fotônicos ordenados impermeáveis ( $\gamma \rightarrow \infty$ ).....	p. 34
3.1.1	Rede com guia de onda tipo $\pi/2$ .....	p. 34
3.1.2	Rede com guia de onda tipo <i>Interferômetro</i> .....	p. 37
3.2	Cristais fotônicos com permeabilidade $\gamma$ finita.....	p. 41

3.2.1	Redes com guias de onda tipo $\pi/2$ e interferômetro .....	p. 43
3.2.2	Redes com cavidades ressonantes .....	p. 44
3.3	Conclusões parciais .....	p. 46
<b>4</b>	<b>Otimização de cavidades para dispositivo coletor de fótons .....</b>	<b>p. 48</b>
4.1	Dispositivo para aprisionamento de fótons .....	p. 48
4.2	Dispositivo utilizado nas simulações .....	p. 50
4.3	Resultados das simulações .....	p. 51
4.4	Resultados experimentais .....	p. 53
4.5	Conclusões parciais .....	p. 54
<b>5</b>	<b>Bilhar quântico aberto formado por três discos .....</b>	<b>p. 57</b>
5.1	Espalhamento caótico .....	p. 57
5.1.1	Espalhador formado por discos .....	p. 58
5.1.2	Abordagens semiclássica e quântica .....	p. 59
5.2	Espalhador formado por discos rígidos .....	p. 60
5.2.1	Solução de espalhamento e quase-estados .....	p. 60
5.2.2	Matriz $T$ e estabilidade da região de espalhamento .....	p. 65
5.3	Espalhador formado por discos permeáveis .....	p. 68
5.3.1	Solução de espalhamento e quase-estados para discos com permeabilidade $\gamma$ finita .....	p. 69
5.4	Conclusões parciais .....	p. 77
<b>6</b>	<b>Bilhares acoplados por guias de onda .....</b>	<b>p. 78</b>
6.1	Dois quadrados acoplados por uma guia de onda .....	p. 79
6.1.1	Autoestado par do quadrado .....	p. 80
6.1.2	Autoestado ímpar do quadrado .....	p. 82
6.1.3	Autoestados da estrutura acoplada .....	p. 86

6.2	Quadrado acoplado a um quarto de círculo por uma guia de onda . . . . .	p. 95
6.2.1	Autoestados do quadrado $Q$ . . . . .	p. 95
6.2.2	Autoestados do quarto de círculo $QC$ . . . . .	p. 97
6.2.3	Autoestados da estrutura acoplada . . . . .	p. 98
6.3	Transmissão através de um bilhar quadrado com guias de onda acopladas . . . . .	p. 106
6.3.1	Variação da largura $h_1$ da guia de onda de entrada . . . . .	p. 108
6.3.2	Variação da largura $h_2$ da guia de onda de saída . . . . .	p. 112
6.3.3	Variação da posição $d$ da guia de onda de saída . . . . .	p. 116
6.3.4	Variação da energia da onda incidente para geometrias fixas . . . . .	p. 123
6.4	Conclusões parciais . . . . .	p. 126
<b>7</b>	<b>Conclusão</b> . . . . .	p. 127
7.1	Trabalhos futuros . . . . .	p. 129
7.1.1	Bilhares isoespectrais . . . . .	p. 129
7.1.2	Cristais fotônicos com desordem estrutural . . . . .	p. 130
7.1.3	Localização em redes desordenadas . . . . .	p. 131
	<b>Referências Bibliográficas</b> . . . . .	p. 133

# 1 Introdução

Problemas de valor de fronteira sempre foram de grande importância em praticamente todos os campos da ciência, porém eram de difícil realização experimental para vários problemas quânticos. No entanto, nas últimas décadas este cenário tem-se modificado. A crescente evolução tecnológica que a indústria tem experimentado estendeu-se à engenharia quântica, impulsionando o interesse e investimentos na fabricação de estruturas micro e mesoscópicas, onde a função de onda do problema precisa se anular em suas paredes. Exemplos de suas aplicações são as realizações cada vez mais frequentes de pontos quânticos (KIM et al., 2001), currais quânticos (FRANCS et al., 2000; MILNER et al., 2001; CHICANNE et al., 2002), cavidades de microonda (STÖCKMANN, 1999), filmes finos (ROMANOV; TORRES, 2004; BERGMANN, 2005), etc. Estes sistemas nada mais são do que a aplicação direta de problemas de fronteira no âmbito da mecânica quântica experimental.

Junto à importância experimental, cresceu a necessidade de obtenção de maneiras eficientes de resolução teórica desta classe de sistemas. Dentre os vários métodos pelos quais pode ser tratado o problema de fronteira, destaca-se a utilização de técnicas de cálculo de espalhamento, através de potenciais efetivos. Esse tipo de abordagem procura a solução do problema de uma partícula interagindo com um potencial que satisfaz as condições de contorno requeridas através da comparação entre as duas dinâmicas envolvidas no problema: da partícula livre, que se move pelo espaço sem interação, e do comportamento da partícula quando é afetada por um potencial espalhador (REED; SIMON, 1979).

## 1.1 Bilhares

Estruturas que admitem o modelamento por meio de problemas de fronteira podem ser tratadas teoricamente através do formalismo para *bilhares*. Bilhares são estruturas, tradicionalmente formadas por curvas fechadas, nas quais a partícula pode ser aprisionada na região interna ou espalhada pela região externa (BERRY, 1994; STÖCKMANN, 1999). A solução quântica deste problema pode obtida resolvendo-se a equação de Helmholtz, a qual fornece o espectro

de energias e seus autoestados associados para o problema interno, assim como os estados de espalhamento para a parte externa.

Além da grande utilização de bilhares na modelagem teórica de vários sistemas quânticos experimentais, como os citados anteriormente, eles representam uma ferramenta de extrema importância no estudo de caos quântico (STÖCKMANN, 1999) e sua conexão com a dinâmica clássica subjacente (HELLER, 1984).

Face à vasta gama de interesses que os bilhares têm despertado, vários métodos tem sido desenvolvidos para a sua solução por técnicas de espalhamento. Alguns dos mais importantes, são:

- teoria de perturbação: o problema de espalhamento é resolvido considerando o potencial de interação como uma perturbação ao problema da partícula livre, sendo resolvido pelo formalismo da matriz  $S$  (HACKENBROICH et al., 1998). Este foi o método utilizado por Max Born no primeiro estudo formal de espalhamento quântico, em 1926 (BORN, 1926);
- *boundary integral method* (BIM): método mais utilizado na resolução desse tipo de problemas, onde a função de onda é expressa em termos de uma integral de linha e sua derivada normal sobre a fronteira. O espectro de autovalores é obtido através das raízes de um determinante de Fredholm (GIPSON, 1987; LI; ROBNIK, 1995; GOLOSKIE et al., 1996; HARTMANN, 1997; KOSZTIN; SCHULTEN, 1997);
- decomposição por ondas planas: utiliza uma superposição de ondas planas como “ansatz” para a solução da equação de Helmholtz (HELLER, 1990; LI et al., 1998);
- *boundary element method*: Método semelhante ao BIM, onde o determinante de Fredholm é resolvido a partir da discretização da equação integral envolvida (TASAKI et al., 1997);
- *scaling method*: método utilizado para curvas fechadas que calcula diretamente os autovalores e autofunções do bilhar resolvendo uma equação de autovalores generalizada em termos das quantidades relacionadas à barreira (VERGINI; SARACENO, 1998). É muito eficiente na busca de autoestados de energias mais elevadas do sistema.

## 1.2 Método de Contorno de Paredes

Na década de 90 foi desenvolvido um novo método para a solução de problemas de espalhamento quântico de uma partícula por barreiras arbitrárias, o *método de contorno de*



*paredes* (MCP)<sup>1</sup> (LUZ et al., 1997). Podem ser resolvidos pelo método sistemas nos quais as barreiras espalhadoras são abertas ou fechadas, conexas ou desconexas (ver figura 1.1), com vários tipos de condições de contorno, tais como Neumann, Dirichlet, mista, permeável, etc.

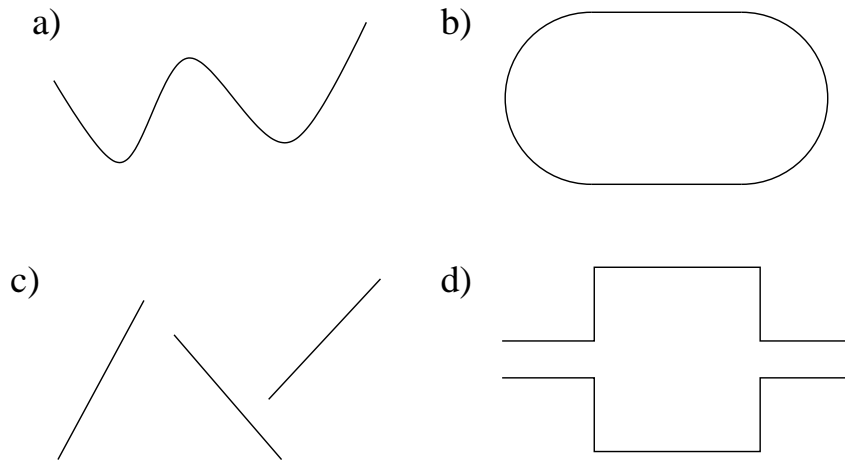


Figura 1.1: Exemplos de possíveis formatos da barreira espalhadora: a) curva aberta; b) curva fechada (bilhar); c) curva desconexa; e d) ressonador aberto.

O MCP vem sendo aplicado com bons resultados na resolução de vários problemas quânticos bidimensionais que admitem abordagem por técnicas de espalhamento. Os temas são de enfoque variado, tais como o modelamento de ressonadores abertos (KATINE et al., 1997) e a simulação de ondas de matéria para fios quânticos e redes atômicas (VAISHNAV et al., 2006, 2007).

O objeto matemático principal do método é a chamada matriz  $T$ . Sua característica mais importante reside no fato de que ela carrega informações acerca da energia considerada e da geometria do problema. Além da obtenção da solução correta de espalhamento para a parte externa ao bilhar, a matriz  $T$  tem a capacidade de atuar como um “filtro” e, nos casos em que a energia (e simetria) da onda incidente coincide com um autovalor do bilhar fechado, fornece os autoestados do problema interno. Estas características, aliadas à sua fácil implementação numérica, são grandes vantagens do MCP sobre outros métodos de espalhamento mais tradicionais.

<sup>1</sup>Durante o transcorrer da tese, por simplicidade, o método de contorno de paredes será referido apenas por MCP.

### 1.3 Problemas abordados e divisão da tese

Neste trabalho, o método do contorno de paredes será aplicado na resolução de alguns problemas quânticos bidimensionais que admitem solução por técnicas de espalhamento. Os temas são de enfoque variado, como a resolução de estados de espalhamento em redes periódicas, espalhamento por estruturas desconexas, solução de autoestados em curvas fechadas, etc. Em alguns destes casos a abordagem de espalhamento não é usual, porém, como veremos, a resolução através do MCP mostra-se uma boa alternativa, apresentando vantagens sobre alguns dos métodos de resolução mais tradicionais.

No segundo capítulo será mostrado o desenvolvimento analítico do MCP, assim como sua avaliação na resolução do espalhamento por um bilhar circular, onde são analisadas várias propriedades da matriz  $T$ . Ainda sob os aspectos teóricos do método, serão abordados resultados relativos à sua aplicação a bilhares fechados, tais como a dualidade dentro-fora, a ação da matriz  $T$  como um filtro para autoestados do problema, sua utilização como instrumento para a obtenção do espectro de ressonância dos bilhares, a relação que pode ser obtida entre  $T$  e o formalismo da matriz  $S$ , etc.

Nos capítulos seguintes, a versão numérica do método será utilizada para investigação de diferentes problemas de espalhamento. Primeiramente, será feita uma extensão da utilização do MCP, inicialmente desenvolvido para o tratamento de partículas, em aplicações no campo da fotônica. Esta possibilidade de aplicação deve-se à similaridade que a forma das equações de Maxwell (para uma frequência  $\omega$  fixa) e a equação de Schrödinger possuem em duas dimensões. Neste contexto são tratados os seguintes problemas:

- *Cristal fotônico.*

São arranjos periódicos de espalhadores dielétricos (em uma, duas ou três dimensões), com separação da ordem do comprimento de onda  $\lambda$  da luz incidente. Possuem uma banda proibida de energias, porém a inserção de defeitos propositais na sua estrutura pode criar condições para existência de modos propagantes em seu interior (JOHNSON; JOANNOPOULOS, 2003). Será abordada, na primeira parte do capítulo 3, a transmissão através de sistemas espalhadores que simulam a ação de cristais fotônicos possuindo uma guia de onda com uma curva de  $90^\circ$  (a qual nos referiremos como *curva  $\pi/2$* ), caso bastante conhecido da literatura, e uma nova estrutura, que é formada por uma rede na qual são produzidas guias de onda acopladas formando uma espécie de interferômetro. Serão simuladas primeiramente redes com espalhadores rígidos e depois com certa permeabilidade finita, onde a permeabilidade será associada à constante dielétrica dos cristais.

Ainda sob o contexto de espalhadores permeáveis, serão abordados dois casos de redes que possuem cavidades geradas por defeitos e seus modos ressonantes.

- *Otimização da cavidade de dispositivo coletores de luz.*

Em 2000, foi mostrado que uma alternativa para a melhoria da eficiência da absorção em dispositivos fotodetetores é depositar a camada fotoativa entre duas placas condutoras, sendo que uma delas possui furos por onde a luz incidente pode entrar e ser aprisionada (PEUMANS et al., 2000). Isto faz com que a luz sofra várias reflexões entre as placas, aumentando a possibilidade de os fótons serem absorvidos. No capítulo 4, será feita uma análise qualitativa de qual a geometria ou, mais precisamente, qual tamanho e distanciamento entre os furos otimiza a ação da cavidade do dispositivo. Os resultados são usados na fabricação e teste experimental do dispositivo, e serão comparados com os obtidos através do MCP.

Seguindo por uma linha diferente da inicial, na qual os problemas abordados são relacionados à fotônica, os capítulos 5 e 6 mostrarão duas aplicações do MCP no estudo de bilhares quânticos:

- *Bilhar aberto formado por três discos.*

O bilhar aberto formado por três discos é um dos sistemas físicos mais simples que exibe caos classicamente (GASPARD, 1998). Seu estudo vem sendo aplicado, por exemplo, na análise de reações nucleares e moleculares e da validade de expansões semi-clássicas. No capítulo 5 será feita uma avaliação detalhada da solução deste sistema pelo MCP. Veremos como as análises da estrutura da matriz  $T$  e da parte espalhada de  $\psi(\vec{r})$  podem trazer resultados interessantes acerca dos quase-estados de longa vida da estrutura, do comportamento das soluções quando a permeabilidade e o raio dos discos varia, etc.

- *Bilhares acoplados por guias de onda.*

Estruturas compostas por mais de uma unidade primária, tais como bilhares acoplados, têm adquirido cada vez mais importância teórica e experimental, na medida que a engenharia de sistemas microscópicos avança. No capítulo 6, serão consideradas três situações de bilhares acoplados, nos quais o enfoque da análise fixa-se sobre o comportamento das soluções quando a geometria das guias de onda de acoplamento é variada. Nos casos de dois quadrados acoplados e um quadrado acoplado a um quarto de círculo, será estudado o comportamento dos autoestados do sistema. O último caso é de um bilhar aberto acoplado ao contínuo (parte externa) por guias de onda, onde será analisada a variação da transmissão de uma onda incidente.

A variedade de temas abordados e maneiras de se obterem resultados de cada diferente análise mostrarão a grande versatilidade e aplicabilidade do MCP, principalmente a problemas que envolvam variação das características do espalhador. Devido a esta diversidade de assuntos abordados, os capítulos de investigação numérica do método são de certa forma independentes entre si, podendo cada um ser visto como um trabalho à parte dentro da temática geral da tese. Por esse motivo, em cada capítulo será feita uma pequena introdução e revisão pertinente ao seu entendimento, assim como uma conclusão parcial relativa aos resultados obtidos.

Por último, é feita uma conclusão geral, recapitulando os pontos mais importantes vistos durante o trabalho. São também expostos possíveis caminhos para a continuação das aplicações do MCP aqui iniciadas.

## 2 Desenvolvimento teórico do método de contorno de paredes

Existem várias maneiras de serem resolvidos problemas de espalhamento, tanto para curvas abertas como fechadas. Fisicamente estas curvas podem ser vistas como barreiras de energia potencial que apresentam regiões onde uma partícula é espalhada, como em uma curva aberta (ver figura 1.1.a e 1.1.c), ou uma barreira, onde, além da solução de espalhamento, existe a possibilidade de ela ser aprisionada, como em curvas fechadas (ver figuras 1.1.b e 1.1.d).

Em curvas fechadas, conhecidas como *bilhares*, o espaço pode ser dividido em duas regiões: interna, que é a parte interior à curva, onde a partícula/onda pode ser presa, e externa, onde apenas a solução de espalhamento é observada, como exemplificado na figura 2.1. Nos métodos de tratamento mais utilizados para este tipo de sistema, a solução encontrada vale apenas para uma das regiões. Isto faz com que seja necessário resolver o problema para cada região separadamente quando é preciso obter a solução completa (para todo o espaço). Certos trabalhos exploram conexões existentes entre a solução da parte externa (espalhamento) e interna (autoestados) dos bilhares (DIETZ; SMILANSKY, 1993; ECKMANN; PILLET, 1995).

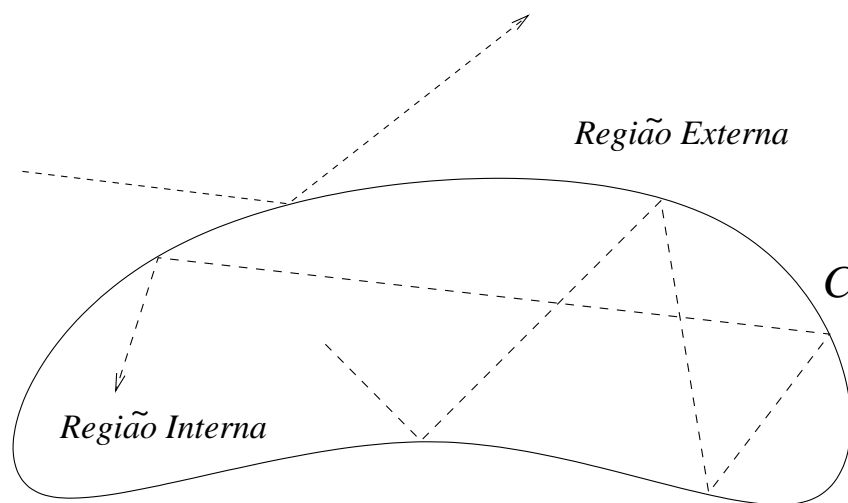


Figura 2.1: Regiões interna e externa de um bilhar fechado de contorno  $C$ . As linhas pontilhadas referem-se à dinâmica de uma partícula sendo espalhada em cada região.

Em meados da década de 90, foi desenvolvido um novo método para tratamento do espalhamento de uma partícula por barreiras arbitrárias, o *método do contorno de paredes* (MCP) (LUZ et al., 1997). Podem ser resolvidos pelo método sistemas nos quais as barreiras espalhadoras são abertas ou fechadas, conexas ou desconexas (ver figura 1.1), apresentando tipos variados de condições de contorno. Como será visto neste capítulo, o MCP é simples, tanto conceitual quanto numericamente, fornecendo uma abordagem interessante e acessível não só para problemas de espalhamento, mas para a solução de vários tipos problemas de fronteiras.

## 2.1 Escolha do potencial do espalhador

Teorias de espalhamento independentes do tempo ( $t \rightarrow \infty$ ) assumem que o comportamento assintótico ( $r \rightarrow \infty$ ) está incorporado na função de Green livre, enquanto o espalhamento em si ocorre pela ação de um potencial.

No espalhamento por paredes é necessário que a função de onda da partícula interaja com o potencial somente sobre os pontos que pertencem ao contorno  $C$  da barreira espalhadora, comportando-se no resto do espaço como uma partícula livre. Criando um potencial que simule este comportamento e, em um limite apropriado, leve a função de onda a satisfazer a condição de contorno desejada, o problema de valor de fronteira pode ser resolvido através de uma abordagem de espalhamento.

Para tanto, usaremos um potencial do tipo “parede- $\delta$ ”

$$V(\vec{r}) = \int_C ds \gamma(s) \delta(\vec{r} - \vec{r}(s)) \{ \alpha(s) + [1 - \alpha(s)] \partial_{\vec{n}(s)} \}, \quad (2.1)$$

no qual a integral é feita sobre a superfície  $C$  e  $\gamma(s)$  e  $\alpha(s)$  são termos independentes, que controlam a permeabilidade e a condição de contorno do espalhador, respectivamente.

A ação da função delta no potencial proposto garante que a partícula só sofrerá a ação do potencial sobre  $C$ . As condições de contorno do problema são definidas a partir da escolha correta dos parâmetros do potencial. Para valores de  $\gamma(s)$  finitos, o espalhador terá o efeito de uma parede permeável. Com  $\gamma(s)$  infinito, o efeito será de uma parede rígida (ou impenetrável), o que pode ser observado tomando o limite  $\gamma(s) \rightarrow \infty$  na ação de (2.1) sobre a função de onda  $\psi(\vec{r})$  em um ponto  $s$  de  $C$

$$\alpha(s) \psi(\vec{r}(s))|_C + [1 - \alpha(s)] \partial_{\vec{n}(s)} \psi(\vec{r}(s))|_C = 0, \quad (2.2)$$

de onde, quando tomado  $\alpha(s) = 1$ , obtemos a condição de contorno de Dirichlet

$$\psi(\vec{r}(s))|_C = 0.$$

Um potencial com estas características satisfaz as exigências, acima citadas, para a utilização da abordagem de espalhamento na resolução do problema de condição de fronteira.

## 2.2 Desenvolvimento analítico

Considere a equação de Schrödinger para um sistema  $d$ -dimensional independente do tempo,

$$H(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}), \quad (2.3)$$

com  $H(\vec{r}) = H_0(\vec{r}) + V(\vec{r})$ , onde  $H_0(\vec{r})$  é o Hamiltoniano da partícula livre. Fazendo em (2.3)  $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ ,  $V(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2m}U(\vec{r})$  e isolando  $U(\vec{r})$ , obtem-se

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(\vec{r}) = U(\vec{r})\psi(\vec{r}), \quad (2.4)$$

que é a equação diferencial de espalhamento para um potencial arbitrário  $U(\vec{r})$ . Para resolver a equação acima será utilizado o método da função de Green. O método consiste em transformar a equação diferencial em questão em uma equação integral da seguinte maneira: assume-se que existe para (2.4) uma função  $G_0(\vec{r})$  tal que

$$(\nabla^2 + k^2)G_0(\vec{r}; k) = \delta(\vec{r}). \quad (2.5)$$

Qualquer função  $\psi(\vec{r})$  que satisfaça

$$\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) + \int d\vec{r}' G_0(\vec{r}, \vec{r}'; k) U(\vec{r}') \psi(\vec{r}'), \quad (2.6)$$

com  $(\nabla^2 + k^2)\varphi(\vec{r}) = 0$  (ou  $H_0(\vec{r})\varphi(\vec{r}) = E\varphi(\vec{r})$ ) e  $G_0$  sendo a função de Green da partícula livre, obedece a (2.4). A equação (2.6) é a conhecida equação de Lipmann-Schwinger (SAKURAI, 1994).

Para simular a ação de uma parede sobre a partícula, será utilizado o potencial (2.1) com  $\alpha(s) = 1$ , o que garante que a partícula obedecerá à condição de fronteira de Dirichlet,

$$V(\vec{r}) = \int_C ds \gamma(s) \delta(\vec{r} - \vec{r}(s)), \quad (2.7)$$

com a integral sendo feita sobre a superfície  $C$ , podendo ela ser conexa ou desconexa,  $\vec{r}(s)$  é

o vetor posição do ponto  $s$  sobre  $C$  e  $\gamma(s)$  é a intensidade com a qual o potencial age em cada ponto  $s$  da barreira. Claramente,  $V(\vec{r}) = 0$  para qualquer  $\vec{r}$  que não pertença a  $C$ .

Fazendo  $\hbar = 2m = 1$  e inserindo o potencial (2.7) em (2.6) teremos

$$\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) + \int d\vec{r}' G_0(\vec{r}, \vec{r}'; k) \left[ \int_C ds \gamma(s) \delta(\vec{r}' - \vec{r}(s)) \right] \psi(\vec{r}').$$

Resolvendo a integral de volume sobre  $\vec{r}'$  temos

$$\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) + \int_C ds' \gamma(s') G_0(\vec{r}, \vec{r}(s'); k) \psi(\vec{r}(s')). \quad (2.8)$$

Esta equação pode ser interpretada como a equação integral de espalhamento para a barreira permeável de forma  $C$ , caracterizada por  $\gamma(s)$ . Qualquer onda plana de número de onda  $k$  que incida perpendicularmente à  $C$  no ponto  $s$  tem probabilidade  $\mathcal{T} = 4k^2 / (4k^2 + \gamma(s)^2)$  de ser transmitida através de  $C$ , e probabilidade  $\mathcal{R} = \gamma(s)^2 / (4k^2 + \gamma(s)^2)$  de ser refletida. Para uma discussão da obtenção dos coeficientes  $\mathcal{T}$  e  $\mathcal{R}$ , ver apêndice A da referência (LUZ et al., 1997). No limite  $\gamma \rightarrow \infty$ , verifica-se que a probabilidade de transmissão  $\mathcal{T}$  tende a zero, o que leva  $\psi(\vec{r})$  a anular-se sobre a barreira, satisfazendo assim (2.7).

Observando (2.8) sobre um ponto  $s_b$  pertencente a  $C$  e fazendo  $\gamma(s)$  constante sobre todo o contorno da barreira (o caso em que  $\gamma$  varia sobre  $s$  pode ser tratado da mesma maneira que o caso constante, porém apresenta complicações adicionais que podem ser evitadas sem prejuízos ao entendimento do método),  $\varphi(\vec{r})$  pode ser escrito como

$$\varphi(\vec{r}(s_b)) = \int_C ds_a T_\gamma^{-1}(s_b, s_a) \psi(\vec{r}(s_a)), \quad (2.9)$$

na qual, por definição  $T_\gamma^{-1}(s_b, s_a) \equiv \delta(s_b - s_a) - \gamma G_0(\vec{r}(s_b), \vec{r}(s_a); k)$  para satisfazer (2.8). Substituindo  $T_\gamma^{-1}(s_b, s_a)$  em (2.9) teremos

$$\psi(\vec{r}(s_b)) = \varphi(\vec{r}(s_b)) + \gamma \int_C ds_a G_0(\vec{r}(s_b), \vec{r}(s_a); k) \psi(\vec{r}(s_a)), \quad (2.10)$$

que é o valor de  $\psi(\vec{r}(s_b))$  sobre o ponto  $s_b$  da barreira. Pela definição de  $T_\gamma^{-1}(s_b, s_a)$  pode constatar-se que esta é simétrica perante a troca  $s_a \leftrightarrow s_b$ , visto que  $G_0(\vec{r}(s_b), \vec{r}(s_a)) = G_0(\vec{r}(s_a), \vec{r}(s_b))$ , para qualquer tipo de condição de contorno (BUTKOV, 1988).

A função  $T_\gamma(s_b, s_a)$  ainda pode ser expressa pelas seguintes relações

$$\begin{aligned} \delta(s_b - s_a) &= \int_C ds_c T_\gamma(s_b, s_c) T_\gamma^{-1}(s_c, s_a) \\ &= \int_C ds_c T_\gamma^{-1}(s_b, s_c) T_\gamma(s_c, s_a). \end{aligned} \quad (2.11)$$



Na verdade  $T_\gamma(s_b, s_a)$  pode ser definida por apenas uma das relações acima, a outra advém do fato de  $T_\gamma$  ter de ser simétrica, assim como  $T_\gamma^{-1}$ . A partir das relações encontradas acima pode ser desenvolvida uma forma de  $\psi(\vec{r})$  em função de  $T_\gamma(s_b, s_a)$  sobre a barreira. Para tanto, aplica-se  $T_\gamma(s_c, s_b)$  na equação (2.9)

$$T_\gamma(s_c, s_b)\varphi(\vec{r}(s_b)) = \int_C ds_a T_\gamma(s_c, s_b)T_\gamma^{-1}(s_b, s_a)\psi(\vec{r}(s_a)), \quad (2.12)$$

integrando em  $ds_b$  sobre  $C$  dos dois lados da igualdade e utilizando a relação (2.11)

$$\int_C ds_b T_\gamma(s_c, s_b)\varphi(\vec{r}(s_b)) = \int_C ds_a \delta(s_c - s_a)\psi(\vec{r}(s_a)), \quad (2.13)$$

efetuando a integração do lado direito da igualdade, pela ação da  $\delta$ , teremos

$$\psi(\vec{r}(s_c)) = \int_C ds_b T_\gamma(s_c, s_b)\varphi(\vec{r}(s_b)). \quad (2.14)$$

Usando esta equação no integrando de (2.10)

$$\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) + \int_C \int_C ds_b ds_a G_0(\vec{r}, \vec{r}(s_b); k)\gamma T_\gamma(s_b, s_a)\varphi(\vec{r}(s_a)). \quad (2.15)$$

Esta equação representa um resultado importante, uma vez que sua resolução fornece a função de onda  $\psi(\vec{r})$  de uma partícula interagindo com a barreira de permeabilidade  $\gamma$  e forma  $C$  para todos os pontos do espaço. Esta é uma grande vantagem que o método de contorno de paredes possui sobre outros métodos para cálculo de espalhamento. Por exemplo, na resolução de problemas onde o espalhador é fechado, com apenas um cálculo é obtida a solução dos auto-estados da região interna e os estados de espalhamento da parte externa. Em outros métodos as duas soluções precisam ser obtidas separadamente para cada região analisada. Outra vantagem é que a equação (2.15) depende apenas de quantidades conhecidas como  $G_0$ ,  $\varphi$  e  $\gamma$ , o que a torna, até certo ponto, de fácil avaliação.

Para uma completa solução de  $\psi(\vec{r})$ , falta-nos então apenas encontrar uma forma prática de resolução de  $T_\gamma$ . Inserindo a definição de  $T_\gamma^{-1}(s_b, s_a)$  em uma das identidades (2.11), a primeira por exemplo,

$$\begin{aligned} \delta(s_b - s_a) &= \int_C ds_c T_\gamma(s_b, s_c) [\delta(s_c - s_a) - \gamma G_0(\vec{r}(s_c), \vec{r}(s_a); k)] \\ &= \int_C ds_c T_\gamma(s_b, s_c)\delta(s_c - s_a) - \int_C ds_c T_\gamma(s_b, s_c)\gamma G_0(\vec{r}(s_c), \vec{r}(s_a); k) \end{aligned}$$

$$= T_\gamma(s_b, s_a) - \int_C ds_c T_\gamma(s_b, s_c) \gamma G_0(\vec{r}(s_c), \vec{r}(s_a); k).$$

Isolando  $T_\gamma(s_b, s_a)$

$$T_\gamma(s_b, s_a) = \delta(s_b - s_a) + \int_C ds_c T_\gamma(s_b, s_c) \gamma G_0(\vec{r}(s_c), \vec{r}(s_a); k). \quad (2.16)$$

Resolvendo recursivamente a equação integral pelo método de *Séries de Neumann* (ARFKEN, 1970), a forma final de  $T_\gamma(s_b, s_a)$  é expressa em função de uma série de integrais de  $G_0$ ,

$$T_\gamma(s_b, s_a) = \delta(s_b - s_a) + \sum_{j=1}^{\infty} T_\gamma^{(j)}(s_b, s_a), \quad (2.17)$$

na qual

$$T_\gamma^{(j)}(s_b, s_a) = \gamma^j \int ds_1 \dots ds_{j-1} G_0(\vec{r}(s_b), \vec{r}(s_{j-1}); k) G_0(\vec{r}(s_{j-1}), \vec{r}(s_{j-2}); k) \dots \quad (2.18) \\ \times \dots G_0(\vec{r}(s_2), \vec{r}(s_1); k) G_0(\vec{r}(s_1), \vec{r}(s_a); k).$$

Até agora foi discutido o caso para  $\gamma$  constante e finito. Pode ainda ser feita mais uma particularização de onde é obtida a forma de (2.15) para  $\gamma \rightarrow \infty$ . Para tanto, deve-se primeiramente encontrar a forma da identidade (2.11) referente a tal limite. Usando a primeira igualdade de (2.11) e a definição de  $T_\gamma^{-1}(s_b, s_a)$

$$\delta(s_b - s_a) = \int_C ds_c T_\gamma(s_b, s_c) [\delta(s_c - s_a) - \gamma G_0(\vec{r}(s_c), \vec{r}(s_a); k)].$$

Integrando o primeiro termo

$$\delta(s_b - s_a) = T_\gamma(s_b, s_a) - \int_C ds_c \gamma T_\gamma(s_b, s_c) G_0(\vec{r}(s_c), \vec{r}(s_a); k) \quad (2.19) \\ = -\frac{1}{\gamma} [-\gamma T_\gamma(s_b, s_a)] + \int_C ds_c [-\gamma T_\gamma(s_b, s_c)] G_0(\vec{r}(s_c), \vec{r}(s_a); k)$$

tomando o limite  $\gamma \rightarrow \infty$  na equação acima

$$\delta(s_b - s_a) = \lim_{\gamma \rightarrow \infty} \left\{ -\frac{1}{\gamma} [-\gamma T_\gamma(s_b, s_a)] \right\} + \int_C ds_c \lim_{\gamma \rightarrow \infty} [-\gamma T_\gamma(s_b, s_c)] G_0(\vec{r}(s_c), \vec{r}(s_a); k).$$

Mas agora notemos o seguinte, exceto para o caso  $s_b = s_a$ , no limite de  $\gamma \rightarrow \infty$  a quantidade  $\gamma T_\gamma(s_b, s_a)$  ( $s_b \neq s_a$ ) não pode divergir pois, multiplicando a equação (2.14) por  $\gamma$  temos

$$\gamma \psi(\vec{r}(s_b)) = \int_C ds_a [\gamma T_\gamma(s_b, s_c)] \varphi(\vec{r}(s_a); k), \quad (2.20)$$

no limite de  $\gamma \rightarrow \infty$  o primeiro termo da equação acima deve ser finito para que a equação

(2.8) possua solução, logo, o termo  $\gamma T_\gamma(s_b, s_c)$  deve, necessariamente, também ser finito em tal limite.

Então, definindo  $T(s_b, s_a) \equiv -\lim_{\gamma \rightarrow \infty} \gamma T_\gamma(s_b, s_a)$ , teremos

$$\delta(s_b - s_a) = \int_C ds_c T(s_b, s_c) G_0(\vec{r}(s_c), \vec{r}(s_a); k).$$

O calculo é semelhante para a segunda igualdade em (2.11), logo

$$\begin{aligned} \delta(s_b - s_a) &= \int_C ds_c T(s_b, s_c) G_0(\vec{r}(s_c), \vec{r}(s_a)) \\ &= \int_C ds_c G_0(\vec{r}(s_b), \vec{r}(s_c); k) T(s_c, s_a), \end{aligned} \quad (2.21)$$

por questão de simetria de  $G_0$ . Utilizando (2.15) para encontrar a forma de  $\psi(\vec{r})$  quando  $\gamma \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= \varphi(\vec{r}) + \lim_{\gamma \rightarrow \infty} \int_C \int_C ds_b ds_a G_0(\vec{r}, \vec{r}(s_b); k) \gamma T_\gamma(s_b, s_a) \varphi(\vec{r}(s_a)) \\ &= \varphi(\vec{r}) + \int_C \int_C ds_b ds_a G_0(\vec{r}, \vec{r}(s_b); k) \lim_{\gamma \rightarrow \infty} [\gamma T_\gamma(s_b, s_a)] \varphi(\vec{r}(s_a)), \end{aligned}$$

pois  $G_0(\vec{r}, \vec{r}(s_b); k)$  e  $\varphi(\vec{r}(s_a))$  não dependem de  $\gamma$ . Utilizando a definição de  $T(s_b, s_a)$  na equação acima

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= \varphi(\vec{r}) - \varphi^T(\vec{r}) \\ \varphi^T(\vec{r}) &= \int_C \int_C ds_b ds_a G_0(\vec{r}, \vec{r}(s_b); k) T(s_b, s_a) \varphi(\vec{r}(s_a)). \end{aligned} \quad (2.22)$$

Esta é a equação para o cálculo da função de onda  $\psi(\vec{r})$  em todo o espaço após o espalhamento por uma barreira impenetrável de forma  $C$ .

Pode ser verificado facilmente que (2.22) satisfaz a condição de fronteira necessária. Fazendo  $\vec{r} = \vec{r}(s)$  em (2.22)

$$\psi(\vec{r}(s)) = \varphi(\vec{r}(s)) - \int_C \int_C ds_b ds_a G_0(\vec{r}(s), \vec{r}(s_b); k) T(s_b, s_a) \varphi(\vec{r}(s_a)). \quad (2.23)$$

Utilizando (2.21) podemos escrever

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}(s)) &= \varphi(\vec{r}(s)) - \int_C ds_a \delta(s - s_a) \varphi(\vec{r}(s_a)). \\ &= \varphi(\vec{r}(s)) - \varphi(\vec{r}(s)) \\ &= 0, \end{aligned}$$

que satisfaz a condição de fronteira de Dirichlet em  $C$ , como mencionado anteriormente.

Dos resultados obtidos pode-se perceber que o ponto chave do MCP é a introdução da matriz  $T$ , uma vez que sabendo sua forma, as equações (2.15) e (2.22) são de simples resolução. Para a condição de contorno de Dirichlet,  $T$  pode ser obtida através da equação integral (2.21), que revela um aspecto interessante do método. Note que, formalmente, (2.21) pode ser escrita como

$$I_C = T\mathcal{G}_0 = \mathcal{G}_0T$$

na qual,  $I_C$  e  $\mathcal{G}_0$  são restrições dos operadores de identidade e da função de Green livre na fronteira  $C$ . Conseqüentemente,  $T = (\mathcal{G}_0)^{-1}$  é o operador associado à matriz  $T$  (como considerado usualmente em teorias de espalhamento (GOLDBERG; WATSON, 1964; LESSIE; SPADARO, 1986)), definido em  $C$ . Podemos, então, interpretar a solução de (2.22) através de um princípio semelhante ao de Huygens.  $\varphi^T(\vec{r})$ , em qualquer ponto  $\vec{r}$  do espaço é construída a partir das contribuições de “fontes pontuais” ao longo da “frente de onda”  $C$ . Uma fonte pontual inicialmente em  $s_b$  sofre propagação livre, mediada por  $G_0$ , até o ponto final de observação  $\vec{r}$ . Assim,  $\varphi^{(T)}(\vec{r})$  é resultado da soma de todas as contribuições deste tipo. Por sua vez, cada fonte pontual  $s_b$  advém de uma onda incidente  $\varphi$ , que foi espalhada por toda a fronteira. Para um certo  $s_a$ , a matriz  $T$  propaga  $\varphi(\vec{r}(s_a))$  ao ponto  $s_b$ . Assim, a soma sobre todos os  $s_a$ 's leva à construção da fonte pontual  $s_b$ . Na figura 2.2 é mostrado esquematicamente um dos passos deste processo, para  $s_a$  e  $s_b$  fixos.

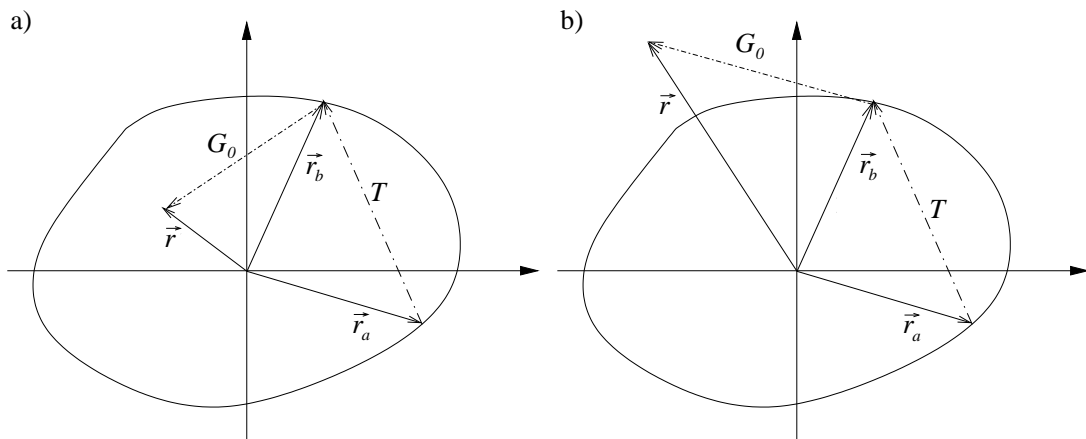


Figura 2.2: Representação esquemática de um dos passos do processo de espalhamento ( $s_a$  e  $s_b$  fixos) na região a) interna e b) externa ao bilhar. A soma de todas as contribuições deste tipo levam à onda espalhada observada no ponto  $\vec{r}$ ,  $\varphi^{(T)}(\vec{r}) = \int_C \int_C ds_b ds_a G_0(\vec{r}, \vec{r}(s_b); k) T(s_b, s_a; k) \varphi(\vec{r}(s_a); k)$ .

O último aspecto matemático do MCP a ser comentado nesta seção é a singularidade de  $T(s_b, s_a; k)$  na sua “diagonal principal”  $s_a = s_b$ . Este fato decorre diretamente da definição da

matriz  $T$ , dada em (2.21) e que pode ser reescrita mais convenientemente como

$$\int_C ds G_0(\vec{r}(s_b), \vec{r}(s)) T(s, s_a) = \delta(s_b, s_a).$$

Primeiramente, note-se que a integral diverge apenas para  $s_a = s_b$ . Além disso, esta é a única situação em que  $T$  e  $G_0$  podem ser zero simultaneamente, quando a variável de integração  $s$  corre sobre  $C$ . Em segundo lugar, como será discutido na próxima seção,  $G_0(\vec{r}(s_b), \vec{r}(s))$  diverge logaritmicamente para  $|\vec{r}(s_b) - \vec{r}(s)| \rightarrow 0$ . Então,  $G_0$  sozinha é integrável, isto é, sua integral sobre  $C$  é finita. A partir destas observações, conclui-se que  $T$  deve possuir uma singularidade. Além disso, ela é localizada em  $s_a = s_b$ , uma vez que é a combinação das singularidades de  $T$  e  $G_0$  que fazem com que a integral divirja. Para uma análise rigorosa sobre os operadores integrais de Helmholtz e suas singularidades, pode-se consultar a referência (AMINI; KIRKUP, 1995).

Em geral, pode ser difícil calcular  $T$  analiticamente. No entanto, será mostrado na seção 2.6 que o método possui uma versão numérica eficiente e de simples implementação para qualquer tipo de fronteira  $C$ .

## 2.3 Alguns resultados analíticos para bilhares

Um bilhar quântico com condição de contorno de Dirichlet é caracterizado por uma curva fechada  $C$ , onde a função de onda se anula. A solução completa deste problema deve englobar tanto os estados de espalhamento externos, quanto os autoestados da parte interna. Nesta seção, será discutido como o MCP funciona para bilhares, mostrando como sua formulação matemática o distingue de métodos como o *boundary integral method* (BIM) (GIPSON, 1987; LI; ROBNIK, 1995; GOLOSKIE et al., 1996; KOSZTIN; SCHULTEN, 1997; HARTMANN, 1997), teoria de perturbação (HACKENBROICH et al., 1998), decomposição por ondas planas (HELLER, 1990; LI et al., 1998), *boundary element method* (TASAKI et al., 1997) e *scaling method* (VERGINI; SARACENO, 1998). Por exemplo, no MCP, diferentemente de métodos como o BIM, para o qual diferentes expressões devem ser derivadas para obter  $\psi(\vec{r})$  dentro e fora da fronteira do espalhador, uma única fórmula fornece a função de onda em todo o espaço. Na verdade, para qualquer energia, a equação (2.22) nos leva, na parte externa, aos autoestados corretos de espalhamento. Na região interna, (2.22) fornece os autoestados exatos sempre que a onda incidente  $\varphi$  possui a autoenergia do problema e que sejam satisfeitas algumas condições de simetria, de outra maneira a solução  $\psi$  resultante é nula.

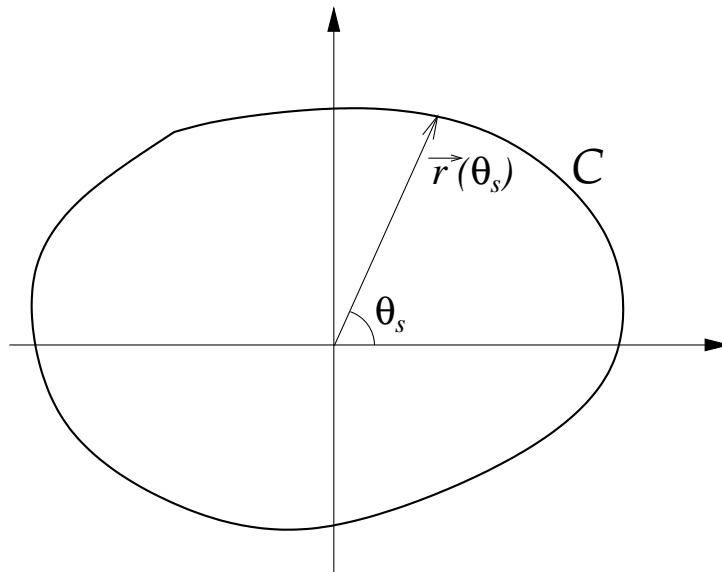


Figura 2.3: Curva convexa fechada formando um bilhar. Cada ponto de  $C$  é parametrizado por um único  $\theta_s$ .

Consideremos um sistema de coordenadas polares, com a origem sempre dentro do bilhar. Sendo assim, cada ponto sobre  $C$  pode ser parametrizado por um par  $(\vec{r}(\theta_s), \theta_s)$ , no qual  $0 \leq \theta_s < 2\pi$ , como representado na figura 2.3. Nossas análises serão restritas a bilhares de forma convexa, para garantir que tenhamos uma correspondência unívoca entre  $s$  e  $\theta_s$ .

A seguir são listadas algumas relações que serão utilizadas nas análises a serem efetuadas:

- (i) No caso bidimensional, a função de Green livre pode ser escrita como (ARFKEN, 1970)

$$G_0(\vec{r}, \vec{r}_0; k) = (4i)^{-1} H_0^{(+)}(k|\vec{r} - \vec{r}_0|),$$

na qual  $H_n^{(\pm)}(z) = J_n(z) \pm iN_n(z)$ , com  $J_n$  e  $N_n$  sendo as funções de Bessel and Neumann de ordem  $n$ . Vale ressaltar que  $N_n(z)$  possui divergência logarítmica para  $z \rightarrow 0$ .

- (ii) Se  $|\vec{r}_0| < |\vec{r}|$ , nós temos (GRADSTHEYN; RYZHIK, 1994)

$$H_0^{(+)}(k|\vec{r} - \vec{r}_0|) = \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \phi_n(\vec{r}_0; k), h_n^{(+)}(\vec{r}; k)$$

na qual  $\phi_n(\vec{r}_0; k) = J_n(kr_0) \exp[-in\theta_0]$  e  $h_n^{(\pm)}(\vec{r}; k) = H_n^{(\pm)}(kr) \exp[in\theta]$ .

- (iii) Considere  $\vec{r}_b(\theta_b)$  o vetor posição de um certo  $s_b$  em  $C$ . Se  $s_b$  não for uma aresta (ponto com derivada divergente), existe sempre um sistema de coordenadas no qual, para qualquer  $\vec{r}_c(\theta_c)$  sobre  $C$ ,  $r_b(\theta_b) \leq r_c(\theta_c)$ . De fato, precisamos apenas tomar a normal à superfície

do bilhar através do ponto  $s_b$  como sendo um dos eixos de coordenadas e então colocar a origem sobre algum ponto de seu prolongamento. Se  $s_b$  for uma aresta do bilhar, escolhendo sistemas de coordenadas dos quais as origens (localizada ao longo da mediatriz da aresta) são cada vez mais próximas de  $s_b$ , a relação acima pode ser violada, pois existem sempre pontos  $s_c$  mais próximos da origem do que  $s_b$ . Então, para a segunda relação em (2.21), podemos assumir que  $r_b(\theta_b) \leq r_c(\theta_c)$ . Substituindo  $H_0^{(+)}$  por sua representação em série mostrada em (ii), multiplicando em ambos os lados por  $\phi_l(\vec{r}_a)$  (para  $l$  arbitrário) e finalmente integrando sobre  $\theta_a$ , encontramos

$$\phi_l(\vec{r}_b; k) = \sum_n \left( \frac{1}{4i} \int_C \int_C d\theta_a d\theta_c h_n^{(+)}(\vec{r}_c; k) T(\theta_c, \theta_a) \phi_l(\vec{r}_a; k) \right) \phi_n(\vec{r}_b; k). \quad (2.24)$$

Como (2.24) é válida para todo  $l$ , esta relação implica que

$$\frac{1}{4i} \int_C \int_C d\theta_a d\theta_c h_n^{(+)}(\vec{r}_c; k) T(\theta_c, \theta_a) \phi_l(\vec{r}_a; k) = \delta_{nl}. \quad (2.25)$$

(iv) Qualquer função bem comportada definida em todo o espaço  $\mathbb{R}^2$  pode ser expandida em termos do conjunto  $\{\phi_n(k)\}$  definido em (ii) (por conveniência, usaremos como base  $\{\phi_n(k)\}$  ao invés da forma mais convencional  $\{\phi_n^*(k)\}$ ). Como  $\varphi$  obedece à equação de Schrödinger para a partícula livre no plano, podemos escrever  $\varphi(\vec{r}; k) = \sum_n c_n \phi_n(\vec{r}; k)$ . Dividiremos, agora  $\varphi$  em duas partes

$$\varphi(\vec{r}; k) = \sum_{n=\{p\}} c_n \phi_n(\vec{r}; k) + \sum_{n=\{q\}} c_n \phi_n(\vec{r}; k).$$

O primeiro termo representa o número máximo dos termos da série original que, quando somados, anulam-se identicamente sobre todos os pontos de  $C$ . Conseqüentemente, o segundo termo não pode ser zero sobre toda a fronteira, pois, neste caso obtemos a solução trivial  $\varphi(\vec{r}; k) = 0$ . Obviamente, se não existir nenhuma subsérie que anule-se em  $C$ , então o conjunto  $\{p\}$  é vazio.

### 2.3.1 Solução interna e mecanismo de filtro

Para o caso interno, nós procuramos  $\psi(\vec{r})$  para cada  $\vec{r} = (r, \theta)$ , pertencente à parte interna do bilhar. Então, para um dado  $\vec{r}$ , consideremos um sistema de coordenadas tal que  $r \leq r_b(\theta_b)$  para qualquer ponto  $s_b$  em  $C$ . Usando (i)-(ii), de onde

$$G_0^{(+)}(\vec{r}, \vec{r}_b; k) = (4i)^{-1} \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \phi_n(\vec{r}; k) h_n^{(+)}(\vec{r}_b; k),$$

e (iv) na equação 2.22, temos

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= \sum_l c_l \phi_l(\vec{r}; k) - \sum_n \phi_n(\vec{r}; k) \frac{1}{4i} \int_C \int_C d\theta_b d\theta_a h_n^{(+)}(\vec{r}_b; k) T(\theta_b, \theta_a; k) \\ &\quad \times \left( \sum_{l=\{p\}} c_l \phi_l(\vec{r}_a; k) + \sum_{l=\{q\}} c_l \phi_l(\vec{r}_a; k) \right). \end{aligned} \quad (2.26)$$

Agora, suponhamos que  $E = k^2$  não é nenhuma das autoenergias do bilhar. Então, o conjunto  $\{p\}$  deve ser nulo, do contrário,  $\sum_{l=\{p\}} c_l \phi_l(\vec{r}; k)$  resolve a equação de Schrödinger e satisfaz a condição de contorno correta, implicando que  $E$  é um autovalor, em contradição com a suposição inicial.

Fazendo a soma do conjunto  $\{p\}$  igual a zero em (2.26) teremos

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= \sum_l c_l \phi_l(\vec{r}) - \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \phi_n(\vec{r}) \frac{1}{4i} \int_C \int_C d\theta_b d\theta_a h_n^{(+)}(\vec{r}_b) T(\theta_b, \theta_a) \left[ \sum_{l=\{q\}} c_l \phi_l(\vec{r}_a) \right] \\ &= \sum_l c_l \phi_l(\vec{r}) - \sum_{l=\{q\}} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_l \phi_n(\vec{r}) \frac{1}{4i} \int_C \int_C d\theta_b d\theta_a h_n^{(+)}(\vec{r}_b) T(\theta_b, \theta_a) \phi_l(\vec{r}_a) \end{aligned}$$

usando 2.25

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= \sum_l c_l \phi_l(\vec{r}) - \sum_{l=\{q\}} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_l \phi_n(\vec{r}) \delta_{nl} \\ &= \sum_l c_l \phi_l(\vec{r}) - \sum_{l=\{q\}} c_l \phi_l(\vec{r}). \end{aligned}$$

Como  $\{p\} = 0$ , o conjunto  $\{q\}$  abrange toda a expansão de  $\varphi(\vec{r})$ , logo,  $\psi(\vec{r}) = 0$  para qualquer ponto da região interna do bilhar. Ou seja, não há autoestados internos quando  $E$  é diferente das autoenergias do bilhar.

Se  $E$  é um autovalor do bilhar,  $\varphi$  pode, ou não, ser separado como mencionado acima, dependendo de certas condições. Se não puder ser feita a separação, mais uma vez  $\{p\}$  é vazio e então  $\psi(\vec{r}) = 0$ . Porém, se ela for possível, a equação (2.26) nos leva a

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= \varphi(\vec{r}) - \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \phi_n(\vec{r}) \frac{1}{4i} \int_C \int_C d\theta_b d\theta_a h_n^{(+)}(\vec{r}_b) T(\theta_b, \theta_a) \sum_{l=\{p\}} c_l \phi_l(\vec{r}_a) - \\ &\quad \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \phi_n(\vec{r}) \frac{1}{4i} \int_C \int_C d\theta_b d\theta_a h_n^{(+)}(\vec{r}_b) T(\theta_b, \theta_a) \sum_{l=\{q\}} c_l \phi_l(\vec{r}_a). \end{aligned}$$



Pela nossa partição, a primeira integral deve anular-se sobre a barreira, uma vez que a integração ocorre sobre esta, então

$$\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) - \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \phi_n(\vec{r}) \frac{1}{4i} \int_C \int_C d\theta_b d\theta_a h_n^{(+)}(\vec{r}_b) T(\theta_b, \theta_a) \sum_{l=\{q\}} c_l \phi_l(\vec{r}_a)$$

Utilizando (2.25), como no caso anterior, temos

$$\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) - \sum_{l=\{q\}} c_l \phi_l(\vec{r}) = \sum_{l=\{p\}} c_l \phi_l(\vec{r}),$$

a qual é uma solução do problema interno.

Resumindo, o MCP apresenta um mecanismo matemático muito interessante para resolução do problema interno de bilhares. A integral para  $\varphi^T(\vec{r})$  na equação (2.22) age como uma espécie de “filtro”, agindo no sentido de extrair qualquer parte da onda incidente que anule-se na fronteira  $C$ , deixando “intocada” a parte restante. Então, escolhendo de maneira apropriada a forma da onda incidente  $\varphi(\vec{r}; k)$  (relacionada com a simetria do bilhar) e sua energia, podemos encontrar os autoestados corretos do sistema.

### 2.3.2 Solução externa e a matriz $S$

A situação descrita na subsecção anterior não se aplica ao caso de espalhamento, pelo seguinte: consideremos  $\vec{r} = (r, \theta)$  numa posição fora do bilhar. Lembrando que a origem do sistema de coordenadas localiza-se no interior do bilhar, é fácil perceber que não existe sistema de coordenadas no qual  $r \leq r_b(\theta_b)$  para todos os pontos  $s_b$  em  $C$ . Logo, não podemos usar na equação (2.22) a mesma expansão para  $G_0$ .

Uma situação interessante surge no limite oposto, ou seja, quando  $r$  é grande o suficiente de modo que, para qualquer  $\vec{r}_b$  em  $C$ , temos  $r \geq r_b(\theta_b)$ . Com a ajuda da expansão de  $G_0^{(+)}(\vec{r}, \vec{r}_b; k) = (4i)^{-1} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \phi_n(\vec{r}_b; k) h_n^{(+)}(\vec{r}; k)$  mostrada em (ii), a equação (2.22) torna-se

$$\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}; k) - \sum_n h_n^{(+)}(\vec{r}; k) \frac{1}{4i} \int_C \int_C d\theta_b d\theta_a \phi_n(\vec{r}_b; k) T(\theta_b, \theta_a; k) \varphi(\vec{r}_a; k). \quad (2.27)$$

No formalismo usual de espalhamento da matriz  $S$ , a função de onda é escrita assintoticamente como

$$\psi_l(\vec{r}; k) = h_l^{(-)}(\vec{r}; k) + \sum_n S_{ln}(k) h_n^{(+)}(\vec{r}; k). \quad (2.28)$$

Fazendo  $\varphi(\vec{r}) = h_l^{(-)}(\vec{r}; k)$  na equação (2.27) e lembrando que  $T(\theta_a, \theta_b) = T(\theta_b, \theta_a)$ , uma comparação com (2.28) fornece

$$S_{ln}(k) = -\frac{1}{4i} \int_C \int_C d\theta_b d\theta_a h_l^{(-)}(\vec{r}_b; k) T(\theta_b, \theta_a; k) \phi_n(\vec{r}_a; k). \quad (2.29)$$

A formula acima é exata e estabelece uma conexão direta entre a abordagem do MCP e o formalismo da matriz  $S$ . Como, para qualquer forma de  $C$ , a matriz  $T$  pode ser calculada numericamente com boa precisão (LUZ et al., 1997), a equação (2.29) é um meio muito útil para se obter a matriz  $S$  para bilhares convexos.

## 2.4 Dualidade dentro-fora

Um aspecto muito interessante do problema de bilhares é a chamada *dualidade dentro-fora* (DORON; SMILANSKY, 1992; ECKMANN; PILLET, 1995; DIETZ et al., 1995), do qual a versão fraca pode ser expressa da seguinte maneira (ECKMANN; PILLET, 1995). Suponha um bilhar, cuja fronteira  $C$  é duplamente diferenciável por partes. Como a matriz do problema de espalhamento exterior é unitária, podemos sempre escrever os autovalores de  $S(k)$  como  $\exp[-i\lambda_j(k)]$ , com  $\lambda_j(k) \in [0, 2\pi)$ . Se, exatamente,  $m$  fases de espalhamento  $\lambda_j$  convergem para  $\pi$  por baixo para  $k \rightarrow k_j$  também por baixo, então o bilhar possui  $m$  estados degenerados da energia  $k_j^2$ . A proposição inversa também é verdadeira. Um ponto importante na formulação acima é que, apesar de as autofases aproximarem de  $2\pi$  quando  $k \rightarrow k_j$ , 1 não é necessariamente um autovalor de  $S(k_j)$ . Quando 1 é um autovalor da matriz  $S$ , ou seja,  $\exp[-i\lambda_j(k)] = 1$ , temos a versão forte da dualidade.

Nesta seção analisaremos a dualidade dentro-fora, a partir do ponto de vista do MCP. Tal análise justifica-se na medida que ela pode trazer uma nova luz ao problema, dando a ele uma perspectiva diferente, construtiva e, talvez, mais intuitiva do que os tratamentos matemáticos e abstratos pelos quais foi analisado até agora (ECKMANN; PILLET, 1995).

### 2.4.1 Autovalores da matriz $S$ e os autoestados da solução interna

Os elementos de matriz do operador de espalhamento são dados pela equação (2.29). Para essa representação e tomando um  $k$  arbitrário, façamos  $\{c_{jl}(k)\}$  o conjunto de coeficientes

do  $j$ -ésimo autovetor de  $S(k)$ . Temos, então,

$$\sum_n S_{ln}(k)c_{jn} = \exp[-i\lambda_j(k)]c_{jl}. \quad (2.30)$$

Como  $S$  é unitária, segue-se que

$$\sum_n c_{jn}^* S_{nl}(k) = \exp[-i\lambda_j(k)]c_{jl}^*, \quad (2.31)$$

na qual  $c^* = c^*(k)$ . Substituindo (2.29) na equação acima

$$\begin{aligned} \sum_l c_{jl}^* S_{ln}(k) &= \sum_l c_{jl}^* \left[ -\frac{1}{4i} \int_C \int_C d\theta_b d\theta_a h_l^{(-)}(\vec{r}_b; k) T(\theta_b, \theta_a) \phi_n(\vec{r}_a; k) \right] \\ &= -\frac{1}{4i} \int_C \int_C d\theta_b d\theta_a \sum_l c_{jl}^* h_l^{(-)}(\vec{r}_b; k) T(\theta_b, \theta_a) \phi_n(\vec{r}_a; k) \\ &= \exp[-i\lambda_j(k)]c_{jn}^*. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Multiplicando (2.25) por  $c_{jl}^*$ , rearranjando os índices e somando em  $l$  temos

$$\sum_l c_{jl}^* \delta_{ln} = \frac{1}{4i} \int_C \int_C d\theta_b d\theta_a \sum_l c_{jl}^* h_l^{(+)}(\vec{r}_b; k) T(\theta_b, \theta_a) \phi_n(\vec{r}_a; k). \quad (2.33)$$

As equações acima são válidas para qualquer  $n$ . Então, necessariamente,

$$\sum_l c_{jl}^* \left[ \exp[-i\lambda_j(k)] h_l^{(+)}(\vec{r}_b; k) + h_l^{(-)}(\vec{r}_b; k) \right] = 0. \quad (2.34)$$

Suponhamos agora que, para  $k \rightarrow k_j$ , exatamente  $m$  fases de espalhamento  $\lambda_j^g(k)$  (com  $g = 1, \dots, m$ ) convergem para  $2\pi$ . A razão pela qual eles tendem a  $2\pi$ , e não a 0, é relacionada a como os autovalores de uma matriz  $S$  geral acumulam em 1. Isto é explicado, por exemplo, na referência (ECKMANN; PILLET, 1995). Utilizando  $h_l^{(\pm)}(\vec{r}_b) = \phi^*(\vec{r}_b) \pm iN_l(kr_b) \exp[i\theta_b]$  e o fato de que para cada  $\lambda_j^g$  existe um conjunto correspondente  $c_{jl}^g$ , consideramos o limite  $k \rightarrow k_j$  em (2.34), ou

$$\lim_{k \rightarrow k_j} \sum_l c_{jl}^g \left\{ \left( \exp[i\lambda_j^g(k)] + 1 \right) - i \left( \exp[i\lambda_j^g(k)] - 1 \right) \frac{N_l(\vec{r}_b; k)}{J_l(\vec{r}_b; k)} \right\} \phi_l(\vec{r}_b; k) = 0. \quad (2.35)$$

Na expressão acima, para cada  $l$  o coeficiente  $c_{jl}^g$  vezes o termo entre  $\{ \}$  tende a algum valor  $d_{jl}^g$ , o qual, **no limite**, independe do ponto  $s_b$  da borda do bilhar. Nós, então, definimos para a região interna

$$\Phi_j^g(\vec{r}) = \sum_l d_{jl}^g \phi_l(\vec{r}; k_j). \quad (2.36)$$

Notemos que, como a expressão acima não envolve nenhuma função de Neumann, ela geralmente não pode representar uma solução de espalhamento da parte externa do bilhar. A equação (2.36) satisfaz a equação de Helmholtz dentro do bilhar e anula-se identicamente em todos os pontos de  $C$ . Logo,  $\Phi_j^g(\vec{r})$  é o problema do  $g$ -ésimo autoestado degenerado da autoenergia  $E_j = k_j^2$ .

Podemos mostrar também que a recíproca é verdadeira. Para tanto, suponhamos um autoestado do bilhar dado por  $\Phi_j(\vec{r}) = \sum_l d_{jl} \phi_l^*(\vec{r})$ , com autovalor  $k = k_j$ . Nós temos que

$$\begin{aligned} \delta_{ln} - S_{ln}(k) &= \frac{1}{4i} \int_C \int_C d\theta_b d\theta_a [h_l^{(+)}(\vec{r}_b) + h_l^{(-)}(\vec{r}_b)] T(\theta_b, \theta_a) \phi_n(\vec{r}_a) \\ &= \frac{1}{2i} \int_C \int_C d\theta_b d\theta_a \phi_l^*(\vec{r}_b) T(\theta_b, \theta_a) \phi_n(\vec{r}_a), \end{aligned} \quad (2.37)$$

onde utilizamos (2.25) e (2.29). Consideremos então

$$\begin{aligned} \sum_l d_{jl} [\delta_{ln} - S_{ln}(k)] &= d_{jn} - \sum_l d_{jl} S_{ln}(k) \\ &= \frac{1}{2i} \int_C \int_C d\theta_b d\theta_a \left[ \sum_l d_{jl} \phi_l^*(\vec{r}_b; k) \right] T(\theta_b, \theta_a) \phi_n(\vec{r}_a; k), \end{aligned}$$

com  $k < k_j$ . Este é um ponto importante, visto que, se fizermos  $k = k_j$ ,  $\sum_l d_{jl}^g \phi_l(\vec{r}_b; k = k_j) = 0$ , e então não poderemos inverter a ordem do somatório e da integral na equação acima, pois, não poderíamos mais afirmar que esta converge uniformemente.

Tomando o limite da equação quando  $k \rightarrow k_j$ , temos

$$\lim_{k \rightarrow k_j} \left[ d_{jn} - \sum_l d_{jl} S_{ln}(k) \right] = \lim_{k \rightarrow k_j} \frac{1}{2i} \int_C \int_C d\theta_b d\theta_a \left[ \sum_l d_{jl} \phi_l^*(\vec{r}_b; k) \right] T(\theta_b, \theta_a) \phi_n(\vec{r}_a; k) = 0,$$

pois  $\sum_l d_{jl} \phi_l^*(\vec{r}_b; k \rightarrow k_j) = 0$ , de 2.34. Então

$$\lim_{k \rightarrow k_j} \sum_l d_{jl} S_{ln}(k \rightarrow k_j) \rightarrow d_{jn}, \quad (2.38)$$

ou seja, **no limite** a equação (2.38) tende a um autosistema de autovalor 1. Porém, os autovalores de  $S$  possuem a forma  $\exp[-i\lambda(k)]$ , o que implica que  $\lambda^g(k \rightarrow k_j) \rightarrow 2\pi$ . Observemos, no entanto, que o conjunto  $d_{jl}^g$  não é necessariamente um autovetor de  $S$ , uma vez que não é assumida a igualdade.

## 2.4.2 Versão forte da dualidade dentro-fora e o princípio da transparência

Fazendo  $k = k_j$  na equação (2.28) e considerando a soma  $\Psi_j^*(\vec{r}) = \sum_l c_{jl}^* \psi_l(\vec{r}; k_j)$ , com  $\{c_{jl}(k_j)\}$  um autovetor de  $S(k_j)$ . Então

$$\sum_l c_{jl}^* \psi_l(\vec{r}) = \sum_l c_{jl}^* h_l^{(-)}(\vec{r}) + \sum_n \sum_l c_{jl}^* S_{ln}(k) h_n^{(+)}(\vec{r}), \quad (2.39)$$

e ainda, utilizando a relação (2.31) na equação acima teremos

$$\Psi_j(\vec{r}) = \sum_l c_{jl}^* h_l^{(-)}(\vec{r}) + \exp[-i\lambda_j] \sum_l c_{jl}^* h_l^{(+)}(\vec{r}). \quad (2.40)$$

Agora, se o autovalor  $\exp[-i\lambda_j(k_j)]$  é exatamente 1, todos os termos dependentes da função de Neumann na equação (2.40) cancelam-se. Conseqüentemente, na região externa a solução toma a forma  $\Psi_j(\vec{r}) = \sum_l c_{jl} \phi_l(\vec{r}; k_j)$ . Além disso, da equação (2.35),  $d_{jl} = c_{jl}$  e da equação (2.36),  $\Phi_j(\vec{r}) = \sum_l c_{jl} \phi_l(\vec{r}; k_j)$  é uma solução para a região interna do bilhar. Então, para ambos os casos foi encontrada a mesma expansão em série, o que significa que a solução interna do bilhar pode ser expandida para a parte externa de  $C$  como um estado de espalhamento. Concluindo, nós obtivemos uma única solução para equação de Helmholtz, que é válida em todo o plano e satisfaz as condições de contorno de Dirichlet em  $C$ . Esta é a versão forte do princípio da dualidade dentro fora para bilhares planos.

O resultado obtido acima é relacionado ao princípio da transparência discutido em (ECKMANN; PILLET, 1995; DIETZ et al., 1995). Sempre que um autovalor de  $S(k = k_j)$  é igual a 1, existem ondas incidentes  $\varphi$  (com  $E = k_j^2$ ), para a qual o obstáculo - o bilhar - torna-se “transparente”. Da mesma maneira, os autoestados de energia  $k_j^2$  “penetram” o bilhar. Porém, se os autovalores de  $S(k = k_j)$  acumulam em 1 mas não são exatamente a unidade, qualquer estado incidente  $k = k_j$  é necessariamente espalhado, enquanto os autoestados correspondentes “permanecem presos” pelo bilhar.

À primeira vista, toda a discussão anterior pode parecer contradizer a equação geral (2.22). De fato, para um  $\varphi$  arbitrário que anula-se na fronteira do bilhar, (2.22) fornece  $\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r})$  para qualquer  $\vec{r}$ , independente do autovalor de  $S$ . O ponto aqui é que, no desenvolvimento do MCP, nós assumimos  $\varphi$  como sendo uma função limitada bem definida em todo o espaço. Na versão fraca da dualidade dentro-fora os autoestados do bilhar não podem ser expandidos no  $\mathbb{R}^2$  ( por eles não possuírem valor único (ECKMANN; PILLET, 1995; DIETZ et al., 1995) ou não-limitados (BERRY, 1994) no exterior do bilhar), por essa razão, autoestados que se estendem por todo o espaço não são uma escolha aceitável para  $\varphi(r)$ .

Para exemplificar o comentado acima, suponhamos o autoestado de um bilhar escrito com a série infinita

$$\Phi(\vec{r}) = \sum_l a_l \phi_l(\vec{r}; k_0),$$

na qual  $k_0$  é o autovalor correspondente. A seguir, emprestamos uma idéia da referência ((DIETZ et al., 1995)) e definimos

$$\Phi_L(\vec{r}) = \sum_{l=-L}^{l=+L} a_l \phi_l(\vec{r}; k_0), \quad (2.41)$$

que resolve exatamente o problema interno quando  $L \rightarrow \infty$ . Porém, na versão fraca da dualidade a equação (2.41) não leva a uma solução correta dos estados de espalhamento na região externa. Este fato pode ser exemplificado pelo *cake billiard*  $C = \{(r, \theta) : r = R, |\theta| < \alpha/2; 0 \leq r \leq R, \theta = \alpha/2; 0 \leq r \leq R, \theta = -\alpha/2\}$ . Seus autoestados são dados por

$$\psi_{nl}(\vec{r}) = \sin[\pi l(\theta/\alpha + 1/2)] J_{\pi l/\alpha}(k_{nl}r),$$

na qual  $J_{\pi l/\alpha}(k_{nl}R) = 0$  (DIETZ et al., 1995). Se  $\frac{\pi l}{\alpha}$  não for um inteiro,  $\psi_{nl}(\vec{r})$  não possui valor único no plano. Por esta razão, uma representação por séries para tal autoestado da parte interna não é bem definida fora de  $C$ , no sentido de que uma série truncada como a da equação (2.41) não converge, quando  $L \rightarrow \infty$ , para uma função bem comportada na região externa. De fato, como mostrado em (DIETZ et al., 1995) através de cálculos numéricos, à medida que  $L$  cresce, a série apresenta oscilações cada vez maiores na parte externa, enquanto converge relativamente rápido para a solução interna. Usando o formalismo do MCP, este comportamento pode ser entendido qualitativamente da seguinte maneira: para  $L$  finito, a equação (2.41) é bem definida em todo o  $\mathbb{R}^2$ . Então, se fizermos  $\varphi(\vec{r}) = \Phi_L(\vec{r})$ , a equação (2.22) nos fornece

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= \sum_{l=-L}^{l=+L} a_l \phi_l(\vec{r}; k_0) - \int_C \int_C ds_b ds_a G_0(\vec{r}, \vec{r}_b; k_0) T(s_b, s_a; k_0) \\ &\quad \times \sum_{l=-L}^{l=+L} a_l \phi_l(\vec{r}_a; k_0). \end{aligned} \quad (2.42)$$

Quando  $L$  cresce,  $\Phi_L(\vec{r}(s))$  tende a zero (pois deve resolver corretamente a solução interna, satisfazendo suas condições de fronteira) e, como conseqüência, a integral na expressão acima tende a zero também. Então,  $\psi(\vec{r})$  demonstra a mesma estabilidade (instabilidade) que a representação por séries da parte interna (externa) quando  $L \rightarrow \infty$ , como foi comprovado numericamente em (DIETZ et al., 1995).

## 2.5 Solução analítica de $T$ para o bilhar circular

Tomando por base as discussões anteriores, percebe-se que soluções analíticas exatas para a matriz  $T$  não são de fácil obtenção, porém, para alguns casos mais simples, podemos chegar a resultados fechados. Apesar de o método possuir uma forma numérica simples e eficiente, soluções analíticas podem auxiliar num melhor entendimento de seu funcionamento e revelar algumas de suas propriedades gerais.

Nesta seção, será calculada a matriz  $T$  para o bilhar circular, obtida com uma expansão envolvendo funções de Bessel. De posse das séries, seremos capazes de realizar análises quantitativas e qualitativas, que nos permitem inferir características importantes da matriz  $T$ .

Considere um bilhar de raio  $R$ , possuindo seu centro localizado na origem de um sistema de coordenadas polares. Devido à simetria do problema, a equação (2.25) pode ser escrita da seguinte maneira

$$\delta_{ln} = \frac{1}{4i} H_l^{(+)}(kR) J_n(kR) \int_0^{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta_b d\theta_a T(\theta_b, \theta_a; k) \exp[i l \theta_b] \exp[-i n \theta_a]. \quad (2.43)$$

De uma inspeção direta, encontramos que a solução de (2.43), satisfazendo a  $T(\theta_b, \theta_a; k) = T(\theta_a, \theta_b; k)$ , é

$$T(\theta_b, \theta_a; k) = \frac{i}{\pi^2} \sum_{m=-\infty}^{m=+\infty} \frac{\exp[im(\theta_b - \theta_a)]}{J_m(kR) H_m^{(+)}(kR)}. \quad (2.44)$$

Inserindo a equação acima em (2.29), é fácil obter a matriz  $S$  exata para o círculo  $S_{ln} = -H_l^{(-)}(kR)/H_l^{(+)}(kR) \delta_{ln}$  (DIETZ; SMILANSKY, 1993).

Para escrever a equação (2.44) numa forma mais apropriada, notemos que  $J_m H_m^{(+)} = J_{|m|} H_{|m|}^{(+)}$ , então ( $\theta = \theta_b - \theta_a$ )

$$T(\theta_b, \theta_a; k) = \frac{i}{\pi^2} \frac{1}{J_0(kR) H_0^{(+)}(kR)} + \frac{2i}{\pi^2} \sum_{m=1}^{m=+\infty} \frac{\cos[m\theta]}{J_m(kR) H_m^{(+)}(kR)}. \quad (2.45)$$

$T$  é simétrica para  $\theta = \pi$  e diverge sempre que  $kR = z_{nm}$  é a  $n$ -ésima raiz de  $J_m$ , o que corresponde ao autovalor  $(z_{nm}/R)^2$  do bilhar circular. Além disso, encontramos da equação (2.45) e do comportamento assintótico da função de Bessel para  $m$  grande (ver abaixo) que  $|T|$  tende ao infinito quando  $\theta = 0$ .

Até onde sabemos, a equação (2.45) não pode ser somada exatamente. Porém, existe um meio numericamente acurado de aproximá-la de uma soma finita. Para tanto, separamos

$T(\theta; k)$  como

$$T(\theta; k) = \frac{i}{\pi^2} \frac{1}{J_0(kR)H_0^{(+)}(kR)} + \frac{2i}{\pi^2} \sum_{m=1}^{M-1} \frac{\cos[m\theta]}{J_m(kR)H_m^{(+)}(kR)} + T_M(\theta; k), \quad (2.46)$$

na qual

$$T_M(\theta; k) = \frac{2i}{\pi^2} \sum_{m=M}^{+\infty} \frac{\cos[m\theta]}{J_m(kR)H_m^{(+)}(kR)}. \quad (2.47)$$

Agora, para  $m \gg 1$ ,  $m/z \gg 1$  e  $z$  não sendo uma raiz da função de Bessel de ordem  $m$ , nós temos (GRADSTHEYN; RYZHIK, 1994)

$$J_m(z) \approx \frac{1}{\sqrt{2\pi m}} \left(\frac{ez}{2m}\right)^{+m}, \quad N_m(z) \approx -\frac{2}{\sqrt{2\pi m}} \left(\frac{ez}{2m}\right)^{-m}. \quad (2.48)$$

Destas relações  $1/[J_m(z)H_m^{(+)}(z)] \approx i\pi m$ . Para um dado  $z = kR$ , suponhamos na equação (2.46)  $M$  grande o bastante tal que as expansões assintóticas (2.48) valem para qualquer  $m \geq M$ , então

$$T_M(\theta) \approx -\frac{2}{\pi} \sum_{m=M}^{m=\infty} m \cos[m\theta] = \frac{i}{\pi} \frac{\partial}{\partial \theta} \sum_{m=M}^{m=\infty} \left( \exp[im\theta] - \exp[-im\theta] \right). \quad (2.49)$$

O último termo da equação acima pode ser calculado exatamente, logo

$$T_M(\theta) \approx \frac{1}{2\pi \sin^2[\theta/2]} \left( M \cos[(M-1)\theta] - (M-1) \cos[M\theta] \right). \quad (2.50)$$

Notemos que na equação (2.50)  $T_M$  não depende de  $kR$  e diverge para  $\theta = 0$  (ou seja,  $\theta_b = \theta_a$ ).

A equação (2.46), com  $T_M$  dada por (2.50), conduz a resultados numéricos muito bons para os elementos da matriz  $T$  desde que, para cada  $z = kR$ , nós escolhamos propriamente o parâmetro de truncamento  $M$ . Por exemplo, para  $z \leq 8$  e  $m \geq M = 500$ , temos sempre  $|1 - i\pi m J_m(z)H_m^{(+)}(z)| \leq 10^{-4}$ . Esta diferença torna-se cada vez menor à medida que  $m$  aumenta. Como exemplo, consideremos o intervalo  $7 \leq kR \leq 7,6$ , no qual existem apenas duas raízes da função de Bessel,  $z_{21} = 7,015(\dots)$  e  $z_{14} = 7,588342(\dots)$ . Na figura 2.4 é mostrado  $|T(\theta; k)| \times \theta$  para  $kR = 7,3$  e  $kR = 7,5883$ . Como  $T$  diverge na origem, o gráfico inicia-se em  $\theta = \frac{\pi}{1000}$ . O primeiro  $kR$  é localizado no centro do intervalo entre as duas raízes  $z_{21}$  e  $z_{14}$ , por isso, longe de alguma ressonância de  $T$ . Por outro lado, o segundo  $kR$  é muito próximo de  $z_{14}$ . Nos gráficos de 2.4 foi utilizado  $M = 500$  e rotinas numéricas padrão para o cálculo das funções de Bessel. Tais resultados foram também testados cuidadosamente para resultados de convergência. De fato, usando diferentes valores de  $M > 500$ , maior que 1000, não foi praticamente encontrada



diferença entre as curvas quando superpostas.

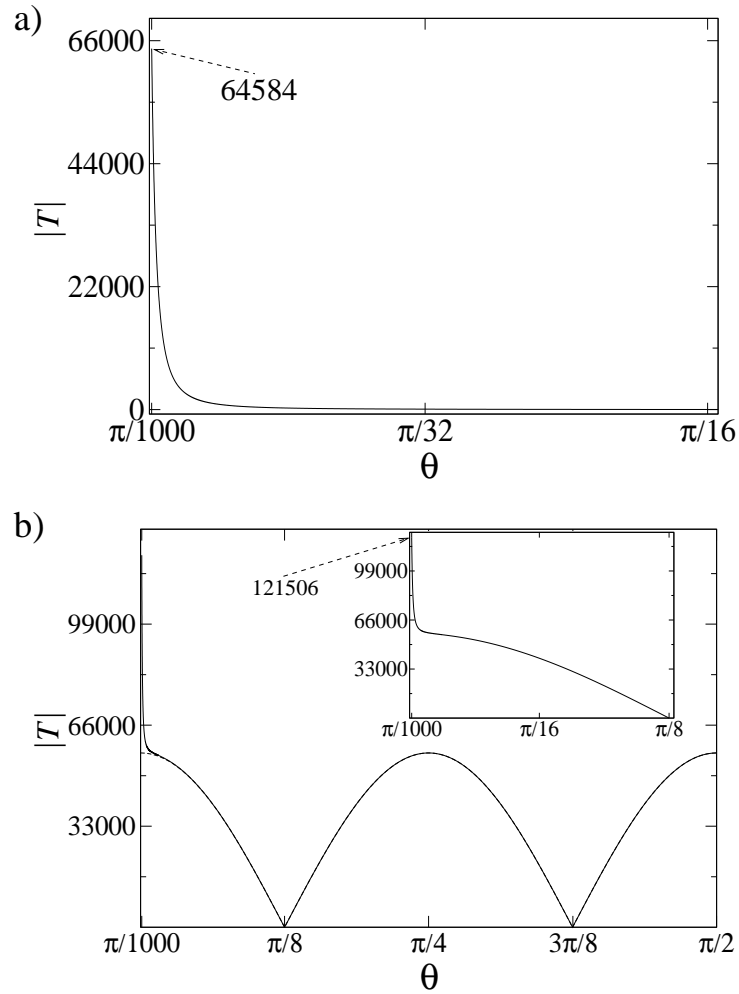


Figura 2.4: Matriz  $|T(\theta)|$  (curva contínua) para a)  $kR = 7,3$  e b)  $kR = 7,5883$ . Em b) a curva tracejada refere-se ao termo  $(2/\pi^2)|\cos[4\theta]/[J_4(7,5883)H_4^{(+)}(7,5883)]|$ . O detalhe mostra uma magnificação da curva na região  $\frac{\pi}{1000} \leq \theta \leq \frac{\pi}{8}$ ,

Caso instrutivo é a comparação das duas situações da figura 2.4. Consideremos primeiramente 2.4.b) a qual, como mencionado, localiza-se nas proximidades da ressonância  $z_{14}$ . Da equação (2.46) encontramos que, quando  $z \approx z_{nm}$  e  $\theta$  não está próximo de 0, o termo  $\cos[m\theta]/[J_m(kR)H_m^{(+)}(kR)]$  é o de maior contribuição em  $T$ . Isto é ilustrado na figura 2.4.b) quando plotamos  $(2/\pi^2)|\cos[4\theta]/[J_4(7,5883)H_4^{(+)}(7,5883)]|$ . As duas curvas praticamente não podem ser diferenciadas, a menos das proximidades da origem, onde  $\theta \rightarrow 0$ . Então, quando  $kR$  aproxima-se de uma ressonância, os elementos da matriz  $T$  não se concentram mais em algum intervalo particular de  $\theta$ . Ao invés disto, eles desenvolvem uma estrutura periódica, determinada pela simetria da ressonância em questão. A forma da matriz  $T$  define como a fronteira do bilhar irá espalhar a onda incidente  $\varphi$ , como é observado na equação (2.22). Considerando o princípio de Huygens discutido anteriormente, podemos entender este padrão construído por  $T$  ao longo

de  $C$  como necessário para formar as interferências construtivas que originarão os autoestados corretos da solução interna do bilhar.

Para o caso longe da ressonância a situação é muito diferente. Para  $kR = 7,3$ , figura 2.4.a),  $T(\theta)$  é muito grande para  $\theta$  pequeno e decai muito rapidamente para  $\theta$  afastando-se da origem. Então, os elementos significantes na matriz  $T$  estão altamente concentrados em volta da diagonal principal, formando uma estrutura de banda nas proximidades de  $|\theta_b - \theta_a| \approx 0$ . Deste modo, dentro do bilhar o processo de espalhamento do estado inicial  $\varphi$  é dado apenas por uma reflexão especular. Na verdade, a forma exata da fronteira  $C$  não é evidenciada por  $T(\theta = \theta_b - \theta_a; k)$ , uma vez que esta assemelha-se a função delta. Usando este argumento ( $T \rightarrow \delta$ ), podemos escrever (2.22), para  $T$  longe da ressonância, como

$$\varphi^{(T)}(\vec{r}) = \int_C ds_b G_0(\vec{r}, \vec{r}_b; k) \varphi(\vec{r}_b; k).$$

Uma vez que, para  $\vec{r} \neq \vec{r}_b$ ,  $G_0$  satisfaz a equação de Helmholtz, podemos aplicar  $(\nabla^2 + k^2)$  em ambos os lados da relação anterior e obter  $(\nabla^2 + k^2)\varphi^{(T)}(\vec{r}; k) = 0$ , o que também é satisfeito pela onda incidente  $\varphi$ . Além disso,  $\varphi^{(T)}(\vec{r}; k) = \varphi(\vec{r}; k)$  para qualquer ponto  $s$  em  $C$  (lembrando que  $\psi(\vec{r}) = 0$ ). Então,  $\varphi^{(T)}(\vec{r}) = \varphi(\vec{r})$  para qualquer  $\vec{r}$  na região interna do bilhar. Fazendo  $\Phi(\vec{r}; k) = \varphi(\vec{r}; k) - \varphi^{(T)}(\vec{r}; k)$ , por construção, esta solução satisfaz a equação de Helmholtz dentro do bilhar e anula-se sobre sua borda. Porém,  $k$  não é um autovalor do problema, logo, a única possibilidade para  $\Phi$  é ser identicamente nulo, o que leva a  $\varphi^{(T)}(\vec{r}; k) = \varphi(\vec{r}; k)$ . Deste modo, obtemos a interferência destrutiva  $\psi(\vec{r}) = \varphi^{(T)}(\vec{r}; k) - \varphi(\vec{r}; k) = 0$ . Este mesmo argumento não funciona para a parte externa, uma vez que, neste caso,  $\Phi$  não é necessariamente nulo.

O comportamento geral da matriz  $T$ , apesar de obtido para um caso particular, é observado para qualquer tipo de bilhar. Uma matriz  $T(s_b, s_a; k)$ , singular na diagonal principal  $s_b = s_a$ , apresenta um decaimento rápido quando  $|s_b - s_a|$  aumenta, resultando em reflexões especulares na região interna o que leva a  $\psi = 0$ . Quando  $k$  aproxima-se de uma ressonância, é necessária a formação de um padrão na estrutura dos elementos da matriz para a construção dos autoestados corretos. Estas características valem tanto para bilhares convexos, quando para côncavos. Tais resultados podem ser encontrados para vários tipos de geometrias nas referências (ZANETTI, 2004) e (ZANETTI et al., fevereiro/2007).

## 2.6 Tratamento numérico

Como enfatizado nas seções anteriores, a idéia por trás do MCP é calcular  $T$  sobre a barreira espalhadora  $C$  e inserí-la em (2.15), obtendo assim a função de onda espalhada em

todo o espaço. Apesar da formulação do método não ser complicada, são poucos os casos que apresentam solução analítica. Para estas situações é possível derivar uma abordagem numérica do método.

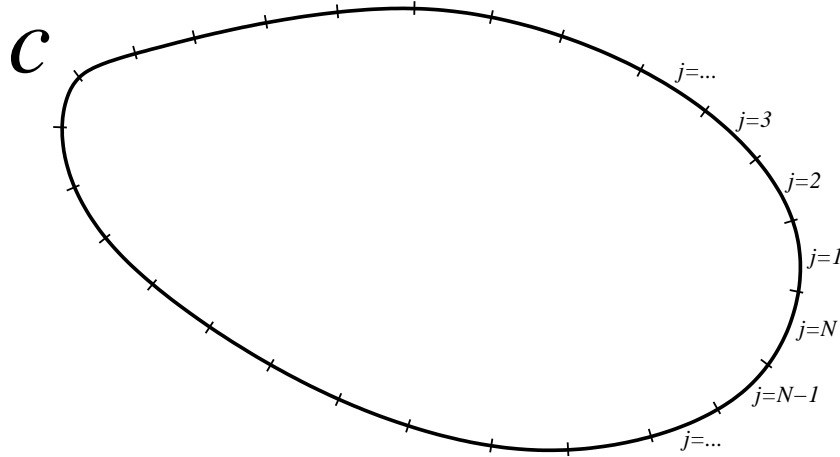


Figura 2.5: Discretização da curva  $C$ .

Na equação (2.8),  $C$  é dividido em  $N$  partes,  $\{C_j\}_{j=1,2,\dots,N}$  (ver figura 2.5), onde agora a integral de volume é feita sobre cada elemento  $j$

$$\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) + \sum_{j=1}^N \int_{C_j} ds \gamma G_0(\vec{r}, \vec{r}(s)) \psi(\vec{r}(s); k). \quad (2.51)$$

Por uma questão de simplicidade,  $\gamma$  é feito constante sobre o contorno  $C$ . Fazendo  $\vec{r}(s) = \vec{r}(s_j) = \vec{r}_j$  e  $\vec{r} = \vec{r}_i$

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}_i) &= \varphi(\vec{r}_i) + \sum_{j=1}^N \int_{C_j} ds \gamma G_0(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \psi(\vec{r}_j) \\ &= \varphi(\vec{r}_i) + \sum_{j=1}^N \gamma M_{ij} \psi(\vec{r}_j), \end{aligned} \quad (2.52)$$

com

$$M_{ij} = \int_{C_j} ds G_0(\vec{r}_i, \vec{r}_j). \quad (2.53)$$

Se  $\Psi = (\psi(\vec{r}_1), \dots, \psi(\vec{r}_N))$  e  $\Phi = (\varphi(\vec{r}_1), \dots, \varphi(\vec{r}_N))$ , a equação (2.52) toma a forma matricial

$$\Psi = \Phi + \gamma \mathbb{M} \Psi.$$

Isolando  $\Psi$  na equação anterior

$$\Psi = \Phi [\mathbb{I} - \gamma \mathbb{M}]^{-1},$$

multiplicando ambos os lados por  $\gamma$

$$\gamma \Psi = \mathbb{T} \Phi, \quad (2.54)$$

onde  $\mathbb{T} = \gamma [\mathbb{I} - \gamma \mathbb{M}]^{-1}$ , que é a forma discretizada da matriz  $T$ . O mesmo resultado pode ser obtido a partir da equação (2.9).

Tomando o  $i$ -ésimo elemento da matriz coluna  $\Psi$  em (2.54)

$$\gamma \Psi_i = (\mathbb{T} \Phi)_i = \gamma \sum_{j=1}^N [(\mathbb{I} - \gamma \mathbb{M})^{-1}]_{ij} \Phi_j, \quad (2.55)$$

na qual  $\Psi_i = \psi(\vec{r}_i)$  e  $\Phi_j = \phi(\vec{r}_j)$ . Então,  $\gamma \psi(\vec{r}(s_j)) = \gamma \psi(\vec{r}_j) = \gamma \Psi_j$ . Substituindo  $\gamma \Psi_j = (\mathbb{T} \Phi)_j$  em (2.52)

$$\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) + \sum_{j=1}^N \int_{C_j} ds G_0(\vec{r}, \vec{r}_j) (\mathbb{T} \Phi)_j. \quad (2.56)$$

Aproximando o resultado da integral na equação acima por seu valor no ponto médio do segmento  $C_j$  e definindo  $\Delta_j$  como seu volume, é obtida a forma discretizada da equação (2.15)

$$\psi(\vec{r}) \approx \varphi(\vec{r}) + \sum_{j=1}^N G_0(\vec{r}, \vec{r}_j) \Delta_j (\mathbb{T} \Phi)_j. \quad (2.57)$$

Esta é a aproximação numérica da função de onda espalhada  $\psi(\vec{r})$  em todo o espaço. A matriz  $\mathbb{M}$  (2.53) pode ser resolvida da mesma maneira feita logo acima para  $\psi$ , logo

$$M_{ij} \approx G_0(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \Delta_j. \quad (2.58)$$

No problema de espalhamento em duas dimensões, esta aproximação trará problemas quando  $i = j$ , pois a função de Green da partícula livre é proporcional a função de Neumann  $N(kr)$  (ARFKEN, 1970; BYRONA et al., 1992), que no caso de  $r = 0$  ( $r = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ ), não é definida. Por este motivo, é necessário calcular explicitamente a integral (2.53) para os elementos da diagonal de  $\mathbb{M}$ .

Para o caso da barreira infinita ( $\gamma \rightarrow \infty$ ) descrito pela equação (2.22),  $\mathbb{T} \rightarrow -\mathbb{M}^{-1}$  (ver

forma de  $\mathbb{T}$ ), então de (2.57)

$$\psi(\vec{r}) \approx \varphi(\vec{r}) - \sum_{j=1}^N G_0(\vec{r}, \vec{r}_j) \Delta_j (\mathbb{M}^{-1} \Phi)_j, \quad (2.59)$$

que é a equação para a autofunção  $\psi(\vec{r})$  de uma partícula espalhada por uma barreira impenetrável  $C$ .

Na referência (LUZ et al., 1997) são feitas análises para a performance do método utilizando as duas formas de obter-se  $\mathbb{M}$ , resolvendo explicitamente a integral de (2.53) e por uma aproximação de valor médio (2.58). Nesta análise conclui-se que a aproximação numérica garante bons resultados, além de deixar o método mais fácil e rápido na sua execução computacional.

Em princípio, (2.59) aproxima-se da solução exata de  $\psi(\vec{r})$  à medida que  $N \rightarrow \infty$ , ou seja, quando a discretização da barreira espalhadora aproxima-se cada vez mais da forma exata. Porém, quanto maior  $N$ , maiores são as matrizes envolvidas nos cálculos numéricos. É necessário então saber dividir  $C$  de modo que  $N$  seja grande o suficiente para satisfazer o limite para a validade do resultado de  $\psi$  e, ainda assim, não tão grande a ponto de comprometer o uso computacional do método. O modo mais fácil de avaliar o número de divisões da barreira que otimiza tanto o resultado numérico, quanto a performance computacional, é observando que o método traz bons resultados para (ZANETTI et al., fevereiro/2007)

$$\frac{ds}{\lambda} < 10^{-1},$$

onde  $ds = \frac{l}{N}$  (perímetro  $l$  de  $C$  dividido pelo número de discretizações  $N$ ) e  $\lambda = \frac{2\pi}{k}$  é o comprimento de onda da onda incidente. Ou seja,  $\lambda$  deve ser maior que os elementos  $ds$  da discretização para a onda considerar o espalhador como uma parede, e não haver “vazamento” da função de onda através da fronteira.

## 2.7 Conclusões Parciais

Este capítulo foi dedicado a uma minuciosa apresentação analítica do método de contorno de paredes. Inicialmente foi mostrado seu equacionamento básico e, como a partir de uma única equação ((2.15) para paredes permeáveis e (2.22) rígidas), pode-se encontrar a solução de espalhamento para qualquer ponto do espaço. No caso de paredes fechadas, o método fornece a solução de espalhamento para a parte externa e os autoestados corretos para a parte interna.

O elemento mais importante do método foi mostrado ser a matriz  $T$ . A partir de

análises de sua ação em bilhares fechados convexos foi possível obter, através de uma formulação mais física e intuitiva do que a comumente encontrada na literatura, interpretações para problemas como a dualidade dentro-fora e princípio da transparência, além de sua relação com o formalismo de espalhamento da matriz  $S$ . Através da resolução analítica do bilhar circular, foram avaliadas características da matriz  $T$ , como seu comportamento na vizinhança de ressonâncias do problema interno, que pode ser muito útil na determinação do espectro de autoenergias da geometria estudada.

Por fim, foi obtida uma forma numérica eficiente e de simples implementação, a qual será utilizada durante todo o trabalho.

### 3 Cristais Fotônicos

Propostos na década de 80 (JOHN, 1987; YABLONOVITCH, 1987), baseando-se no paralelismo entre os fenômenos que se dão para elétrons em meios semi-condutores, os *photonic band gap materials*, mais conhecidos como cristais fotônicos, consistem de um arranjo periódico de espalhadores dielétricos, organizados em matrizes dielétricas homogêneas, com parâmetro de rede de ordem comparável ao comprimento de onda da luz incidente (JOANNOPOULOS et al., 1997b).

Para certas faixas de frequências dos fótons incidentes, a estrutura dielétrica periódica não permite modos propagantes em seu interior, formando bandas de energia proibidas no cristal fotônico. Esta região do espectro é chamada banda proibida (*photonic band gap*). Quando não é permitida a propagação de fótons incidentes de qualquer direção, a banda é dita completa, e neste caso o fluxo de energia incidente é quase totalmente refletido (YABLONOVITCH, 1987).

O ponto mais promissor na utilização dos cristais fotônicos é a inserção de impurezas ou defeitos intencionais na periodicidade das redes. Fazendo essas modificações no arranjo podem ser introduzidos certos modos propagantes (estados localizados) na banda proibida. A natureza dos modos varia com o tipo de defeito/impureza inserido na rede, que pode agir como uma micro-cavidade ressonante, uma guia de onda ou um espelho (JOANNOPOULOS et al., 1997b; JOHNSON; JOANNOPOULOS, 2003). Tais estruturas possibilitam a construção de dispositivos extremamente eficientes na manipulação e controle de fótons, fato que vem sendo utilizado na construção de dispositivos tais como as fibras de cristais fotônicos (*photonic crystal fibers*) (KNIGHT et al., 2002; ARRIAGA et al., 2004), guias de onda (VOLKOV; BOZHEVOLNYI, 2005), etc.

O método mais comumente empregado na resolução teórica dos cristais fotônicos é utilizar a analogia existente entre ondas eletromagnéticas e elétrons propagando-se em meios periódicos. Para tanto, as Equações de Maxwell que resolvem essas estruturas, para uma frequência fixa  $\omega$ , devem ser obtidas em forma de equações de autovalores de um operador hermitiano (JOANNOPOULOS et al., 1997b; JOHNSON; JOANNOPOULOS, 2003). Obtendo

as equações desse modo teremos ao fim que resolver uma equação muito similar à Equação de Schrödinger.

No caso de cristais fotônicos bidimensionais formados por cilindros, ver figura 3.1, a equação de autovalores se reduz a equação de Helmholtz (MIROSHNICHENKO; KIVSHAR, 2005), com  $k^2 = \epsilon\omega^2/c^2$ , sendo  $\epsilon$  a constante dielétrica do cristal (material não-magnético,  $\mu = 1$ ). Este resultado é válido tanto para o campo  $\vec{E}(\vec{r})$ , quanto para  $\vec{H}(\vec{r})$  (JOANNOPOULOS et al., 1997a; JOHNSON; JOANNOPOULOS, 2003; ROUNDY; JOANNOPOULOS, 2003).

Tratamentos através de técnicas de espalhamento vêm se tornando alternativas comuns na resolução de cristais fotônicos (MELLO; TOMSOVIC, 1992-II; LI; ZHANG, 1998-I; KWAN et al., 2003; BOTTEN et al., 2004a, 2004b). Este fato, juntamente com a análise acerca das similaridades dos problemas de espalhamento de elétrons e fótons em redes bidimensionais, são grandes incentivos na utilização do MCP na solução de estruturas que assemelhem-se a cristais fotônicos.

No trabalho desenvolvido, será utilizado primeiramente o tratamento para o espalhamento por barreiras impermeáveis  $\gamma \rightarrow \infty$ . Esta escolha justifica-se à medida que, para evitar perdas no substrato ou para obter bandas proibidas maiores no cristal, a diferença entre as constantes dielétricas do meio condutor e da estrutura do espalhador deve ser a maior possível (JOANNOPOULOS et al., 1997b), com o caso ideal sendo aquele em que a diferença tende a infinito. Para efeito de comparação dos nossos resultados com abordagens através de outros métodos encontrados na literatura, serão também simuladas estruturas onde a permeabilidade das componentes da rede é finita.

A onda incidente utilizada em todas as simulações tem a forma  $\varphi(\vec{r}; k) = \exp[-ikx]$ . Todos os gráficos mostrados são normalizados por seu respectivo máximo e as matrizes  $M(i, j)$ ,  $\Psi(r_{i,j}^{\vec{r}})$  têm tamanho  $2500 \times 2500$ .

## 3.1 Cristais fotônicos ordenados impermeáveis ( $\gamma \rightarrow \infty$ )

### 3.1.1 Rede com guia de onda tipo $\pi/2$

Primeiramente será discutido um cristal fotônico, de extensão finita, com uma curva de defeitos de forma  $\pi/2$  do *tipo-ar*, isto é, alguns dos cilindros são retirados formando uma guia de onda através da estrutura, ver figura 3.1. Este é um sistema que já vem sendo estudado há muito tempo, tanto teórica (MINGALEEV; KIVSHAR, 2002; JOHNSON; JOANNOPOULOS, 2003; MIROSHNICHENKO; KIVSHAR, 2005) como experimentalmente (LIN et al., 1998).



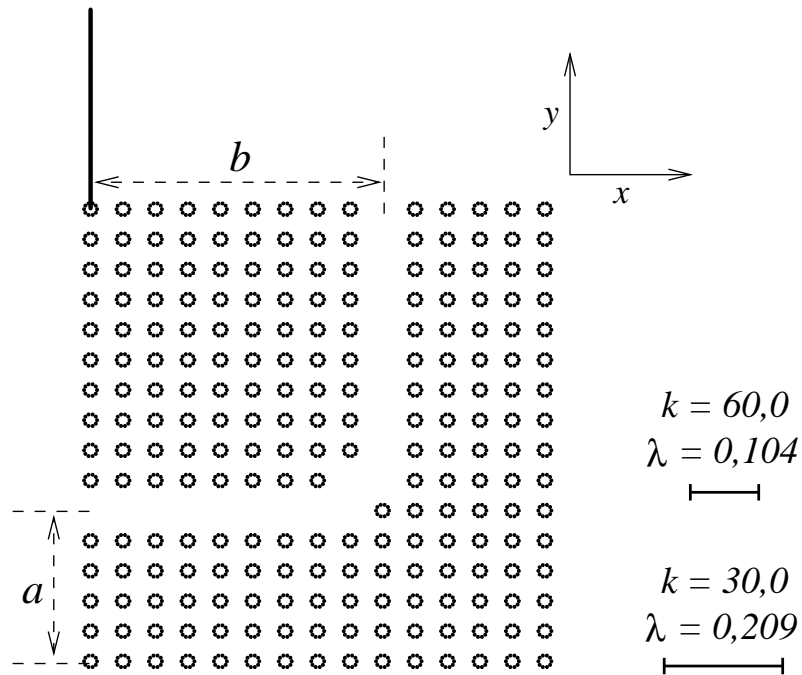


Figura 3.1: Esquema do cristal fotônico bidimensional com uma guia de onda formada por linhas de defeitos tipo-ar. A estrutura é constituída por cilindros de raio  $r = 0,01$  e parâmetro de rede  $5r$ . As distâncias características mostradas são  $a = 0,25$  e  $b = 0,45$ . São mostrados ainda os comprimentos de onda  $\lambda$  e números de onda  $k$  utilizados nas simulações. A parede vertical acoplada ao fim da rede no eixo-y, serve apenas para evitar que a onda espalhada externa interfira com a transmitida pela guia de onda. Todas as medidas são dadas em unidades arbitrárias.

Como a onda incide na parte esquerda da rede (propaga-se na direção positiva do eixo- $x$ ), foi adicionada uma parede impermeável na sua parte superior esquerda. Essa parede auxilia no sentido de bloquear a onda espalhada pela parte externa, impedindo que ela interfira com o fluxo na saída da guia de onda, e garantindo que apenas contribuições da transmissão estejam sendo analisadas na solução.

Foram feitas simulações numéricas para um grande conjunto de energias (representadas pelo número de onda  $k = 2\pi/\lambda$ ), porém, aqui serão mostrados apenas dois casos representativos:  $k = 30$  ( $\lambda = 0,209$ ), onde não existe transmissão através da guia de onda;  $k = 60$  ( $\lambda = 0,104$ ), valor para o qual foi obtida a melhor transmissão.

Na figura 3.2 é mostrado o gráfico de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  em duas dimensões para o caso da onda incidente com  $k = 30$ , onde  $\lambda$  é aproximadamente duas vezes a largura da guia de onda. Pode-se observar que o campo é nulo dentro de toda a estrutura, inclusive na região da guia de onda, como é mostrado nos “cortes” unidimensionais feitos ao longo do seu comprimento. Fora do cristal a solução é a de espalhamento estacionário, como esperado para o

problema independente do tempo.

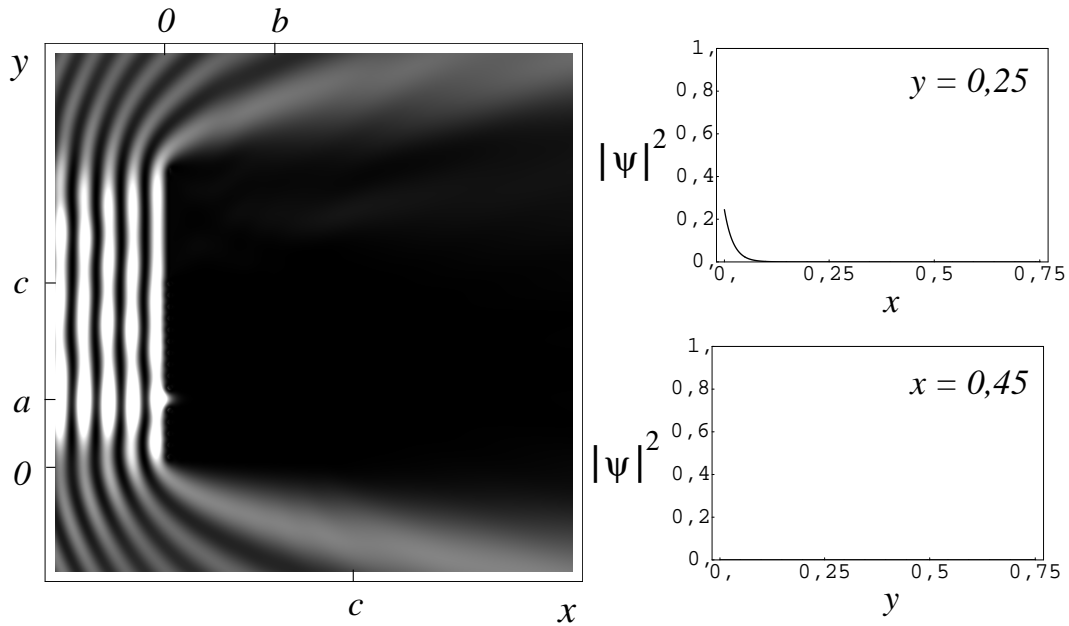


Figura 3.2: Gráfico 2D de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para onda incidente com  $k = 30$ . Regiões claras correspondem aos máximos normalizados. São mostrados ainda “cortes” de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para  $y = a = 0,25$  e  $x = b = 0,45$ , centro do primeiro e segundo corredor, respectivamente. Os pontos  $c$  marcam o final da estrutura.

A figura 3.3 mostra a mesma situação que a anterior para uma onda incidente com  $k = 60$ . Neste caso,  $\lambda$  é aproximadamente igual a largura da guia, o que favorece a transmissão. A intensidade da transmissão diminui quando passa do primeiro para o segundo segmento da linha de defeitos, sendo que o maior pico do primeiro é aproximadamente quatro vezes maior que o pico mais pronunciado do segundo. Este resultado pode ser melhor visualizado no gráfico em três dimensões mostrado na figura 3.3; essa figura mostra também que a intensidade do campo  $|\psi(\vec{r})|^2$  no resto do cristal é praticamente nula. Observa-se na saída da guia de onda vertical que a onda transmitida sofre um ligeiro aumento de intensidade, um tipo de “efeito de chama de vela” (*candle flame effect*). Este comportamento é devido ao fato de que, chegando no fim da estrutura, o número de espalhadores à frente da onda transmitida diminui até anular-se, diminuindo assim o espalhamento no sentido contrário à sua propagação (*back scattering*) e, conseqüentemente, aumentando a amplitude na saída da guia.

À medida que a energia da onda incidente aumenta, seu comprimento de onda  $\lambda$  diminui e vai equiparando-se às escalas da estrutura. A partir de certo ponto, a onda não “enxerga” mais a borda da guia como uma estrutura contínua (como no caso mostrado em 3.3), o que acarreta a possibilidade de a onda não ser mais aprisionada totalmente na guia, ou seja, ela adquire a possibilidade de penetrar pelo resto da rede, causando a diminuição da amplitude de trans-

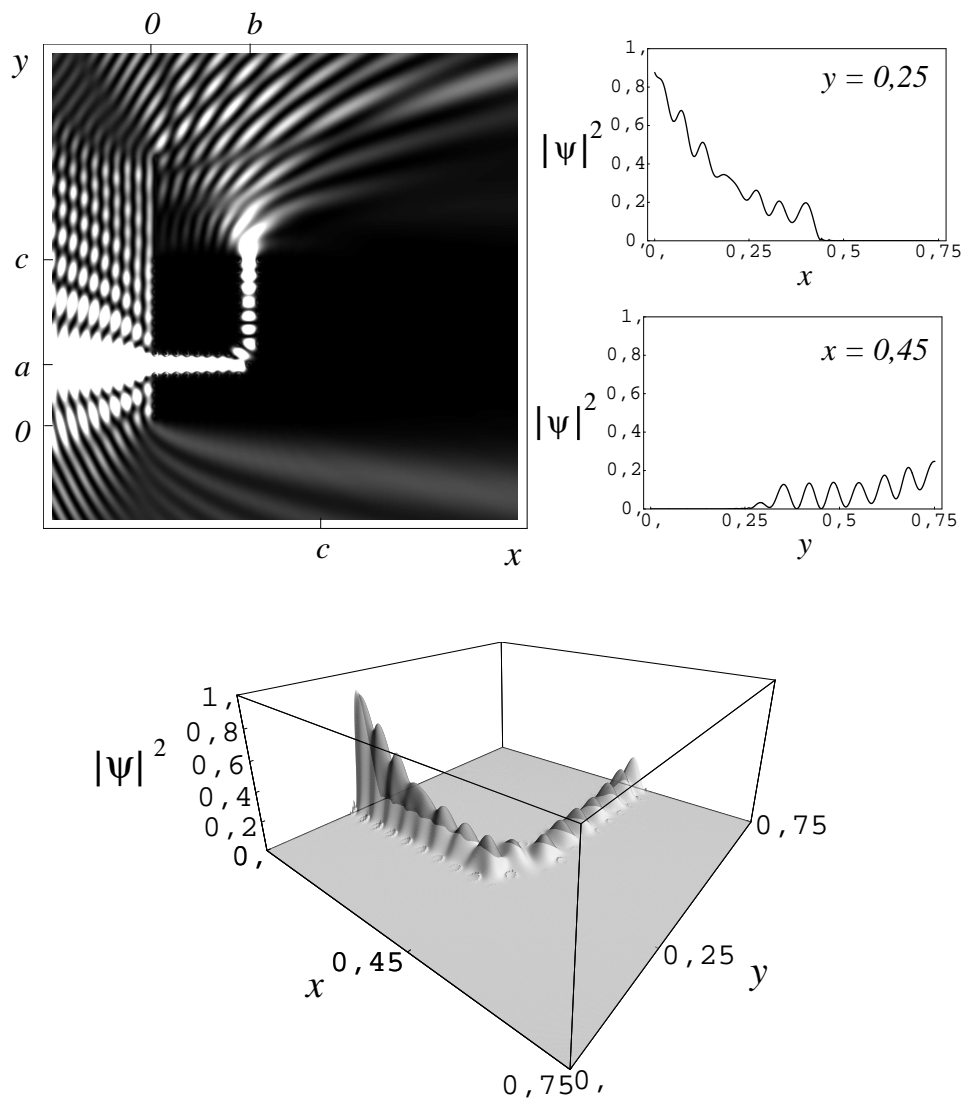


Figura 3.3: Mesmo que para a figura 3.2 com  $k = 60$ . Aqui é mostrado também o gráfico tridimensional de  $|\psi(\vec{r})|^2$ .

missão e o aumento do espalhamento na região interna à guia, o que faz crescer a possibilidade de espalhamento contrário, causando efeitos de interferência destrutiva. Este comportamento começa ser observado para  $k \approx 90,0$ , quando o valor do comprimento de onda  $\lambda$  aproxima-se da medida da separação entre os círculos, como será observado a seguir.

### 3.1.2 Rede com guia de onda tipo *Interferômetro*

Nessa seção é proposto e analisado um cristal fotônico cuja estrutura possui a disposição das linhas de defeitos, tal que a guia de onda funcione como um *interferômetro*, ver figura 3.4. A estrutura é construída da seguinte maneira: duas guias de onda horizontais de comprimento

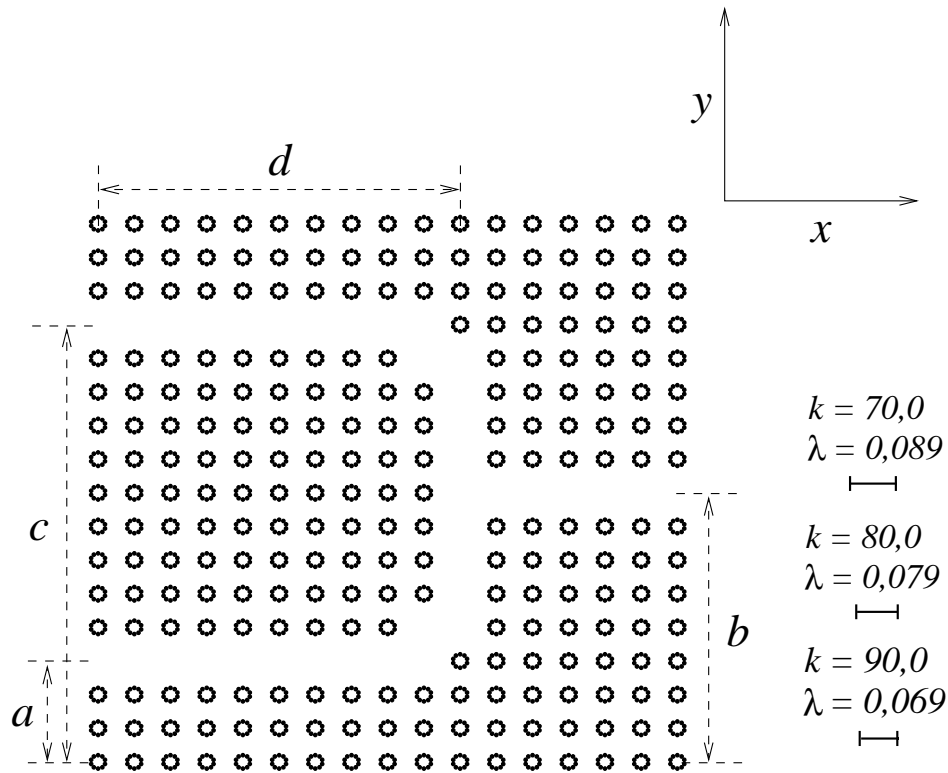


Figura 3.4: Esquema do cristal fotônico com uma guia de onda do tipo interferômetro formada por linhas de defeitos. Novamente são utilizados raio  $r = 0,01$  e parâmetro de rede  $5r$ . As distâncias características mostradas são  $a = 0,15$  e  $b = 0,4$ ,  $c = 0,75$  e  $d = 0,5$ . São mostrados os comprimentos de onda correspondentes a  $k = 70$ ,  $k = 80$  e  $k = 90$ .

$d$ , começando em  $x = 0$ , são ligados por uma linha de defeitos vertical, de onde sai outra guia horizontal na posição  $y = b$ , indo até o final da estrutura.

Primeiro, será analisada a ação da variação da energia da onda incidente (variação do valor de  $k$ ) na transmissão do modo ressonante através da guia de onda. Para tanto, foram escolhidos três valores de energia próximos (pode-se ver na figura 3.4 a pouca diferença no tamanho dos comprimentos de onda das três energias), mas que ainda assim mostram comportamentos diferenciados.

Na figura 3.5 é mostrado  $|\psi(\vec{r})|^2$  para  $k = 70$ ,  $k = 80$  e  $k = 90$ , respectivamente. Para uma melhor percepção do padrão de intensidades que o campo assume na guia de onda são mostrados dois “cortes” unidimensionais: na guia de entrada, localizada  $y = a$ ; e na guia de saída, localizada em  $y = b$ . Não é mostrado corte para a segunda guia de entrada  $y = c$ , pois, por questão de simetria o perfil da onda deve ser igual à primeira, o que foi verificado nas

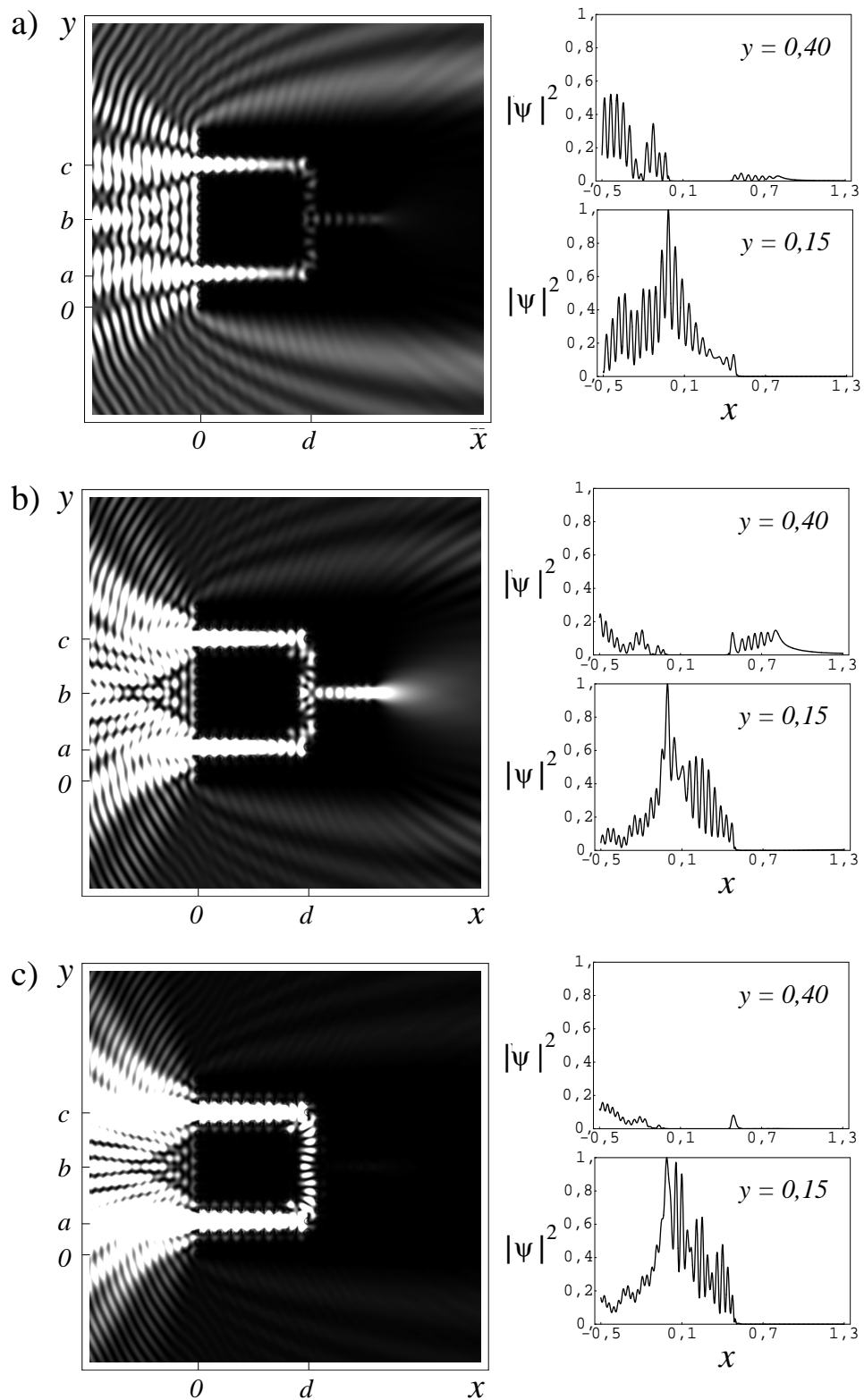


Figura 3.5: Gráfico 2D de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para ondas incidentes com: a)  $k = 70,0$ ; b)  $k = 80,0$ ; e c)  $k = 90,0$ . São mostrados “cortes” de  $|\Psi(\vec{r})|^2$  para  $y = a = 0,15$  e  $y = b = 0,40$ , centro da primeira guia de entrada e da guia de saída, respectivamente.

simulações.

Na figura 3.5.a), para  $k = 70$ , o campo tem seu máximo de intensidade no início da guia de entrada, diminuindo para aproximadamente 17% no seu final ( $x = d$ ). Na guia vertical e na de saída,  $|\psi(\vec{r})|^2$  é muito pequeno, mas não nulo, assumindo um valor de 4% na saída da estrutura.

Para o caso da onda incidente com  $k = 80$ , figura 3.5.b), o padrão do campo é parecido com o caso anterior. Porém, a variação em  $\lambda$  faz com que neste caso haja uma interferência construtiva na guia vertical, possibilitando a transmissão até a saída, onde  $|\psi(\vec{r})|^2$  chega a aproximadamente 15% do valor máximo possível observado ao longo da transmissão.

Para o último caso, com a onda incidente possuindo  $k = 90$ , figura 3.5.c), a intensidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  é alta na guia de entrada (caindo aproximadamente 50% do seu início até fim), cai para aproximadamente 10% no centro da guia vertical ( $x = b$ ) e, mesmo apresentando um modo alinhado à entrada da guia de saída, a onda não se propaga para esta.

Comparando os três casos, pode-se perceber que a transmissão mais ordenada na guia vertical não favorece a transmissão nesta estrutura, como se esperaria. É interessante notar que a função de onda na guia vertical de 3.5.c) apresenta uma estrutura de interferência construtiva muito simples. Neste caso, a razão  $\frac{(c-a)}{\lambda}$  vale aproximadamente 9, ou seja, cabem exatamente 9 modos na guia. Nas figuras (3.5.a)) e (3.5.b)), as razões de  $\frac{(c-a)}{\lambda}$  tem valores fracionários, os quais não conseguem acomodar um número inteiro de modos (6,7 e 7,6, respectivamente), então, as ondas que entram pelas duas guias, ao encontrarem-se no centro da parte vertical, não possuem uma condição de casamento como no caso anterior e acabam por “espremer-se” e sair pela guia horizontal.

Por fim, é analisado como modifica-se o perfil do campo propagante quando é variado o caminho óptico da guia de onda no cristal. Na figura 3.6, para um mesmo valor de número de onda  $k = 80$ , o comprimento da parte inferior da guia vertical é modificado da seguinte maneira: *a*) a parte de baixo tem um defeito a mais que a parte de cima ( $c - a = 0,75$ ); *b*) a parte de baixo tem um defeito a menos que a parte de cima ( $c - a = 0,55$ ); e *c*) a parte de baixo tem dois defeitos a menos que a parte de cima ( $c - a = 0,45$ ). Percebe-se novamente o comportamento enfatizado no parágrafo anterior, onde a configuração de maior ordem desfavorece a transmissão para a guia de saída.

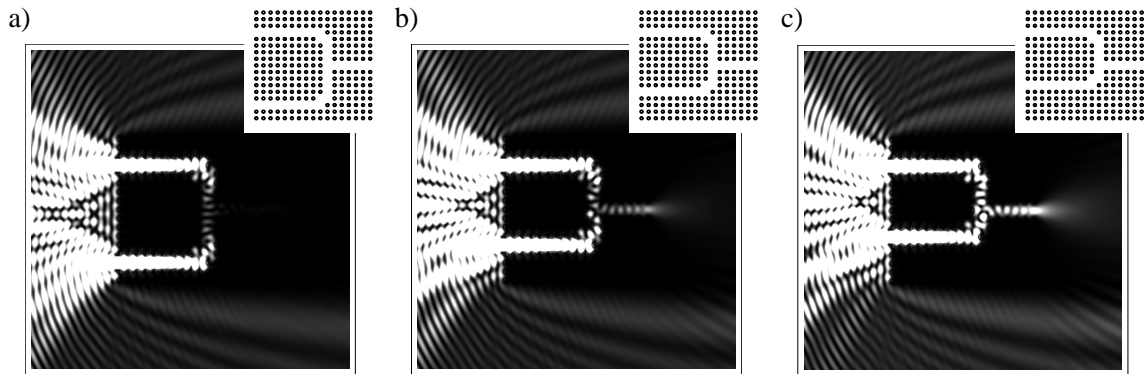


Figura 3.6: Gráficos 2D de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para três configurações diferentes da guia de onda, mostradas em cada respectiva inserção.

## 3.2 Cristais fotônicos com permeabilidade $\gamma$ finita

Na seção anterior, foram tratadas apenas redes formadas por espalhadores rígidos ( $\gamma \rightarrow \infty$ ), ou seja, onde a diferença entre as constantes dielétricas do meio de propagação e dos constituintes da rede é muito grande. Este seria o caso ideal, onde a banda proibida de energia é máxima e as perdas são mínimas. Uma situação como esta é especialmente requerida quando a frequência da onda a qual deseja-se manipular através do cristal é alta (ÖZBAYA et al., 1996). Neste caso, para manter o parâmetro de rede do cristal em uma escala comparável ao comprimento de onda da luz incidente, e assim manter a banda proibida de transmissão, é necessário que a estrutura da rede seja cada vez menor. Tal realização pode ser dificultada no caso de cristais produzidos a partir de materiais dielétricos por vários fatores, tais como disponibilidade de material, técnicas de produção, etc.

Na prática, dependendo do sistema a ser tratado, nem sempre é necessário que o contraste entre os materiais do cristal fotônico seja tão extremo, como por exemplo no caso de baixas frequências da onda incidente. Para ondas com  $\lambda$  da ordem de micrômetros, os dispositivos com melhor desempenho são construídos a partir de matrizes de Alumina (Óxido de Alumínio  $Al_2O_3$ ,  $\epsilon = 8,9$ ) (JOANNOPOULOS et al., 1997b; LIN et al., 1998) e Arseneto de Gálio ( $GaAs$ ,  $\epsilon = 11,56$ ) (MEKIS et al., 1996, 1998; JOHNSON; JOANNOPOULOS, 2003), tendo o ar como meio de propagação.

Nesta seção serão simulados, através da formulação do MCP para fronteiras permeáveis ( $\gamma$  finito), alguns exemplos de redes construídas a partir de materiais dielétricos com baixo contraste entre as constantes dielétricas do meio propagante e dos espalhadores. Serão abordados os casos já analisados anteriormente no âmbito do espalhamento por redes impermeáveis, bem

como outras estruturas conhecidas da literatura que envolvem, além da transmissão por guias, a criação de modos ressonantes em cavidades, também formadas por defeitos inseridos na estrutura cristalina.

Primeiramente, deve ser estabelecida uma conexão entre o parâmetro  $\gamma$  que controla a permeabilidade no MCP e a constante dielétrica  $\epsilon$  dos materiais dielétricos. A transmissão do campo elétrico  $\psi(\vec{r})$  incidindo normalmente, em um material não-condutor, não-magnético, pode ser escrita como (ROJANSKI, 1979; LORRAIN et al., 2000)

$$\mathcal{T} = \frac{|\psi_2(\vec{r})|^2}{|\psi_1(\vec{r})|^2} = \frac{2n_1}{n_1 + n_2} \quad (3.1)$$

com,  $n_1 = \sqrt{\epsilon_1}$  e  $n_2 = \sqrt{\epsilon_2}$ , sendo os índices de refração dos meios de propagação e dos espalhadores, respectivamente.  $\epsilon_1$  e  $\epsilon_2$  são as constantes dielétricas adimensionais relativas ao vácuo,  $\epsilon_r = \frac{\epsilon}{\epsilon_0}$ , onde o sub-índice  $r$  foi omitido por simplicidade. Tomando a fórmula acima em função das constantes dielétricas, temos

$$\mathcal{T} = \frac{2\sqrt{\epsilon_1}}{\sqrt{\epsilon_1} + \sqrt{\epsilon_2}}. \quad (3.2)$$

Como o meio de propagação que estamos utilizando é o ar,  $\epsilon_1 = 1,0$ , logo

$$\mathcal{T} = \frac{2}{1 + \sqrt{\epsilon_2}}. \quad (3.3)$$

A partir das relações mostradas no capítulo 2 a permeabilidade  $\gamma$  é definida, em função da transmissão  $\mathcal{T}$ , como

$$\gamma = 2k \sqrt{\frac{1}{\mathcal{T} - 1}}. \quad (3.4)$$

Substituindo (3.3) em (3.4), é obtido o parâmetro  $\gamma$  que controla a permeabilidade dos espalhadores, em função da constante dielétrica  $\epsilon$

$$\gamma = 2k \sqrt{\sqrt{\epsilon_2} - 1}. \quad (3.5)$$

Nas simulações efetuadas nesta seção será utilizada a constante dielétrica  $\epsilon = 11,56$  do *GaAs*, por ser esta a mais comumente encontrada na literatura e assim termos mais possibilidades de comparação de nossos resultados. Para este valor de  $\epsilon$ , a transmissão  $\mathcal{T}$  em cada espalhador vale, aproximadamente, 40%.



### 3.2.1 Redes com guias de onda tipo $\pi/2$ e interferômetro

Primeiramente, vamos analisar o comportamento das duas redes já estudadas para espalhadores impenetráveis.

Na figura 3.7, é mostrada transmissão através da rede que possui guia de onda com curva  $\pi/2$ . Os parâmetros utilizados são os mesmos da referência (MEKIS et al., 1996) e aparecem na legenda da figura. Percebe-se do gráfico de densidade que apesar da permeabilidade dos espalhadores, existe pouca penetração da onda na estrutura da rede, isto é, as características da banda proibida de condução são mantidas. A transmissão ressonante apresenta-se com grande intensidade em ambas as guias de onda. Como pode ser visto através dos cortes unidimensionais em  $|\psi(\vec{r})|^2$ , a amplitude permanece praticamente estável durante todo o caminho ótico. O pequeno crescimento do último pico na guia de saída deve-se a um tipo de efeito de “chama de vela”, similar ao visto anteriormente para as redes impenetráveis.

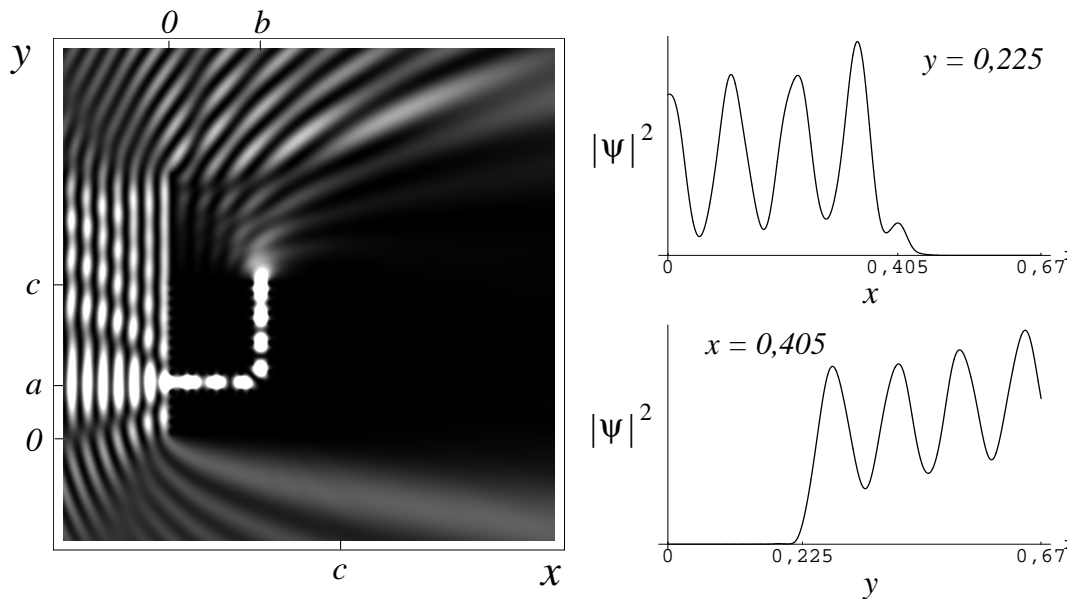


Figura 3.7: Gráfico de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para onda incidente com  $k = 44,36$  em uma rede com guia de onda tipo  $\pi/2$ , formada por espalhadores com  $r = 0,009$ , parâmetro de rede  $5r$  e constante dielétrica  $\epsilon = 11,56$ . Regiões claras correspondem aos máximos normalizados. São mostrados “cortes” em  $|\psi(\vec{r})|^2$  para  $y = a = 0,225$  e  $x = b = 0,405$ , centro da guia horizontal e vertical, respectivamente. Os pontos  $c$  marcam o final da estrutura.

A figura 3.8 mostra o mesmo comportamento descrito no parágrafo anterior, para o caso da rede em forma de interferômetro.

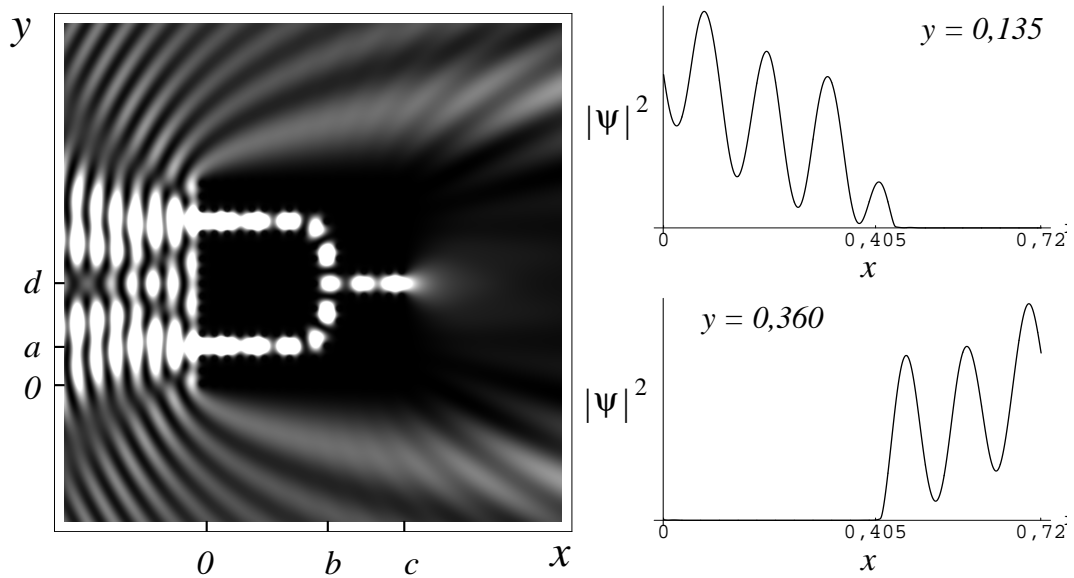


Figura 3.8: Gráfico de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para onda incidente com  $k = 45,67$  em uma rede com guia de onda tipo interferômetro, com os mesmos parâmetros da figura 3.7. São mostrados “cortes” em  $|\psi(\vec{r})|^2$  para  $y = a = 0,135$  e  $y = d = 0,360$ , centro da guia de entrada e saída, respectivamente. Os pontos  $c$  marcam o final da estrutura.

### 3.2.2 Redes com cavidades ressonantes

Como último teste da utilização do MCP no tratamento de estruturas que simulam cristais fotônicos, serão simuladas redes que possuem cavidades ressonantes.

Introduzindo determinados tipos de defeitos em cristais fotônicos, pode-se criar um autoestado a ele associado, na região de energias pertencentes ao intervalo do *band gap*, em analogia com impurezas em semicondutores. Assim como no caso da guia de onda, pela característica de supressão da transmissão através da estrutura, o resto da rede funciona como uma parede refletora para o modo, formando uma cavidade ressonante, na qual ele é aprisionado (JOHNSON; JOANNOPOULOS, 2003). O defeito que cria tais modos ressonantes é do *tipo-ponto*, que consiste na variação dos parâmetros, como raio ou constante dielétrica, de um elemento da rede. A energia e a simetria do modo criado são dependentes dos parâmetros do defeito, por exemplo: diminuindo o raio, ou removendo-o por completo ( $r \rightarrow 0$ ), é criado um único modo ressonante na cavidade; aumentando  $r$  são criados estados do tipo dipolo, e modos de ordem maior conforme  $r$  cresce (VILLENEUVE et al., 1996).

Para este tipo de rede, serão abordadas duas estruturas: rede com uma cavidade ressonante (detalhe da figura 3.9); e rede com uma guia de onda reta atravessando-a de ponta a ponta, com uma cavidade no centro (detalhe da figura 3.10).

A figura 3.9 mostra os resultados da simulação para uma rede com uma cavidade produzida através da retirada do espalhador central, ou no limite de seu raio  $r$  tendendo a zero, como é mostrado em seu detalhe. Para  $k = 42,95$  ( $\frac{\lambda}{2}$  aproximadamente igual ao comprimento diagonal da cavidade), esta estrutura possui um modo ressonante pronunciado, cuja amplitude é comparável à da onda incidente espalhada na parte externa. Resultado similar pode ser observado na referência (VILLENEUVE et al., 1996).

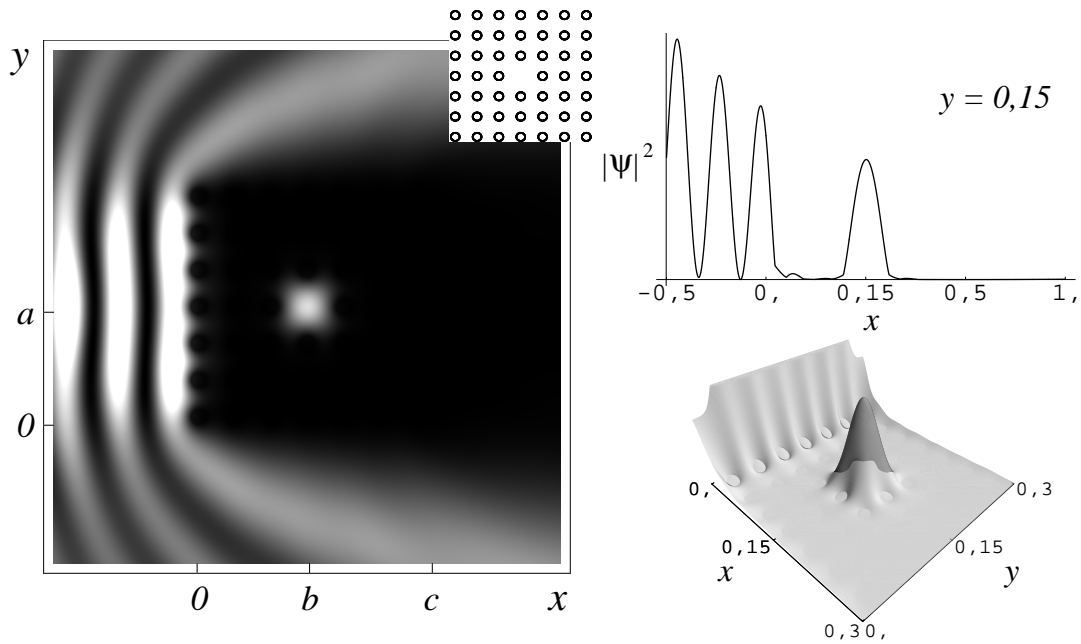


Figura 3.9: Gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$ ; corte unidimensional em  $y = a = 0,15$ ; e tridimensional, para onda incidente com  $k = 42,95$  em uma rede formada por espalhadores com  $r = 0,01$ , parâmetro de rede  $5r$  e constante dielétrica  $\epsilon = 11,56$ . A estrutura da rede é mostrada no detalhe.

A última estrutura a ser analisada trata-se de uma rede com uma guia de onda que a cruza do início ao fim. A guia é interrompida por uma cavidade formada por dois espalhadores separados por um espaço vazio (defeito tipo-ar) formando uma cavidade ressonante. A geometria pode ser melhor visualizada na figura 3.10. Como no caso anterior, a cavidade possuirá um modo ressonante para a energia cujo meio comprimento de onda  $\frac{\lambda}{2}$  seja compatível com sua extensão diagonal, o que pode ser visto nos gráficos tridimensionais de  $\psi(r)$ . Em a) é mostrada a variação da transmissão através da guia  $\mathcal{T}_{wg}$  (definido pela razão das amplitudes  $|\psi(r)|^2$  da transmissão ressonante na saída e na entrada da estrutura) com a energia da onda incidente. Percebe-se que a transmissão da primeira para a segunda guia é máxima no valor exato da energia do modo da cavidade ressonante, onde  $\mathcal{T}_{wg} = 1,0$ . Em b) e d) temos valores para  $k$ , respectivamente, anterior e posterior ao pico do gráfico a). Vemos que o modo é excitado na cavidade, porém, não está próximo o suficiente do seu valor exato para conseguir mediar a transmissão

entre as duas guias. Em b) a energia é muito próxima do valor do modo ressonante na cavidade (pico em  $\mathcal{T}$ ), que aparece com grande amplitude (aproximadamente 25 vezes a amplitude da onda externa e 15 vezes o valor da transmissão na guia) e mediando a transmissão máxima entre as duas guias. Tal comportamento é conhecido da literatura e pode ser encontrado por exemplo em (JOHNSON; JOANNOPOULOS, 2003) e (RAHACHOU; ZOZOULENKO, 2005).

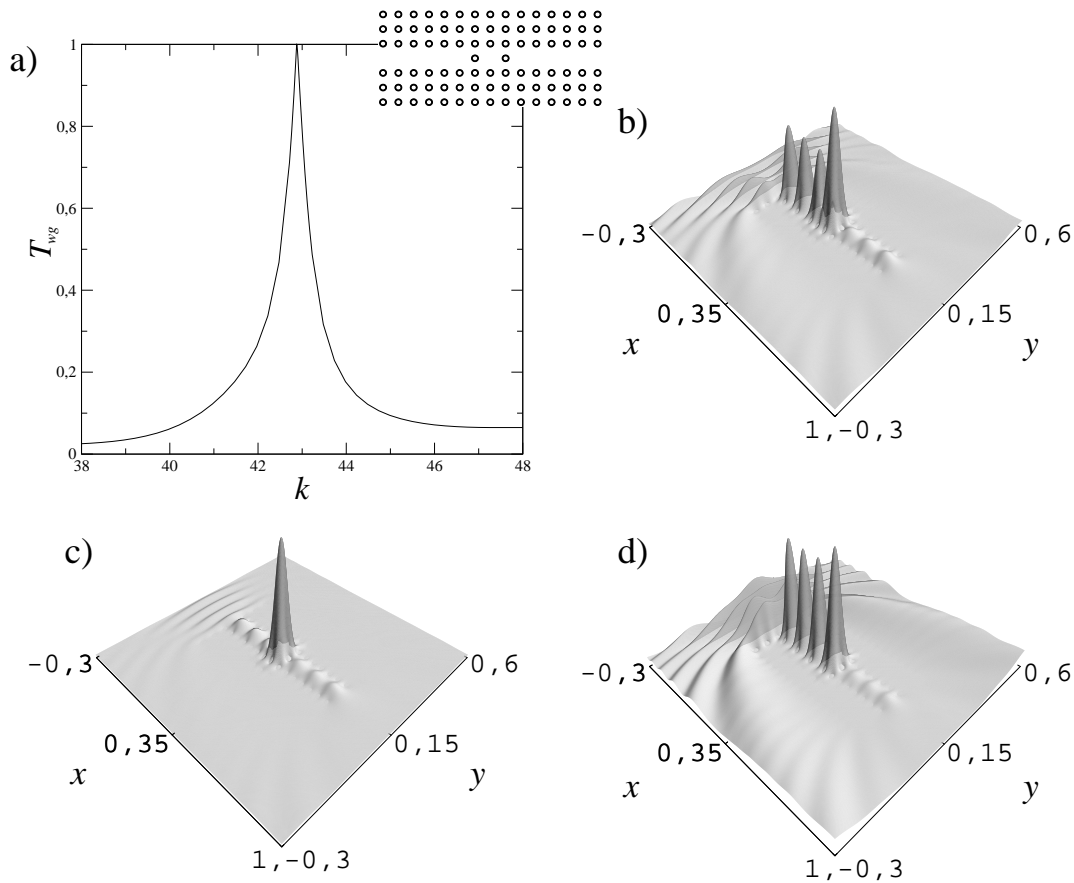


Figura 3.10: a) gráfico da transmissão  $T \times k$  através da guia de onda da rede mostrada no detalhe. Gráficos tridimensionais de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para onda incidente com b)  $k = 42,0$ , c)  $k = 42,88$  e d)  $k = 44,0$ . A estrutura é constituída por espalhadores com  $r = 0,01$ , parâmetro de rede  $5r$  constante dielétrica  $\epsilon = 11,56$ .

### 3.3 Conclusões parciais

O MCP foi aplicado a vários tipos estruturas que mimetizam aquelas a partir das quais são fabricados os cristais fotônicos. Com uma abordagem numérica simples e que não depende muito esforço computacional, foram obtidos, com bons resultados, os estados de espalhamento e transmissão ressonante através das redes.

Foram estudados primeiramente redes formadas por espalhadores rígidos, possuindo

dois tipos de guia de onda formadas por defeitos: curva  $\pi/2$  e interferômetro. Em ambos os casos o método mostrou grande êxito na obtenção dos estados de transmissão ressonante.

Em seguida foram modeladas redes com permeabilidade finita, relacionadas com o caso de cristais fotônicos com baixo contraste entre as permeabilidades dielétricas do meio de propagação e dos espalhadores. Neste caso foram estudadas as estruturas com os mesmos tipos de guias de onda das utilizadas no caso infinito, as quais demonstraram grande fidelidade na reprodução qualitativa de resultados conhecidos da literatura para cristais fotônicos fabricados a partir de materiais dielétricos (VILLENEUVE et al., 1996; MEKIS et al., 1996). Também foi tratado o problema de cavidades formadas por defeitos na rede, onde obtiveram-se os primeiros modos ressonantes e o problema de uma guia de onda interrompida por uma cavidade, onde foi mostrada a transmissão em função da energia da onda incidente e determinada qual a condição em que a onda pode passar da guia de entrada para a de saída, também com boa concordância com os resultados conhecidos (JOHNSON; JOANNOPOULOS, 2003; RAHACHOU; ZOZOULENKO, 2005).

A aplicação do MCP no estudo de cristais fotônicos é motivado por dois fatores: i) para geometrias conhecidas, permite facilmente testar modificações de parâmetros, condições de contorno, buscar estados ressonantes, etc, como mostrado nas redes com guias de onda curvas e com cavidades ressonantes; ii) na proposição de novas estruturas, como no caso calculado da guia de onda do tipo interferômetro.

Os resultados deste capítulo foram submetidos para a publicação na revista *Journal of Physics B*, em colaboração com os professores Marcelo Leite Lyra e Francisco Anacleto Barros Fidelis de Moura, do Departamento de Física da Universidade Federal de Alagoas.

## 4 Otimização de cavidades para dispositivo coletor de fótons

A pesquisa em optoeletrônica tem se consolidado como uma área importante em vários campos da tecnologia. Exemplo disto é sua crescente utilização na construção de dispositivos como detectores, LED's (diodos emissores de luz), células solares, etc (ROMAN, 2000). Por serem mais leves e terem menor custo, tanto em termos de matéria-prima utilizada quanto de produção, a indústria de fotodetetores e células fotovoltaicas orgânicas tem destaque neste crescimento, sendo que um dos temas mais importantes na pesquisa destes dispositivos é o de como otimizar sua eficiência (TANG, 1985; PETTERSSON et al., 1999).

Na natureza, sistemas sofisticados para coleta de luz são encontrados em importantes mecanismos fisiológicos. Exemplos disto são as proteínas coletoras de luz (*light-harvesting proteins*), presentes nos órgãos sensoriais da visão em animais e produção de energia em plantas (ETCHEGOIN; MAHER, 2003). Então, estudar a coleta de fótons em materiais orgânicos pode auxiliar não só a melhorar a obtenção dos dispositivos artificiais para aplicações na indústria, mas também ajudar a compreender o funcionamento de fenômenos importantes da natureza.

### 4.1 Dispositivo para aprisionamento de fótons

Em 2000 foi demonstrado que adicionar um tipo de “grade” (máscara refletiva com pequenas aberturas periódicas) sobre a camada orgânica fotoativa (depositada sobre uma placa refletiva), pode aumentar a eficiência quântica interna  $\eta$  do dispositivo fotodetector em aproximadamente 30%, na região do espectro solar (PEUMANS et al., 2000). Esta eficiência  $\eta$  é definida pela relação entre a intensidade da luz incidente no dispositivo  $I_0$  e a densidade de corrente de curto circuito por ela produzida  $J_{sc}$  (PHOTONICS... , 2007). A idéia por trás dessa proposição é a de que, no dispositivo sem a grade, a luz incide uma vez na placa refletiva e, se não absorvido, o fóton se perde. Quando é acrescentada a grade à estrutura, os fótons que adentram o dispositivo são aprisionados, criando-se então a possibilidade de múltiplas reflexões entre as placas, o que aumenta as chances de eles serem absorvidos pelo material orgânico, uma

vez que passarão mais vezes através desta camada.

São muitas as variáveis envolvidas para o bom desempenho de qualquer tipo de dispositivo. Um problema que merece atenção especial antes da fabricação destas estruturas é o cálculo de suas dimensões otimizadas. Trabalhando neste sentido, esta seção dedica-se à modelagem teórica do arranjo experimental mostrado na figura 4.1 através do MCP. É importante observar que os resultados teóricos obtidos foram efetivamente utilizados para se fabricar dispositivos fotodetektors, em colaboração com o grupo da professora Lucimara Stolz Roman.

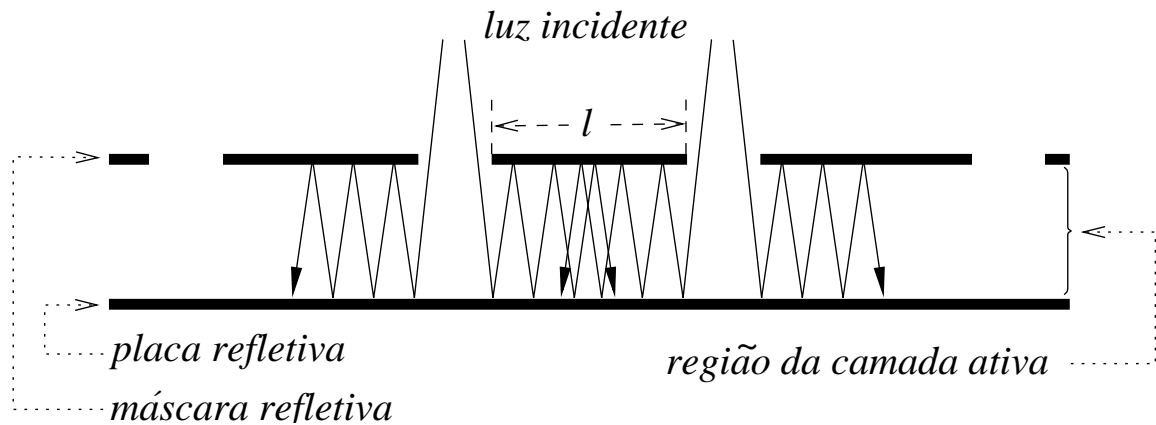


Figura 4.1: Esquema do dispositivo coletor de fótons a ser modelado.

Experimentalmente, a estrutura é formada por duas máscaras refletoras de alumínio, das quais: a primeira apresenta a matriz periódica de buracos, obtidos através de nanoidentação (LEPIENSKI; FOERSTER, 2004), depositados sobre substrato de FTO/vidro (ver figura 4.1), por onde a luz monocromática incide; e a segunda é uma placa refletora simples que funciona como cátodo. O espaço interior do dispositivo é preenchido com a camada orgânica ativa (mistura do polímero semicondutor poli(3-hexiltiofeno)(P3HT)(5mg/ml) e Fulereno  $C_{60}$  5mg/ml dissolvido em solução de diclorobenzeno). A separação entre as placas utilizada é igual ao comprimento de onda  $\lambda$  da luz no qual a camada ativa possui a melhor absorção. Em nossas análises vamos estudar apenas a cavidade do dispositivo.

Utilizando uma onda incidente da forma  $\varphi(\vec{r}) = \exp[-i\vec{k} \cdot \vec{r}]$ , a equação da onda do campo elétrico, para uma frequência  $\omega$  fixa (luz monocromática), toma a forma (ROJANSKI, 1979; LORRAIN et al., 2000):

$$\nabla^2 \vec{E}(\vec{r}) + \epsilon\mu\omega^2 \vec{E}(\vec{r}) = 0 \quad (4.1)$$

com  $\vec{E}(\vec{r}(s)) = 0$  na superfície das placas, como requerido para um metal condutor perfeito. A equação (4.1) apresenta a forma de uma equação de Helmholtz com condição de contorno de Dirichlet, o que valida a aplicação do MCP no tratamento do problema. Como vamos considerar

apenas o caso bidimensional, podemos resolver o caso escalar da equação Helmholtz, abordagem similar a empregada no caso do estudo de cristais fotônicos bidimensionais no capítulo anterior.

As simulações efetuadas têm por finalidade analisar o comportamento da distribuição das amplitudes do campo  $|E(\vec{r})|^2$  no interior do dispositivo, quando é variado o espaçamento  $l$  entre duas fendas consecutivas e sua abertura. Foi escolhido manter fixas a distância entre as placas refletoras.

## 4.2 Dispositivo utilizado nas simulações

A estrutura simulada (figura 4.2) é a representação esquemática do dispositivo formado apenas pelas placas refletoras, sem o preenchimento, ou seja, é a cavidade do dispositivo. Nesta situação, o campo propaga-se pelo meio livre interno à estrutura. O FTO/vidro, substrato que sustenta o filme de Al com fendas, possui transmitância de aproximadamente 90% na região do espectro visível (RAKSHANI et al., 1998), e não ocasiona grandes perdas de intensidade da luz antes desta atingir a máscara de Al e a camada ativa. A camada orgânica utilizada tem absorbância máxima ( $A = \ln \frac{I_0}{I}$  relação entre fluxo de energia incidente e absorvido pelo material (PHOTONICS... , 2007)) de aproximadamente 0,3 na região do espectro visível (CANESTRARO et al., 2006), ou seja, a maior parte da onda incidente no material é transmitida. Então, **em primeira aproximação**, desprezamos os meios materiais na análise da distribuição do campo no volume interno ao dispositivo.

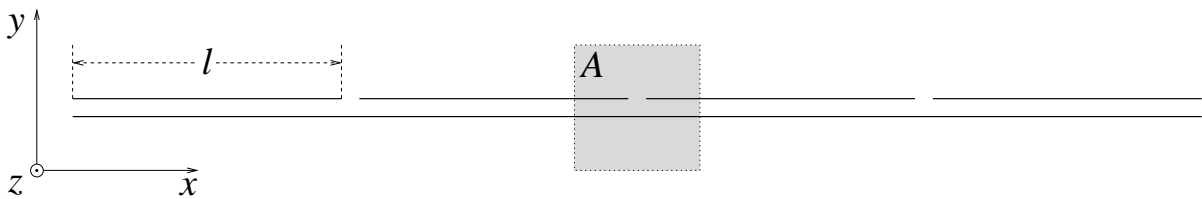


Figura 4.2: Estrutura utilizada nas simulações. Nesta geometria a separação entre as placas e abertura das fendas medem  $\lambda (= \frac{2\pi}{k})$  e largura  $l = 15\lambda$ . A área A é a região mostrada nos gráficos de densidade.

O esquema mostrado em 4.2 corresponde a um corte bidimensional no plano-xy ao longo de uma linha de fendas (com o dispositivo colocado no plano-xz). As medidas do dispositivo foram parametrizadas em relação ao comprimento de onda ( $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ ). A distância entre as placas e a largura das fendas fixas medem  $\lambda$  e a separação  $l$  entre cada fenda consecutiva varia como múltiplos inteiros de  $\lambda$ . Foi feita esta escolha de parâmetros pois:



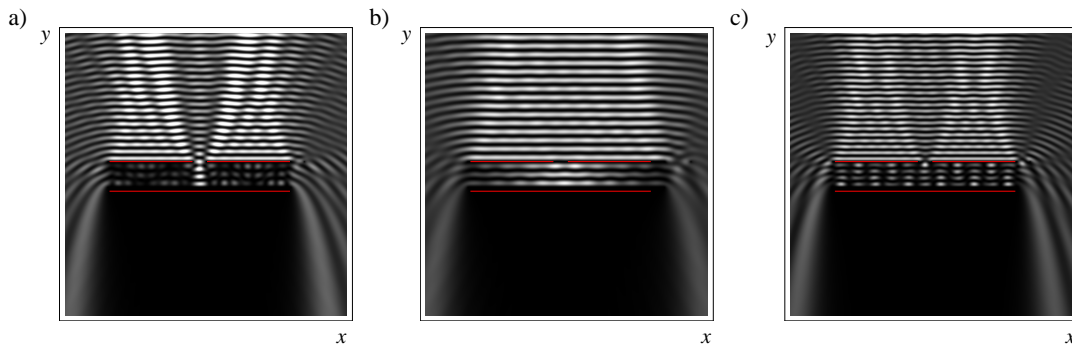


Figura 4.3: Gráfico de densidade de  $|E(\vec{r})|^2$  para dispositivos com uma única fenda, com abertura medindo: a)  $1,01\lambda$ ; b)  $1,0\lambda$ ; e c)  $0,99\lambda$ .

- para a separação das placas com valores iguais a múltiplos semi-inteiros de  $\lambda$ , a onda que penetra no dispositivo possui condição de interferência construtiva no eixo  $y$ ;
- este valor para a abertura das fendas proporciona o mínimo de difração nas bordas. Isto pode ser visto na figura 4.3, onde uma variação de apenas 1% na largura da fenda é suficiente para causar efeitos que mudam completamente o perfil da onda no interior do dispositivo.

### 4.3 Resultados das simulações

Foram feitas simulações para um grande conjunto de separações  $l$ , porém, aqui serão mostrados apenas alguns resultados representativos. As matrizes referentes a  $E(\vec{r}_{ij})$  utilizadas têm todas tamanho  $2000 \times 2000$ . A onda incidente possui direção coincidente com o eixo- $y$  negativo e número de onda  $k = 1,0$ , em medidas arbitrárias.

Na figura 4.4 são mostrados os gráficos de densidade de  $|E(\vec{r})|^2$  para um dispositivo com separação de fendas  $l = 15\lambda$  e geometria idêntica àquela da figura 4.2. Em a) é exibida a solução para todo o dispositivo simulado, observa-se que, apesar de a intensidade do campo decair para regiões mais afastadas da entrada da fenda, ela persiste por toda sua extensão. A escala em  $y$  foi aumentada 10 vezes, em comparação com  $x$ , para uma melhor visualização dos resultados no interior das placas. O gráfico b) mostra a magnificação de a) na região da segunda fenda, correspondente a área delimitada por  $A$  em 4.2. Percebe-se que neste intervalo o campo possui uma distribuição praticamente homogênea em toda área do dispositivo.

Efeitos de interferência destrutiva fazem com que distâncias entre as fendas menores  $l = 10\lambda$  gerem distribuições da onda inconstantes no interior das placas, onde pequenas variações

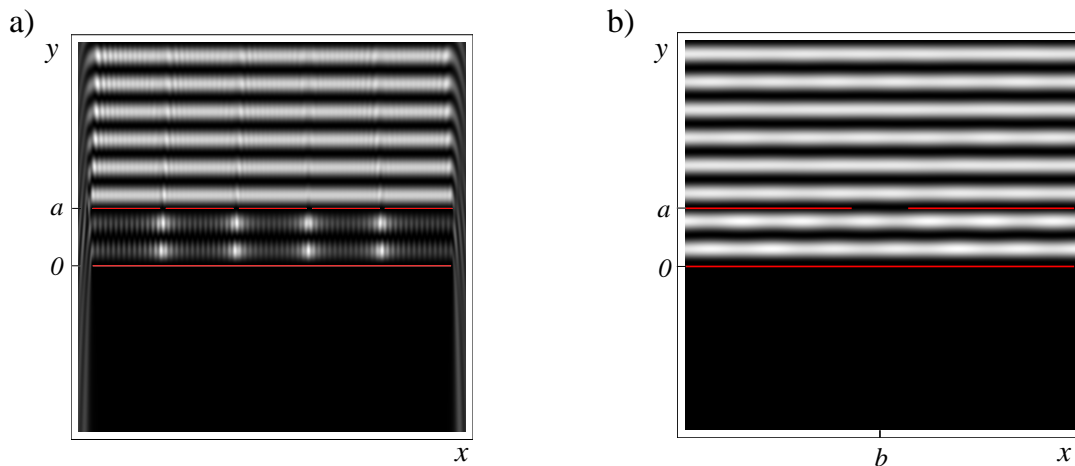


Figura 4.4: Gráfico de densidade para  $|E(\vec{r})|^2$  para um dispositivo com separação entre fendas  $l = 15\lambda$  e separação entre placas  $a = \lambda = \frac{2\pi}{k}$ , idêntico ao da figura 4.2. a) mostra o resultado para toda a estrutura (a escala foi aumentada aproximadamente 10 vezes no eixo  $y$  para uma melhor visualização dos resultados) e b) mostra o detalhe de a) na região delimitada pela área  $A$  da figura 4.2.

de  $l$  geram comportamentos distintos para  $|E(\vec{r})|^2$ . Este caso não é interessante do ponto de vista da fabricação dos dispositivos, visto que qualquer desvio da posição pretendida para a fenda pode trazer consequências indesejadas para o perfil do campo interno.

A figura 4.5 apresenta  $|E(\vec{r})|^2$  para geometrias que possuem separação entre fendas  $l$  de:  $20\lambda$  em a);  $30\lambda$  em b);  $40\lambda$  em c); e  $50\lambda$  em d). Todos os casos indicam um comportamento geral comum: na região imediatamente próxima à fenda, o campo possui amplitude aproximadamente igual àquela da onda externa, porém, à medida que nos afastamos da região de entrada da luz, este decai rapidamente e anula-se quando nos distanciamos da área  $A$  mostrada nos gráficos. Este comportamento intensifica-se quando a separação entre as fendas aumenta, como pode ser observado em d), onde a onda possui valor significativo somente na pequena região próxima à entrada.

Dos resultados obtidos acima conclui-se que, para separações  $l$  entre fendas menores, deve-se obter melhor desempenho do dispositivo, uma vez que a distribuição mais homogênea do campo  $E(\vec{r})$  favorece o aproveitamento de maior área na absorção dos fótons pela camada fotoativa. Porém, existe um certo limite inferior para  $l$ , a partir do qual os efeitos de interferência da onda podem vir a atrapalhar nos resultados para o campo resultante desejado no interior da cavidade. Levando em conta estes dois fatores, os valores de  $l$  em torno de  $15\lambda$  apresentam-se como os mais satisfatórios.

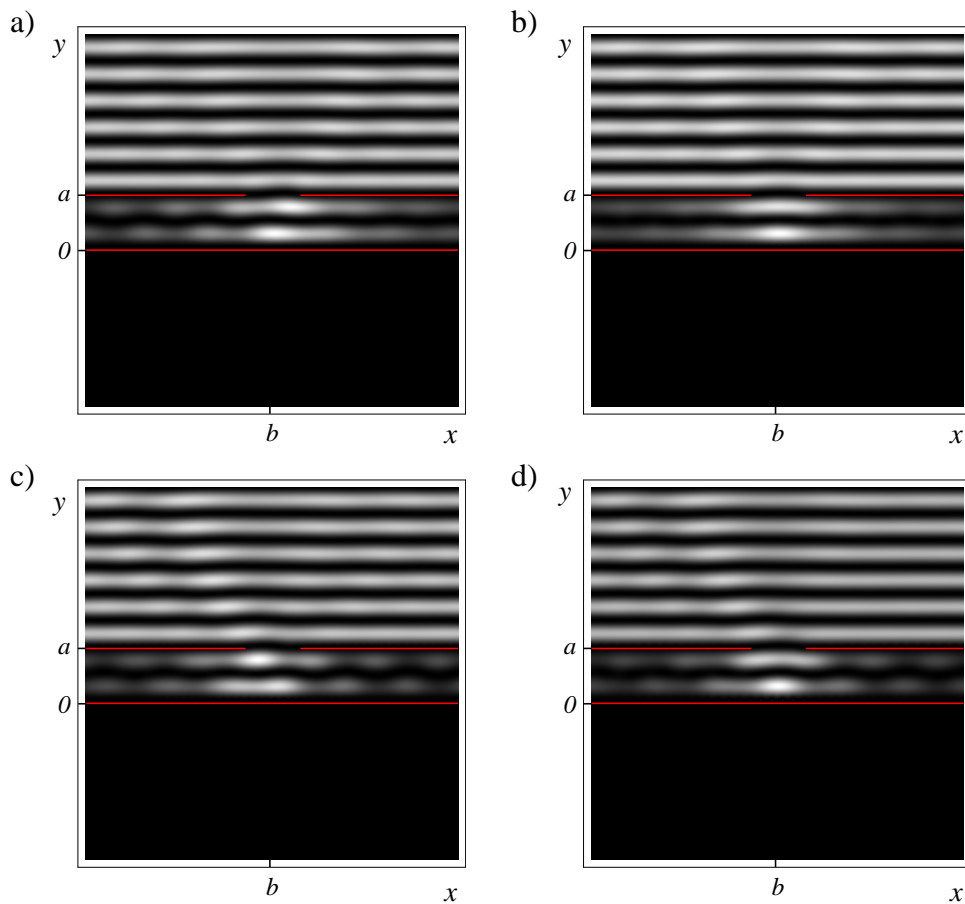


Figura 4.5: Gráficos de densidade para  $|E(\vec{r})|^2$  da região A da figura 4.2. A separação  $l$  entre fendas de vale: a)  $20\lambda$ ; b)  $30\lambda$ ; c)  $40\lambda$ ; e d)  $50\lambda$ . Ainda, a distância entre as placas  $a = \lambda$  e  $b$  marca o centro da fenda.

## 4.4 Resultados experimentais

Os resultados numéricos obtidos na seção anterior foram utilizados pelo grupo da Prof<sup>a</sup> Lucimara Stoltz Roman do laboratório **DINE** (Grupo de Dispositivos Nanoestruturados) na construção de fotodetetores orgânicos como os descritos na seção 4.1.

As máscaras de alumínio com as fendas foram produzidas por nanoidentação em colaboração com o **LabNANO** (Laboratório de Propriedades Nanométricas). Foram produzidas amostras com vários valores de aberturas das fendas e os melhores resultados foram observados em torno de  $550\text{nm}$ , valor próximo ao comprimento de onda  $\lambda$  da luz incidente, como antecipado nas simulações numéricas apresentadas no gráfico 4.3. A máscara com uma matriz de fendas  $20 \times 8$  e separação de  $l = 15\lambda$ , pode ser observada na figura de microscopia de força atômica 4.6.

Para caracterização da eficiência do fotodetector, foram feitas medidas da densidade de

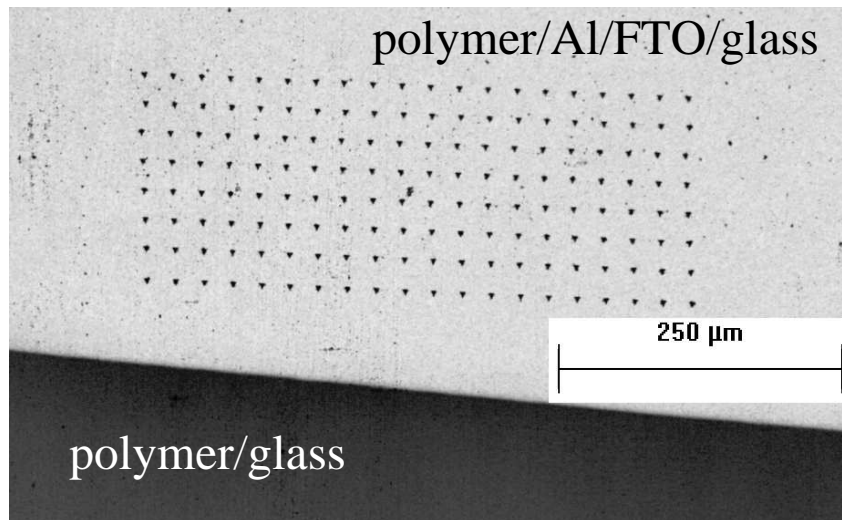


Figura 4.6: Imagem de AFM (microscopia de força atômica) da matriz de fendas  $20 \times 8$  produzida em uma placa de alumínio de  $320\text{nm}$  de espessura. A separação entre as fendas é de  $15\lambda$ , onde o  $\lambda = 560\text{nm}$ . Gráfico presente na referência (GERNISKI et al., 2007).

fotocorrente de curto circuito  $J_{sc}$  em função do comprimento de onda monocromática  $\lambda$  incidente.  $J_{sc}$  é definida como a medida da corrente produzida pelo dispositivo sob iluminação monocromática em vários comprimentos de onda, sem tensão aplicada (ROMAN, 2000). Foram utilizados dispositivos com máscaras apresentando vários valores de espaçamento  $l$  entre as fendas e um deles sem máscara, para efeito de comparação. Os resultados obtidos para dispositivos que possuem separações  $l = 15\lambda$  e  $40\lambda$  são comparados com aqueles fornecidos por um dispositivo tradicional (sem máscara), cujo funcionamento é extensamente conhecido na literatura (ROMAN, 2000). Estes resultados são mostrados no gráfico 4.7, onde percebe-se claramente a melhor performance da geometria com a máscara fabricada com os espaçamentos menores ( $15\lambda$ ) entre as fendas.

Ainda é interessante notar dos que gráficos que, como a abertura das fendas utilizadas na fabricação da máscara possui tamanho igual ao valor do comprimento de onda de melhor absorção da camada ativa, é exatamente nesta região do espectro que a medida de fotocorrente é máxima.

## 4.5 Conclusões parciais

O MCP foi utilizado no modelamento teórico da cavidade de um dispositivo fotodetector formado por duas placas paralelas, sendo que uma delas possui buracos por onde a luz pode passar, com o espaço interno preenchido por material orgânico (polímero/ $C_{60}$ ) que constitui a

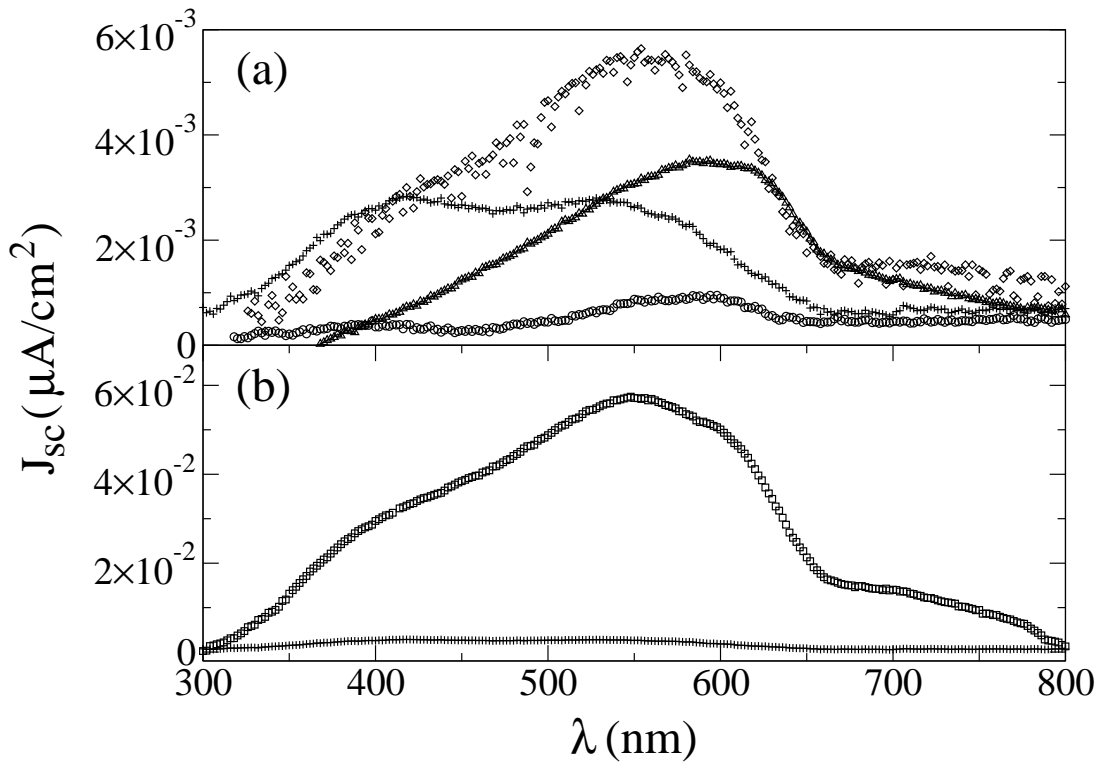


Figura 4.7: Densidade de fotocorrente  $J_{sc}(\mu A/cm^2)$  por comprimento de onda incidente  $\lambda$ . Todos os dispositivos possuem camada ativa com a mesma espessura de  $560nm$ . a) dispositivos com:  $l = 40\lambda$  ( $\Delta$ );  $l = 50\lambda$  ( $\diamond$ );  $100\lambda$  ( $\circ$ ). b) dispositivo com  $l = 15\lambda$  ( $\square$ ). Para efeitos de comparação, em ambos os gráficos a curva (+) representa o dispositivo sem máscara. Gráfico presente na referência (GERNISKI et al., 2007).

camada foto-ativa.

O intuito das simulações foi encontrar os parâmetros apropriados para o dispositivo, mas desconsiderando-se os efeitos óticos do material dentro da cavidade. Pela natureza bi-dimensional do problema, a luz incidente foi tratada como um campo escalar, não sendo necessário dar um tratamento vetorial ao campo. Como resultado, obtivemos valores ótimos para a distância entre as fendas e seu tamanho.

Os parâmetros obtidos através do modelo foram utilizados para a fabricação de dispositivos fotodetectors como descrito o acima. Através de medidas das correntes produzidas por eles, pode-se constatar seu melhor desempenho exatamente nas condições previstas numericamente pelo MCP.

Este procedimento, onde a fabricação é precedida pelo cálculo numérico dos parâmetros a serem utilizados, mostrou grande benefício principalmente na minimização do tempo de construção dos dispositivos. Por este ser um tipo de dispositivo relativamente novo, foi importante obter uma geometria inicial, mesmo que simplificada, na qual foi baseada sua fabricação.

Estes resultados mostram mais uma vez a grande aplicabilidade do MCP, que mesmo através de um sistema extremamente simplificado, pode auxiliar no estudo e caracterização de estruturas realísticas, auxiliando na sua posterior fabricação.

## 5 Bilhar quântico aberto formado por três discos

Uma das mais importantes utilizações de técnicas de espalhamento é no estudo da estrutura da matéria. Nestes tipo de estudo, feixes de partículas (como fótons, prótons, elétrons, etc) são incididos em um sistema de interesse e informações a respeito do alvo são obtidas através da observação dos resultados do espalhamento (REED; SIMON, 1979).

Os resultados de maior interesse são aqueles obtidos através de:

- medida da seção de choque: fornece área real de interação que o sistema apresenta no experimento. Além disso, muitas vezes a seção de choque revela um espectro de ressonâncias, associado a estados metaestáveis, para o qual a partícula incidente é aprisionada pelo sistema por certo tempo (SAKURAI, 1994). Este espectro pode ser utilizado para caracterizar a dinâmica interna do sistema espalhador (BARRAS; GASPARD, 1999);
- medida de taxa de reação: fornece informações acerca da dinâmica de interação e reação do feixe incidente com o sistema, tais como, do tempo de reação, tempo de vida dos estados metaestáveis criados na interação, etc (GASPARD, 1998).

Alguns exemplos dentre o vasto campo aberto às aplicações desse tipo de abordagem de espalhamento são os estudos de reações unimoleculares (GASPARD; RICE, 1989b), circuitos eletrônicos (JALABERT et al., 1990), caracterização de materiais (ASHCROFT; MERMIN, 1981; CHRISTMAN, 1988), etc.

### 5.1 Espalhamento caótico

Aspectos quânticos são fundamentais em espalhamento microscópico. Neste caso as partes não podem ser tratadas classicamente. Dentre a vasta gama de possibilidades existentes, em várias situações o espalhamento apresenta comportamento de caologia quântica (GASPARD, 1998).

De forma geral, tal comportamento caótico aparece nos processos de espalhamento em sistemas com muitos graus de liberdade ou quando o alvo é composto de vários espalhadores, como em moléculas e sólidos, quando o comprimento de onda da partícula incidente é comparável às escalas de sua estrutura (GASPARD, 1998). As principais implicações da presença de caos no espalhamento são:

- seções de choque que apresentam crescente complexidade (LU et al., 2000);
- taxas de reações, que agora podem apresentar estados metaestáveis com tempo de vida tendendo ao infinito devido ao possível aprisionamento das partículas incidentes na região de espalhamento (GASPARD; RICE, 1989b; ROWE; SIEMENS, 2005).

### 5.1.1 Espalhador formado por discos

O espalhamento envolvendo um alvo formado por  $n$ -discos é um dos modelos mais simples conhecidos para estudo de dinâmica caótica em sistemas quânticos abertos. O efeito desfocalizador que as fronteiras circulares geram nas colisões induzem instabilidade em toda órbita periódica aprisionada no sistema clássico equivalente (KORSCH; JODL, 1998; WIRZBA, 1999).

As características das soluções destes sistemas variam com o número de discos compondo o espalhador global. Quando o sistema é formado por apenas um disco, temos uma solução relativamente simples, já largamente abordado na literatura por sua importância na teoria semiclássica de difração (VATTAY et al., 1994; GASPARD, 1998).

No sistema formado por dois discos, além da solução de espalhamento, existe a possibilidade de aprisionamento por uma órbita periódica instável, tipo *bouncing ball* (HELLER, 1984; STÖCKMANN, 1999), constituída pela linha que une os centros dos espalhadores (GASPARD, 1998). Quando o alvo espalhador é formado por mais de dois discos, infinitas órbitas instáveis podem existir no sistema (WIRZBA, 1999). Estas órbitas são relacionadas aos estados quânticos metaestáveis, ou quase-estados (GASPARD; RICE, 1989a). O caso de  $n$  grande é amplamente estudado sob a abordagem dos sistemas estendidos espacialmente (BARRAS; GASPARD, 1999).

O sistema de  $n$ -discos espalhadores que apresenta maior interesse do ponto de vista de espalhamento caótico, por ser o mais simples de ser tratado, é o caso de  $n = 3$  (KORSCH; JODL, 1998). Seu primeiro estudo sistemático data do fim da década de 80 e foi apresentado por Gaspard e Rice numa série de três artigos, tendo como finalidade modelar fragmentação unimolecular (GASPARD; RICE, 1989a, 1989b, 1989c).



Além do interesse teórico, várias implementações experimentais do sistema de  $n$ -discos foram produzidas. Na sua maior parte são experimentos por cavidades ressonantes de microondas, de onde podem ser obtidos o espectro de frequências e as larguras das ressonâncias quânticas do sistema (LU et al., 1999, 2000, 2001).

### 5.1.2 Abordagens semiclássica e quântica

Um tema recorrente no estudo de sistemas espalhadores caóticos é a relação entre suas soluções clássicas e quânticas (GASPARD, 1998; WIRZBA, 1999; MAIN et al., 2004), ou seja, de como as características clássicas, como as órbitas instáveis das partículas aprisionadas, aparecem na versão quântica da solução do problema. A importância desta relação torna-se evidente na medida que grande parte das soluções quânticas destes tipos de sistemas são obtidas através de expansões semiclássicas (CVITANOVIĆ; ECKHARDT, 1989; WIRZBA, 1999; MAIN et al., 2004).

Dos métodos de solução encontrados na literatura podem ser ressaltados:

- Abordagens semiclássicas: solução através da *função-zeta*  $\zeta$  de Ruelle (GASPARD; RAMIREZ, 1992; SRIDHAR; LU, 2002) e *função-zeta*  $\zeta$  de Gutzwiller-Voros (GASPARD, 1998; WIRZBA, 1999). Ambos valem-se de expansões cíclicas sobre o conjunto de órbitas periódicas clássicas curtas do sistema. As ressonâncias e suas respectivas larguras são obtidas através dos zeros de cada função  $\zeta$ ;
- Abordagem quântica sem aproximações através do formalismo da matriz  $S$  independente do tempo. Introduzido inicialmente por Berry (BERRY, 1981) e posteriormente melhorado Gaspard e Rice, baseando-se no método de Berry (GASPARD; RICE, 1989a). As ressonâncias e suas larguras são obtidas através dos zeros do determinante da matriz de espalhamento. Outro método baseia-se no formalismo da função de Green particularizada para bilhares (ROSENQVISTY et al., 1996).

Em nosso trabalho, usamos pela primeira vez o MCP para discutir o espalhador bidimensional formado por três discos, de raio  $r$ , com seus centros localizados sobre os vértices de um triângulo equilátero de lado  $R$ , como é mostrado na figura 5.1. A onda incidente é uma onda plana  $\varphi(\vec{r}) = \exp[i\vec{k} \cdot \vec{r}]$ , com direção de incidência ao longo do eixo  $y$  positivo. Em todas as simulações o valor do raio de cada um dos círculos é  $r = 1,0$  e a matriz  $T$  tem tamanho  $N = 900$ . Foram feitas simulações para vários conjuntos de parâmetros, porém, aqui serão mostrado apenas alguns dos casos, os quais englobam uma visão geral dos resultados.

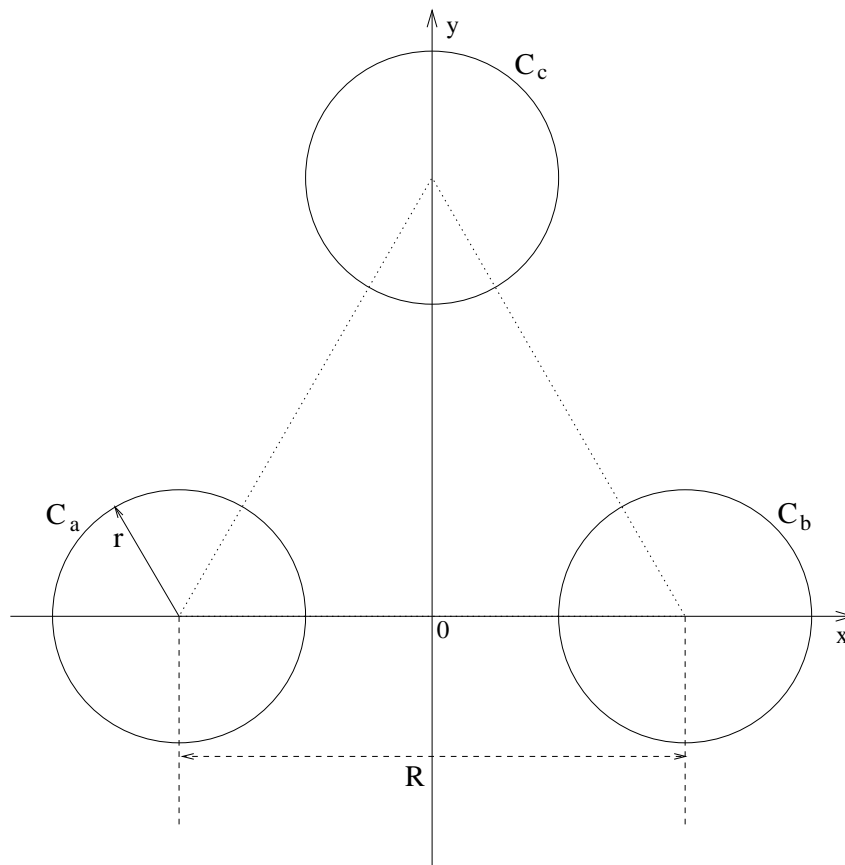


Figura 5.1: Estrutura simulada consistindo de três discos espalhadores.

## 5.2 Espalhador formado por discos rígidos

Nesta seção, serão obtidas as soluções para um espalhador formado por discos rígidos, ou seja, com  $\gamma \rightarrow \infty$ . Este é o caso usualmente estudado na literatura.

### 5.2.1 Solução de espalhamento e quase-estados

A figura 5.2 mostra o primeiro estado quase-ressonante do bilhar de três discos rígidos com separação  $R = 2,89$ , a onda incidente possui número de onda  $k = 2,848$ . O modo ressonante criado na parte interna do espalhador é o estado quântico associado à primeira órbita do sistema clássico análogo (GASPARD et al., 1994; WIRZBA, 1999), mostrada na figura 5.3 como o triângulo interno I.

O comprimento de onda  $\lambda$  do modo interno aos três discos é, aproximadamente, duas vezes o comprimento  $R - 2r$  do lado do triângulo I (ver figura 5.3). Foi verificado que esta é uma regra geral de razões de tamanhos para o primeiro modo quase-ressonante, seja qual for conjunto de parâmetros  $(R, r)$ , desde que o triângulo I também seja equilátero, caso em que os

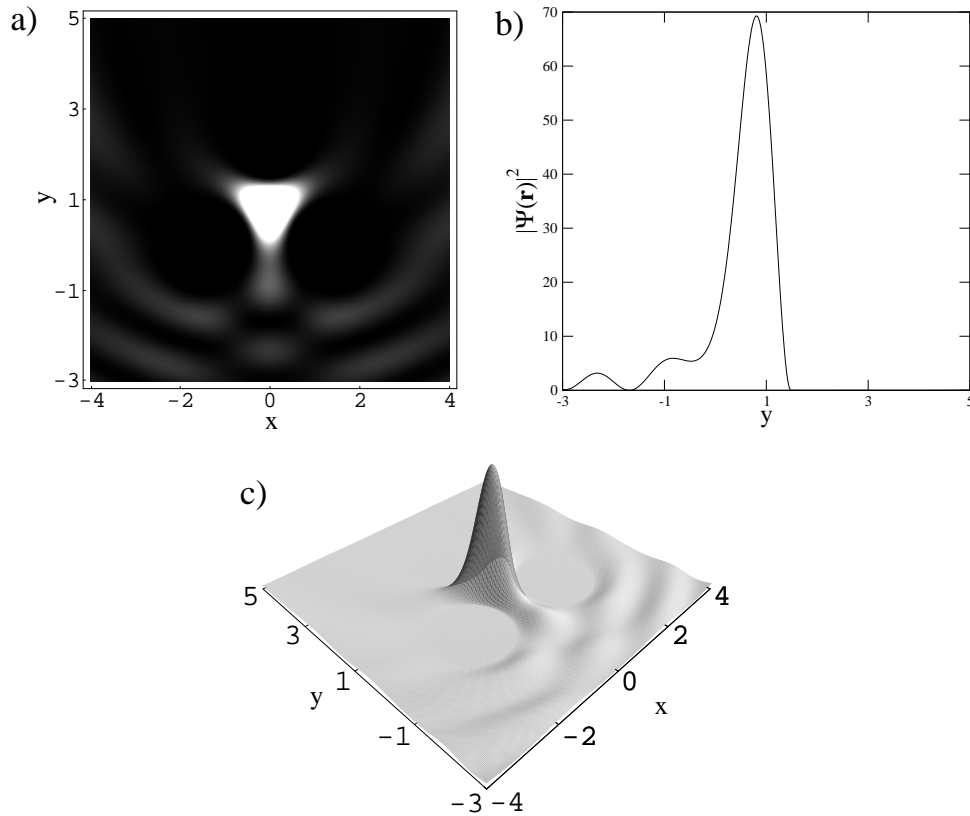


Figura 5.2: a) Gráfico de densidade, b) corte em  $x = 0, 0$  e c) gráfico 3D para  $|\psi(\vec{r})|^2$ . Parâmetros  $R = 2,89$  e  $k = 2,848$ .

raios dos discos são iguais.

Uma maneira muito interessante de se determinarem os estados quase-ressonantes de um espalhador aberto como o bilhar de três discos é analisar a variação da integral da parte espalhada da função de onda  $|\psi^{esp}(\vec{r})|^2$ , isto é, desconsiderando a onda incidente ( $\psi^{esp} = \psi - \varphi$ ), sobre um semi-círculo de raio  $R_a$  e centro no meio do lado  $ab$  do triângulo E. Sendo  $s_a$  pontos sobre este semi-círculo  $S_a$  definimos

$$F(k) = \int_{S_a} |\psi^{esp}(\vec{r}_a)|^2 ds_a, \quad (5.1)$$

que adquire a forma discretizada

$$F(k) = \sum_{i=1}^L |\psi_i^{esp}(\vec{r}_i)|^2 ds_i, \quad (5.2)$$

na qual  $L$  é o número de divisões na discretização de  $S_a$  e  $\vec{r}_i$  é um vetor posicionado sobre o centro de cada elemento  $ds_a$  de  $S_a$ .

Usamos apenas a parte espalhada  $|\psi^{esp}(\vec{r}_a)|^2$  da função de onda nas integrais (5.1) e

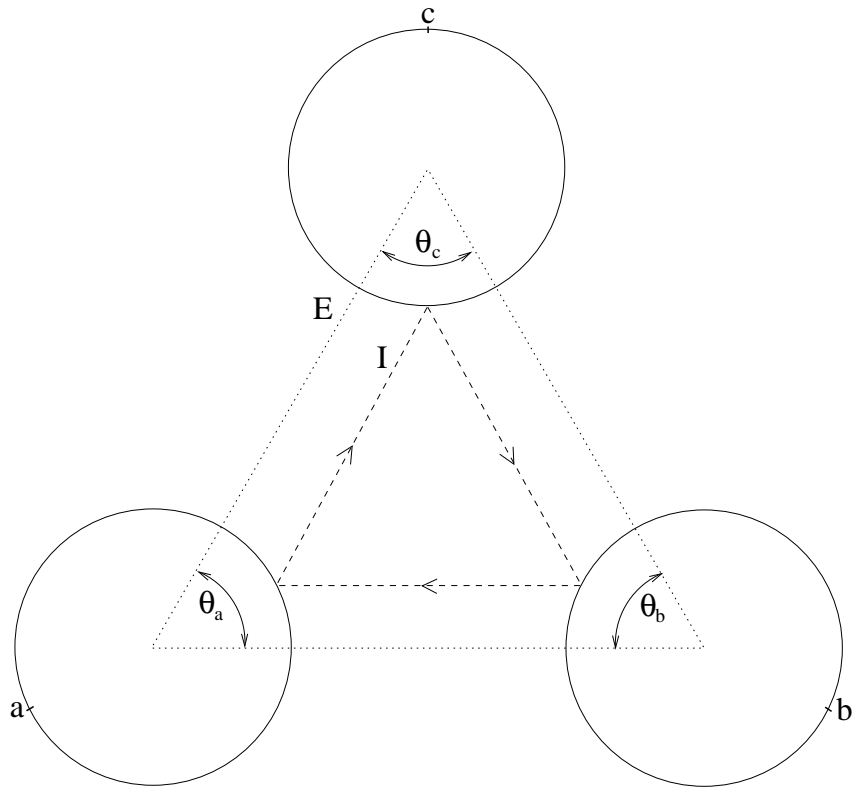


Figura 5.3: Trajetória da 1ª órbita quase-estável **I**, do bilhar de três discos clássico, associada ao primeiro modo ressonante e áreas de estabilidade  $\theta_i$  do sistema.

(5.2), para garantir que apenas a parte que realmente interage com os três discos esteja sendo considerada, e que assim possamos observar mais claramente os resultados, sem a interferência de  $\psi^{esp}$  com a onda incidente. Escolha análoga é feita em tratamentos que visam medir a seção de choque de espalhadores (SAKURAI, 1994; GASPARD, 1998; ROWE; SIEMENS, 2005).

Fazendo o gráfico de  $F(k) \times k$ , temos que para os números de onda  $k$  dos estados quase-ressonantes devemos observar picos na curva  $F(k)$ . O aprisionamento da partícula incidente na região de espalhamento causa alteração no fluxo da sua função de onda  $|\psi^{esp}(\vec{r}_i)|^2$  sobre alguma região do espaço longe da fronteira do espalhador (GASPARD; RICE, 1989a; SAKURAI, 1994).

Na figura 5.4, é mostrado o gráfico de  $F(k) \times k$  para discos com separação de  $R = 2,89$ . O primeiro pico indicado é referente ao primeiro estado quase-ressonante já mostrado em 5.2. O segundo é relacionado com a segunda solução quase-estável desta estrutura, que é uma órbita de *bouncing ball* entre os círculos  $C_a$  e  $C_b$ , uma reminiscência da solução do problema de dois discos (GASPARD et al., 1994).

Estes dois estados quase-ressonantes são os de vida mais longa no sistema. Estados de vida mais curta não são detectados pelo MCP, pois, sendo ele um método de espalhamento

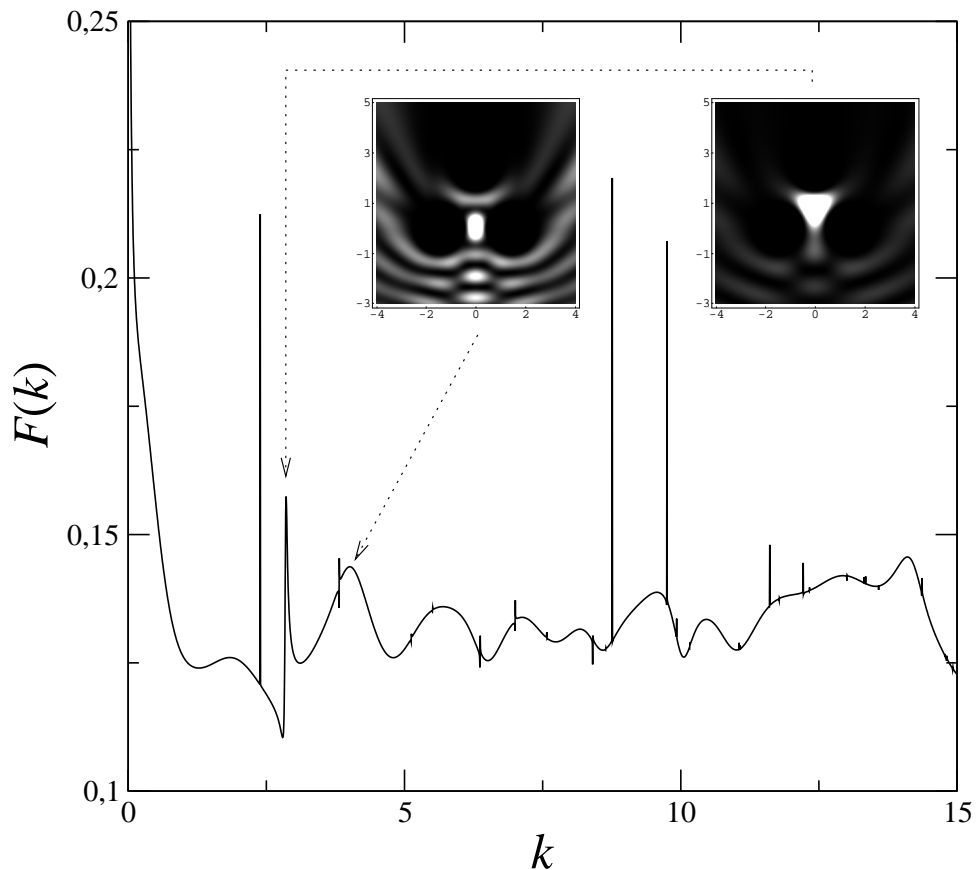


Figura 5.4:  $F(k) \times k$  para o sistema de três discos com separação de  $R = 2,89$ . As setas indicam respectivamente as posições do 1º e 2º estados quase-ressonantes, os quais são mostrados em detalhe. As descontinuidades na curva são associadas a ressonâncias internas dos círculos. Note que o segundo estado corresponde a um *bouncing ball*

estacionário, leva em conta a solução com  $t \rightarrow \infty$  (GASPARD; RICE, 1989a). É importante salientar que este resultado é uma característica de qualquer método estacionário.

Como o pico do primeiro modo é mais agudo, um pequeno acréscimo  $dk$  ao número de onda quase-ressonante faz com que saíamos do seu máximo e percamos a ressonância. O segundo modo possui um pico mais alargado, o que confere maior estabilidade à ressonância quando  $k$  é sujeito a variações em torno do valor exato.

Os resultados obtidos nesta análise são semelhantes aos já bem estabelecidos na literatura, que levam em consideração o estudo da variação abrupta da seção de choque de espalhamento nas proximidades de ressonâncias (ver, por exemplo, a referência (SAKURAI, 1994)). Tal técnica é também explorada no caso dos três discos por Gaspard e Rice em (GASPARD; RICE, 1989a).

Ainda na figura 5.4, os vários picos mais agudos que aparecem estão relacionados às

ressonâncias internas dos círculos. *A priori*, a solução de espalhamento não deveria apresentar traços das soluções internas, porém estas só podem ser evitadas totalmente na medida que a solução numérica tende ao resultado analítico, ou seja,  $N \rightarrow \infty$ .

Uma maneira “prática” de evitarmos as soluções internas dos discos é aumentar o intervalo  $dk$  para o qual é calculado o  $F(k)$  na região da ressonância interna. Tal fato pode ser observado na figura 5.5, onde é mostrada em detalhe a região do espectro próxima ao primeiro modo. No gráfico observa-se que, com maior  $dk$ , os picos referentes às ressonâncias internas dos discos diminuem. Outra opção (mais custosa computacionalmente) é aumentar  $N$ . Porém, tais procedimentos nem sempre são relevantes à análise pois, das figuras 5.4 e 5.5 percebe-se que a forma aguda das ressonâncias internas dos discos são totalmente diferenciadas daquelas referentes aos estados quase-ressonantes. Isto faz com que a identificação das ressonâncias pertencentes aos diferentes casos seja imediata.

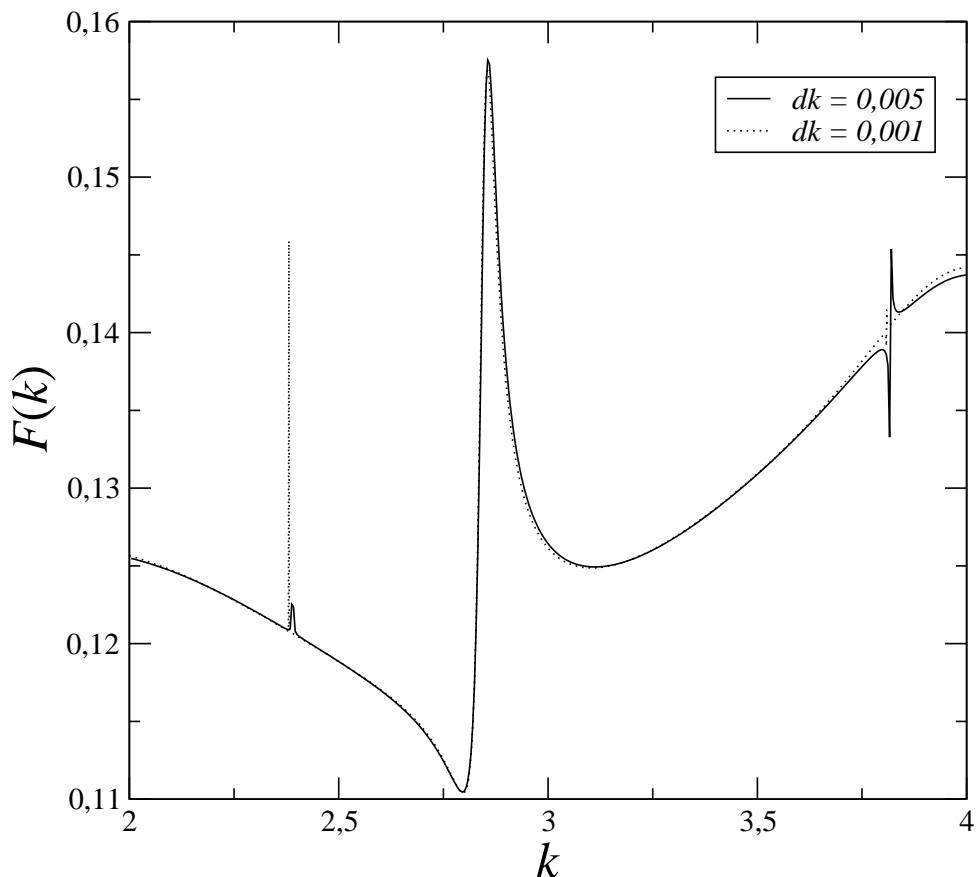


Figura 5.5: Detalhe de  $F(k) \times k$ , com  $R = 2,89$ , na região do primeiro modo quase-ressonante para valores diferentes de discretização em  $k$ .

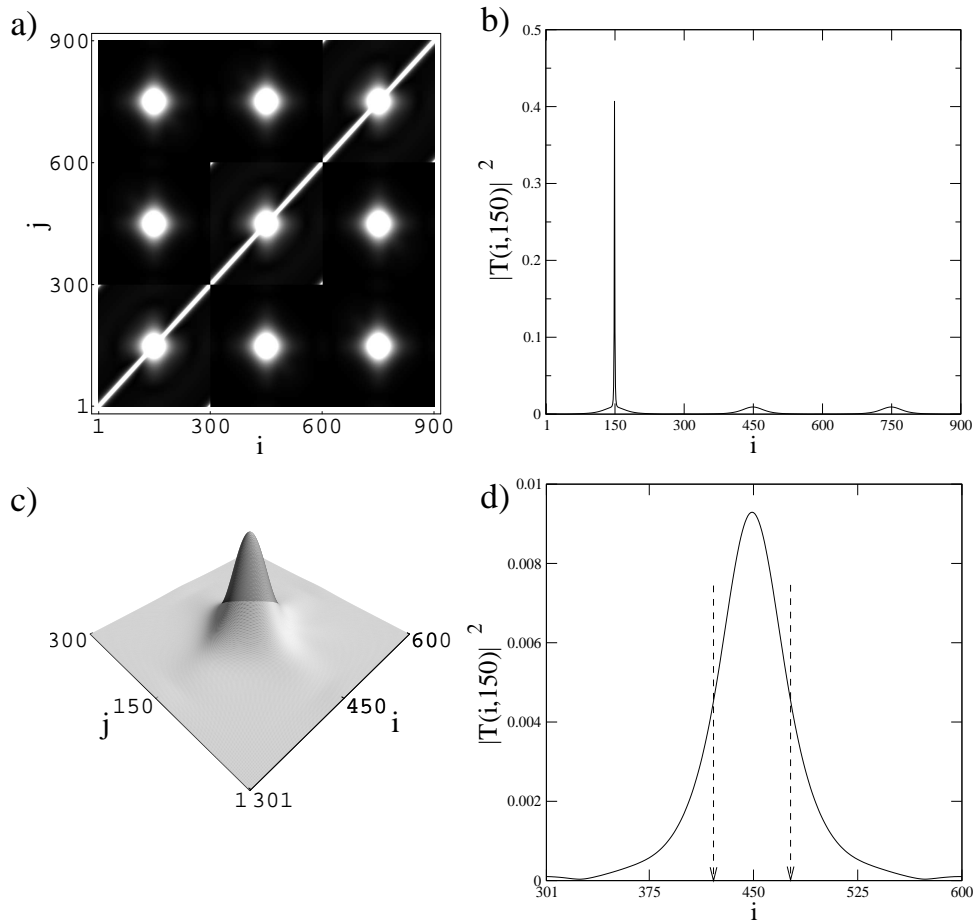


Figura 5.6: a) Gráfico de densidade matriz  $|T(i, j)|^2$  para  $R = 2,89$  e  $k = 2,848$ , energia do primeiro modo ressonante do sistema de 3 discos. b) corte na matriz em  $j = 150$ . c) gráfico 3D e d) corte ( $j = 150$ ) em  $|T(i, j)|^2$  na região de interação dos discos  $C_a$  e  $C_b$ .

## 5.2.2 Matriz $T$ e estabilidade da região de espalhamento

Nos capítulos anteriores, a análise da matriz  $T$  provou-se proveitosa no tratamento de estados ressonantes de bilhares fechados, fato que, em grande parte, deve-se à sua compatibilidade com o princípio da dualidade dentro-fora. Sistemas abertos, como é o caso do espalhador formado de três discos, não possuem mais tal característica, porém veremos que  $T$  ainda guarda informações interessantes acerca dos seus quase-estados.

Na figura 5.6 é mostrada a matriz  $T$  para o espalhamento de uma onda com  $k = 2,848$  por três discos com separação  $R = 2,89$ . Esta é a matriz correspondente ao primeiro estado quase-ressonante explorado na seção anterior.

Para um melhor entendimento da análise da matriz  $T$ , é preciso entender sua estrutura, que é diretamente ligada à maneira como é discretizada e construída a fronteira espalhadora. O arranjo da matriz  $T_{ij}$  obedece à seguinte disposição: tomemos o índice  $i$ , que começa no

ponto  $a$  (ver figura 5.3), sobre o disco  $C_a$ . Assim sendo este ponto corresponde a  $i = 1$ , que corre todo o círculo  $c_a$ , gerando  $\frac{N}{3}$  elementos. A seguir passa-se para o disco  $C_b$  no ponto  $b$ , elemento  $i = \frac{N}{3} + 1$  e assim por diante. Sendo o tamanho  $N$  da matriz igual a 900 e ainda cada disco tendo sido discretizado igualmente, as regiões da matriz correspondentes a cada disco são então  $\{1, 300\}$ ,  $\{301, 600\}$  e  $\{601, 900\}$ , respectivamente.  $T$  é dividida em 9 blocos distintos, cada um associado a um dos três círculos espalhadores, da seguinte forma esquemática

$$\begin{pmatrix} C_a & C_a, C_b & C_a, C_c \\ C_b, C_a & C_b & C_b, C_c \\ C_c, C_a & C_c, C_b & C_c \end{pmatrix}$$

Como a matriz não é dependente da direção de incidência da onda, a interação dos três discos é igual para todas as combinações. Logicamente, elementos associados ao mesmo espalhador são os que determinam a dinâmica interna do disco, como visto analiticamente na seção 2.5.

Nos gráficos c) e d) da figura 5.6, é mostrada a região da matriz correspondente à interação entre os discos  $C_a$  e  $C_b$  (ver figura 5.1). Em d) percebe-se que  $|T(i, j)|^2$  possui uma forma gaussiana. A curva é centrada exatamente no ponto oposto a  $b$ , sobre o vértice do triângulo I da figura 5.3, este é o ponto de colisão da órbita instável de uma partícula vinda de  $C_a$  atingindo  $C_b$ . Os pontos onde o triângulo externo E corta o disco são mostrados na figura c) por flechas pontilhadas. Percebe-se que a maior parte da área da gaussiana está localizada na região compreendida pelo ângulo  $\theta_b$ . Conclusões semelhantes são obtidas para a interação de  $C_a$  com  $C_c$  e  $C_b$  com  $C_c$ , fornecendo resultados idênticos. As caudas da gaussiana correspondem à parte do disco que não intersectam o triângulo E. Classicamente tal região ou não pode ser atingida por uma partícula vindo da posição  $j = 150$  do disco  $C_a$  (logo uma região de “sombra”), ou então defocaliza a trajetória, isto é, leva a partícula a se afastar do sistema. Logo, as trajetórias incidentes sobre os arcos dos discos compreendidos entre os ângulos  $\theta_a$ ,  $\theta_b$  e  $\theta_c$  (ângulos internos do triângulo E) por uma análise clássica são os que podem contribuir mais para estados aprisionados, dando origem ao estado quase-ressonante observado na figura 5.2.

### **Comparação entre a matriz $T$ de espalhadores formados por três discos e por três refletores**

Para uma análise comparativa dos resultados obtidos para a matriz  $T$  no sistema de três discos, simulamos um sistema espalhador formado por três paredes refletoras, como mostrado na figura 5.7. Tal situação tem como objetivo caracterizar como um sistema semelhante



ao caso de três discos, mas sem a curvatura, logo não tendo efeito desfocalizador, diferencia-se do primeiro.

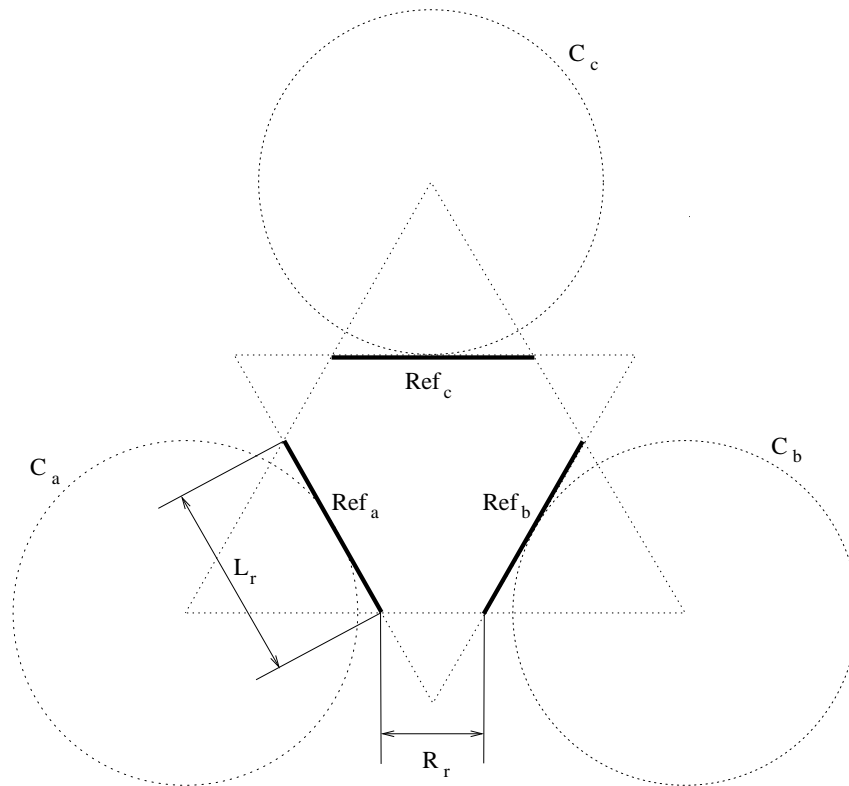


Figura 5.7: Sistema espalhador formado por três refletores. A figura mostra como é feita a determinação da composição do sistema a partir da estrutura do espalhador formado por três discos. As partes pontilhadas da figura servem apenas como ilustração e não fazem parte da estrutura espalhadora.

Na figura 5.8 é mostrada a matriz  $T$  para o sistema espalhador de três refletores com  $R_r = 0,597$ ,  $L_r = 1,15$  e uma onda incidente com número de onda  $k = 3,01$ . Este é o primeiro modo quase-ressonante da estrutura, encontrado da mesma maneira já descrita anteriormente para os três discos. Da figura nota-se que apesar das estruturas serem semelhantes (note que a construção dos refletores é baseada na geometria dos triângulos I e E) e mesmo as energias sendo próximas com uma diferença de apenas 5,5%, a matriz  $T$  é totalmente distinta.

Nos gráficos b) e c), respectivamente, corte em  $|T(i, j)|^2$  e detalhe no seu segmento correspondente à interação entre os refletores  $Ref_a$  e  $Ref_b$ , as partes inicial e final do refletor geram elementos de matriz com maior amplitude. Porém, isto deve-se à difração da onda nas bordas dos refletores e não tem relação com o modo quase-ressonante aprisionado na estrutura. Afastando-se das bordas e analisando a parte mais interna do refletor percebe-se que existe uma variação muito pequena na amplitude de  $|T(i, j)|^2$  (apenas 0,0001) que lembra uma curva parabólica centrada no meio do refletor, porém muito achatada. Neste caso, os pontos de mínimo

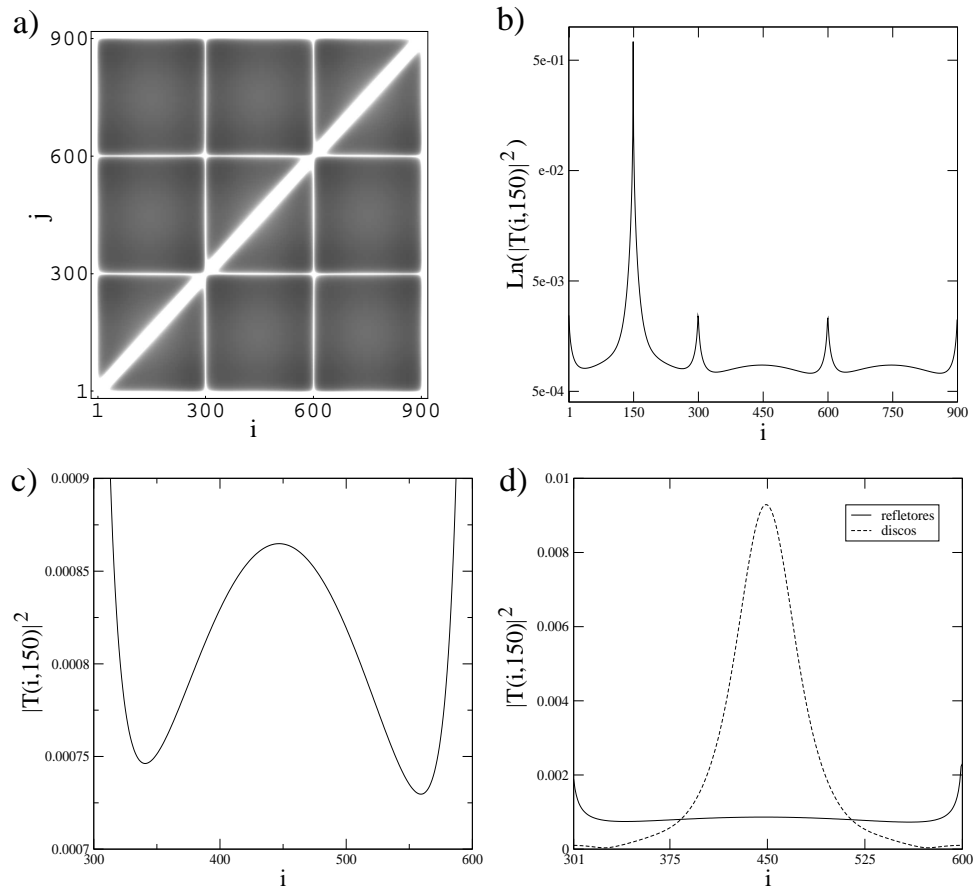


Figura 5.8: a) Gráfico de densidade matriz  $|T(i, j)|^2$  para  $R = 0,597$  e  $k = 3,01$ , energia do primeiro modo ressonante do sistema de 3 refletores. b) corte na matriz em  $j = 150$ . c) corte ( $j = 150$ ) em  $|T(i, j)|^2$  na região de interação dos refletores  $Ref_a$  e  $Ref_b$ . d) Comparação do corte na matriz para o caso dos refletores e discos.

não tendem a zero como no caso dos discos, além de não serem simétricos,  $|T(i, j)|^2_{min} \approx 0,00075$  e  $0,00073$ . Pode-se concluir então que quase todo o comprimento  $L_r$  do refletor contribui para o aprisionamento do modo interno e não existe uma área de maior importância, como no caso dos três discos.

### 5.3 Espalhador formado por discos permeáveis

Como visto nos capítulos anteriores, sistemas permeáveis são casos de grande importância e amplamente explorados na física de espalhamento, seja teórica ou experimental. Porém, a despeito de seu grande interesse, até o momento não são conhecidas por nós aplicações deste tipo de análise no caso dos bilhares caóticos abertos, do tipo de  $n$ -discos. Assim, esta subseção tratará o sistema de três discos submetido a permeabilidades finitas.

### 5.3.1 Solução de espalhamento e quase-estados para discos com permeabilidade $\gamma$ finita

Aqui queremos comparar os resultados obtidos na subseção 5.2.1 para a função de onda  $|\psi(\vec{r})|^2$  do primeiro modo quase-ressonante onde  $\gamma \rightarrow \infty$  com o comportamento da mesma estrutura após a inserção da permeabilidade finita.

Ao invés de trabalharmos diretamente a quantidade  $\gamma$  para o sistema, iremos utilizar a relação

$$\gamma = 2k \sqrt{\frac{1}{\mathcal{T}} - 1}$$

para defini-la através da transmissão  $\mathcal{T}$ , um conceito mais intuitivo do ponto de vista físico. O número de onda  $k$  e os parâmetros  $R$  e  $r$  utilizados são os referentes ao primeiro estado quase-ressonante da subseção 5.2.1.

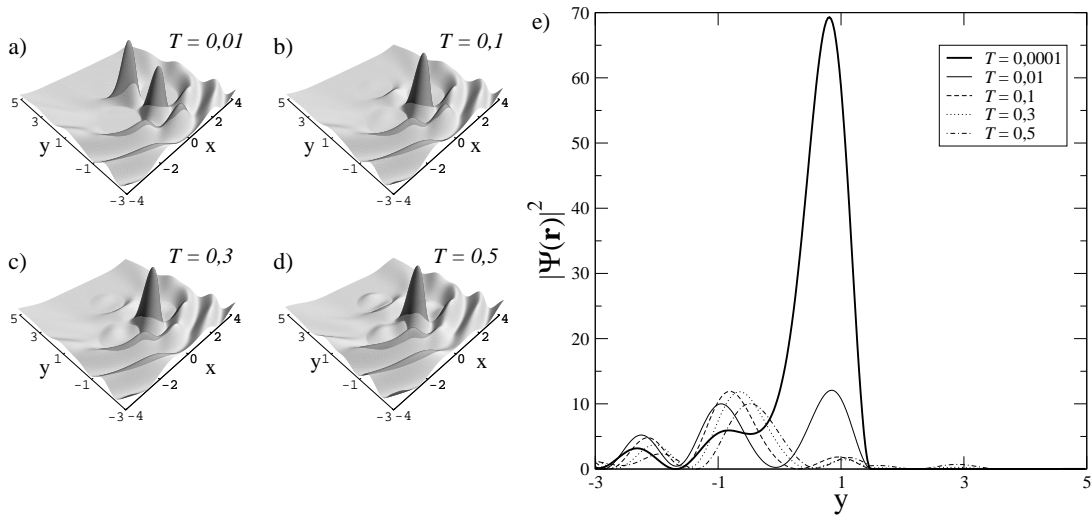


Figura 5.9: a)-d) gráficos 3D de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para diferentes valores de transmissão  $\mathcal{T}$ . e) Cortes na função de onda em  $x = 0,0$  para cada caso. Para efeito de comparação é plotado também em e) o corte para  $\mathcal{T} \rightarrow 0,0$  (linha cheia mais grossa). Em todos os gráficos  $\mathcal{T}_a = \mathcal{T}_b = \mathcal{T}_c = \mathcal{T}$

Na figura 5.9 de a)-d) são mostrados gráficos 3D da função de onda para valores diferentes de transmissão. Em cada gráfico todos os discos têm o mesmo  $\mathcal{T}$ . Percebe-se que com a transmissão  $\mathcal{T} = 0,1$ , o quase-estado já é quase totalmente perdido. Em e) é mostrado o gráfico com cortes em  $x = 0,0$ , para  $|\psi(\vec{r})|^2$  de cada caso. Note que, para o valor muito pequeno de  $\mathcal{T} = 0,0001$ , o sistema apresenta comportamento de fronteira rígida. Neste caso, o modo aprisionado no interior da estrutura é mais de 25 vezes maior que a parte externa da função de onda. Na curva seguinte (curva contínua mais fina), com transmissão de 1% o quase-estado ainda se mantém na parte interna mas, em comparação com a curva anterior, sofre uma diminuição

significativa e agora sua amplitude é quase a mesma da parte externa. Nas próximas curvas (tracejada:  $\mathcal{T} = 0,1$ , pontilhada:  $\mathcal{T} = 0,3$  e traço-ponto:  $\mathcal{T} = 0,5$ ), a medida que a transmissão aumenta e o modo interno adquire a liberdade de penetrar no interior do disco, a possibilidade deste ser aprisionado entre os três discos praticamente extingue-se. Isto pode ser visto pelos gráficos 3D onde, a partir de 0,1, a porção da função de onda interna à região espalhadora tem o comportamento apenas da uma onda espalhada. Analisando do ponto de vista da dinâmica de uma partícula presa no interior da estrutura, o aumento da permeabilidade dos discos diminui a barreira de potencial que aprisiona a partícula, conferindo a esta crescente possibilidade de escapar de sua ação.

Nas figuras 5.10 e 5.11, a transmissão é fixada em  $\mathcal{T} = 0,0001$  (comportamento de disco rígido) para dois dos discos, enquanto é variada no disco restante.

Em 5.10 é mantida fixa a permeabilidade em  $C_a$  e  $C_c$  e variada no disco  $C_b$ . O comportamento geral é semelhante ao caso anterior, porém a amplitude do modo quase-ressonante se mostra menos susceptível ao aumento da transmissão, como pode ser constatado pelo gráfico c) onde, para  $\mathcal{T} = 0,3$ , ainda existe uma pequena parte de  $\psi(\vec{r})$  aprisionada. Obviamente que por simetria, os resultados são totalmente análogos se fixarmos  $C_b$  e  $C_c$  e variamos  $C_a$ .

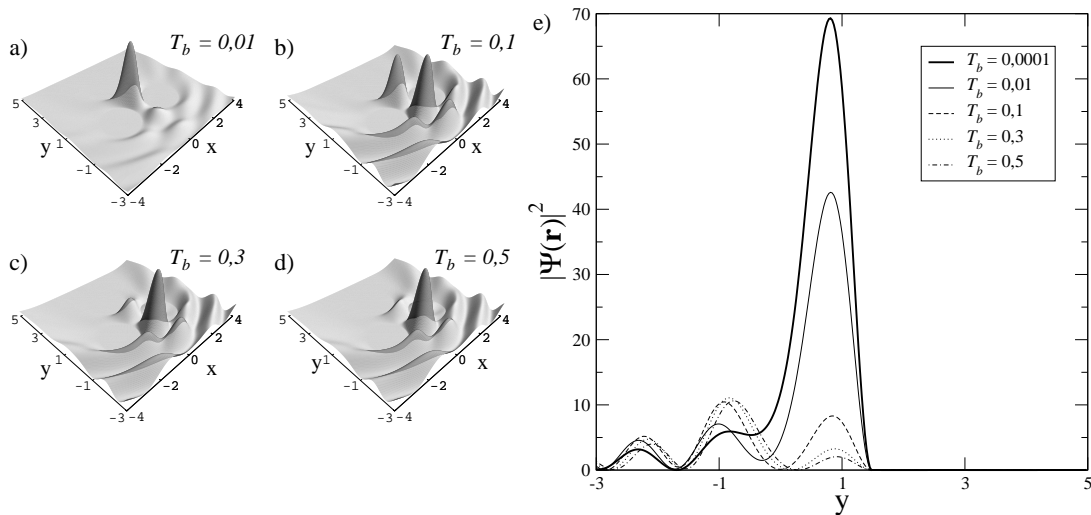


Figura 5.10: a)-d) gráficos 3D de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para diferentes valores de transmissão  $\mathcal{T}_b$ . e) Cortes na função de onda em  $x = 0,0$  para cada caso. Para efeito de comparação é plotado também em e) o corte para  $\mathcal{T} \rightarrow 0,0$  (linha cheia mais grossa) em todos os discos. Em todos os gráficos  $\mathcal{T}_a = \mathcal{T}_c = 0,0001$ .

Na figura 5.11 a transmissão é variada apenas no disco  $C_c$ . Neste caso, o modo quase-ressonante se perde mais rápido que em 5.10. Para transmissão  $\mathcal{T} = 0,1$ , vemos de  $|\psi(\vec{r})|^2$  que existe um modo interno que já é muito menor do que a onda na parte externa da estrutura e para  $\mathcal{T} = 0,3$  o bilhar não consegue mais aprisionar o modo, restando apenas um traço muito tênue

da função de onda no interior estrutura, associado apenas a solução de espalhamento.

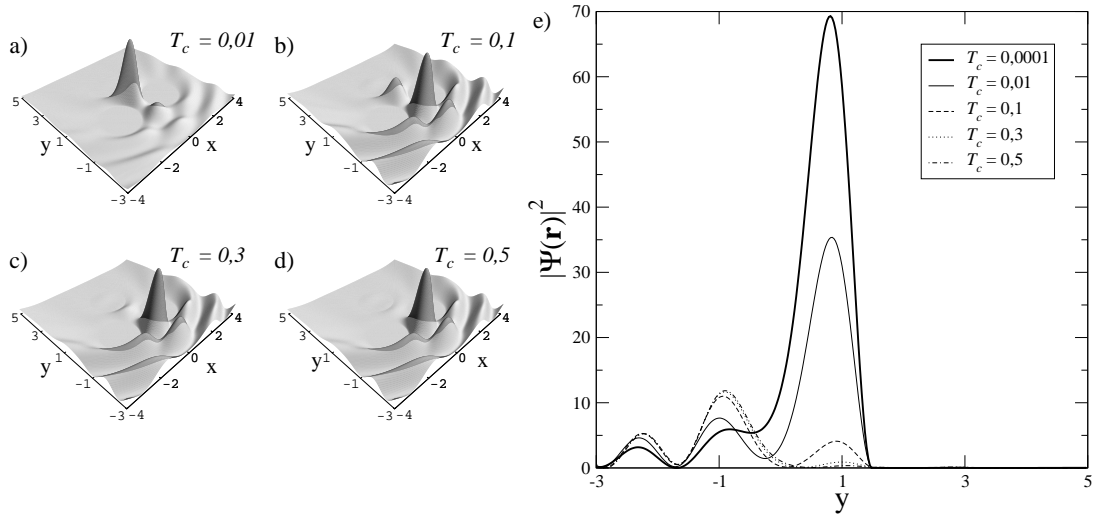


Figura 5.11: a-d) gráficos 3D de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para diferentes valores de transmissão  $T_c$ . e) Cortes na função de onda em  $x = 0,0$  para cada caso. Para efeito de comparação é plotado também em e) o corte para  $\mathcal{T} \rightarrow 0,0$  (linha cheia mais grossa) em todos os discos. Em todos os gráficos  $\mathcal{T}_a = \mathcal{T}_b = 0,0001$ .

Na figura 5.12 foi feito o inverso do caso anterior, ou seja, a transmissão  $\mathcal{T}$  foi mantida constante (igual a 0,0001) em  $C_c$  e variada nos outros dois discos. Este caso apresenta um comportamento muito semelhante ao anterior, porém, o modo tem sensibilidade ainda maior ao aumento da transmissão, como pode ser visto na figura para  $\mathcal{T} = 0,1$ , quando as estruturas

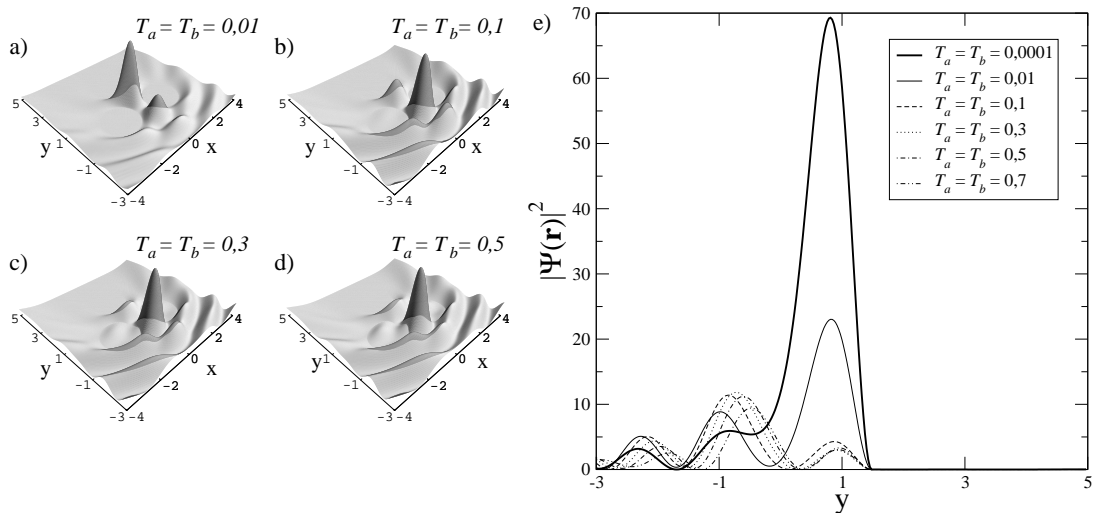


Figura 5.12: a-d) gráficos 3D de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para diferentes valores das transmissões  $\mathcal{T}_a$  e  $\mathcal{T}_b$ .  $\mathcal{T}_a = \mathcal{T}_b$  em cada gráfico. e) Cortes na função de onda em  $x = 0,0$  para cada caso. Para efeito de comparação é plotado também em e) o corte para  $\mathcal{T} \rightarrow 0,0$  (linha cheia mais grossa). Em todos os gráficos  $\mathcal{T}_c = 0,0001$ .

internas para  $\psi$  são devidas apenas ao espalhamento por  $C_c$ .

### Varição de $k$ quase-ressonante devido à transmissão

Nas simulações discutidas até agora, mostramos a perda sucessiva de um quase-estado ao aumentarmos a permeabilidade de um ou mais discos da estrutura espalhadora. Para tanto, foi fixada a energia da onda incidente. Em todos os casos notamos que o modo quase-ressonante consegue manter-se até certo valor de permeabilidade para os discos.

Nesta seção abordaremos o mesmo problema pela visão inversa, ou seja, observaremos como a energia do quase-estado muda em sistemas com permeabilidade fixa.

Na figura 5.13.a), é feito o gráfico de  $F(k) \times k$  para valores diferentes de transmissão nos discos, com  $\mathcal{T}_a = \mathcal{T}_b = \mathcal{T}_c = T$  em cada curva. A curva cheia mais grossa é a referente ao modo quase-ressonante para  $T \rightarrow 0$  ( $\gamma \rightarrow \infty$ ), analisada anteriormente na figura 5.5. Nas demais curvas observa-se uma “migração” do pico correspondente ao número de onda  $k$  quase-ressonante para valores mais baixos. Este fenômeno deve-se a um certo “acomodamento” que o quase-estado vai sofrendo no interior da estrutura à medida que a transmissão aumenta. Uma vez que agora  $\psi$  possui a probabilidade de penetração no interior dos discos permeáveis, seu mínimo, que antes era localizado exatamente sobre a parede (figura 5.14.a)), é agora transladado para o interior do espalhador, como é mostrado esquematicamente na figura 5.14.b). Este processo ocasiona um acréscimo no comprimento de onda  $\lambda$  e, conseqüentemente, a diminuição

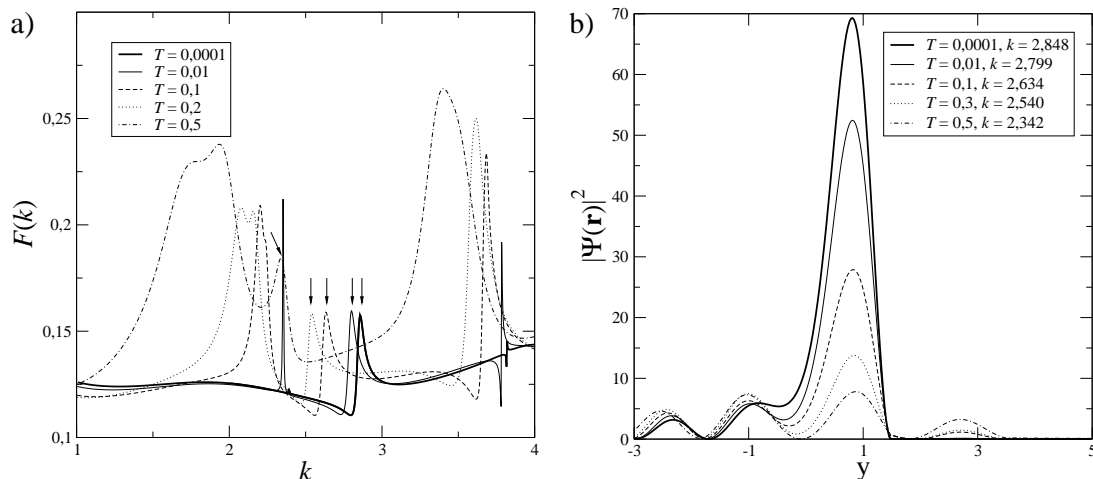


Figura 5.13: a) Curvas  $F(k) \times k$  para diferentes valores de transmissão nos discos, onde a posição do pico referente ao primeiro quase-estado é indicado pelas flechas. b) cortes em  $|\psi(\vec{r})|^2$  ( $x = 0, 0$ ) para o modo ressonante de cada curva do gráfico a). Em todas em cada curva  $\mathcal{T}_a = \mathcal{T}_b = \mathcal{T}_c = \mathcal{T}$ .

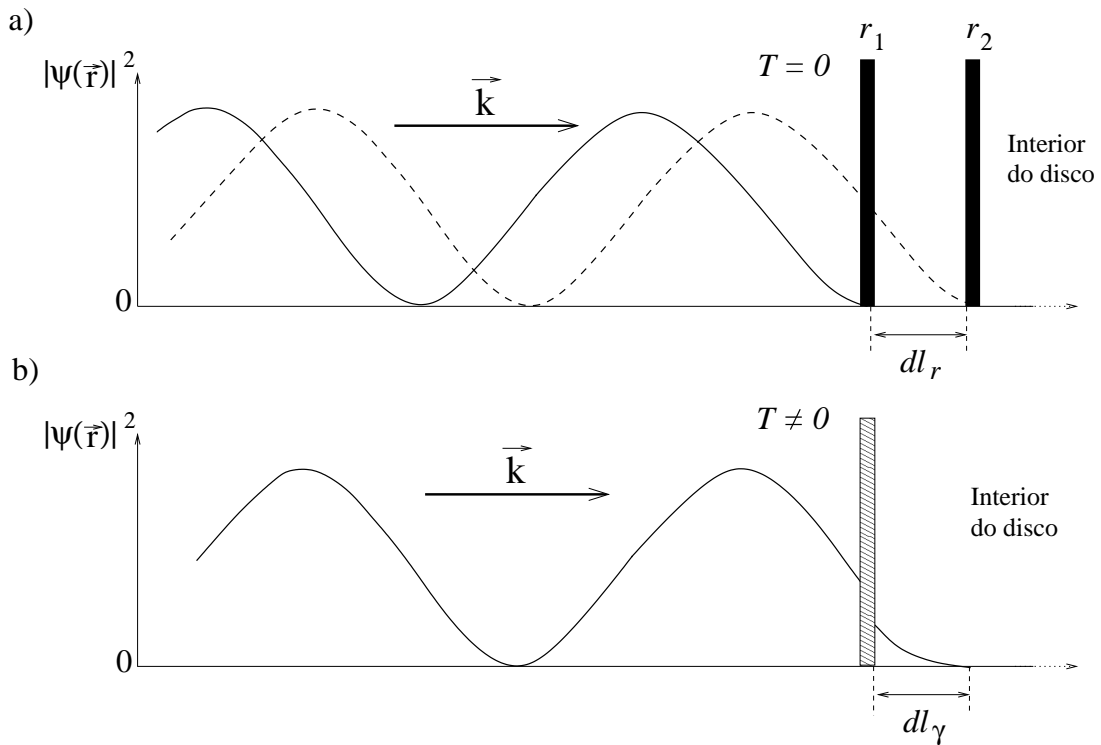


Figura 5.14: Comportamento de uma onda incidente na parede de a) um disco rígido  $\mathcal{T} = 0$  e b) um disco permeável  $\mathcal{T} \neq 0$ . Em a) são mostradas ainda duas posições diferentes da parede, correspondendo a dois raios do disco, sendo  $r_2 < r_1$ .

de  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ . O mesmo fenômeno é observado para as ressonâncias dos discos, porém, neste caso o relaxamento acontece de dentro para fora.

Observa-se ainda em 5.13.a) que até aproximadamente  $T = 0,3$ , a largura e a altura do pico referente ao quase-estado permanecem constantes, ou seja, sua estabilidade perante variações em torno do valor quase-ressonante só vem a ser significativa para valores altos de transmissão. O mesmo não acontece com os autoestados individuais dos círculos, um pequeno aumento na transmissão já é suficiente para alargar consideravelmente e diminuir a amplitude dos picos. Esta diferença de comportamento entre os dois casos é devida às diferentes estabilidades dos modos em bilhares abertos e fechados.

O gráfico em 5.13.b) mostra os cortes na função de onda  $|\psi(\vec{r})|^2$  ( $x = 0, 0$ ) do primeiro quase-estado associado a cada curva apresentada em a). Percebe-se que a amplitude máxima do modo aprisionado diminui com o aumento da transmissão, porém, mesmo com  $\mathcal{T} = 0,5$ , a estrutura ainda consegue mantê-lo com amplitude comparável à da onda externa.

### Comparação entre a variação da transmissão $\mathcal{T}$ e raio $r$ dos discos

Comentamos anteriormente que a função de onda incidente, que deve-se anular nas paredes dos discos quando  $\mathcal{T} = 0$ , pode penetrar para  $\mathcal{T} \neq 0$ . Devido a esta possibilidade de penetração, o mínimo de  $\psi(\vec{r})$  é transladado de um comprimento  $dl_\gamma$ , para dentro do disco, figura 5.14.b).

A circunstância óbvia em que o mínimo da função de onda varia sua posição é quando o raio do disco tem seu comprimento alterado para o valor  $dl_r$ . No caso de  $\mathcal{T} = 0$ ,  $|\psi(\vec{r})|^2$  ainda irá anular-se sobre a borda do disco, logo seu mínimo acompanhará qualquer mudança na sua posição, como pode ser observado na figura 5.14.a). Seria interessante, então, fazer a comparação entre estas duas “ações” tanto sobre a função de onda  $|\psi(\vec{r})|^2$ , como sobre a função  $F(k)$ , e verificar se existe algum tipo de equivalência qualitativa entre elas.

A figura 5.15 mostra a distribuição angular de  $\psi$  no caso de uma onda incidente de energia  $k = 2,848$  pertencente ao quase-estado estudado anteriormente, espalhada por estruturas nas quais são variados da seguinte maneira os raios  $r$  dos discos: em a) de todos os discos, em c) apenas  $r_b$  e e) apenas  $r_c$ ; e a transmissão  $\mathcal{T}$ : b) em todos os discos, d) apenas em  $C_b$  e f) apenas em  $C_c$ . Quando os raios são variados, a transmissão é fixa e igual a  $\mathcal{T} = 0,0001$  (disco rígido), quando a transmissão é variável, todos os raios valem  $r = 1,0$ . Em todos os gráficos a curva cheia representa o caso regular já estudado anteriormente de discos rígidos com raio  $r = 1,0$ .

Dos resultados obtidos em 5.15, temos que as figuras a) e b), quando mudamos  $r$  ou  $\mathcal{T}$  em todos os discos, são relativamente parecidas com as figuras e) e f) quando  $r$  ou  $\mathcal{T}$  são variados apenas para o disco  $C_c$ . Isto se dá justamente pela simetria que  $C_c$  apresenta levando-se em conta o ângulo da onda incidente. Note que nestes quatro exemplos a maior alteração para  $\psi$  é justamente na amplitude e posição de seus picos. Quando variamos os parâmetros apenas do círculo  $C_b$  tais mudanças também são observadas, mas então pelo caráter assimétrico que o sistema apresenta, são mais acentuadas em um dos lados do gráfico.

Comparando aos pares os gráficos de 5.15 (variação de  $r$  com  $\mathcal{T}$ ,  $r_b$  com  $\mathcal{T}_b$  e  $r_c$  com  $\mathcal{T}_c$ ) percebe-se que, com exceção de pequenas diferenças de amplitude, os comportamentos gerais são muito semelhantes, indicando que existe certa equivalência entre a diminuição do raio e o aumento da transmissão dos discos no caso da onda incidente com energia igual à do modo quase-ressonante. Observando valores de  $k$  fora da quase-ressonância do sistema os resultados são parecidos, porém, mais acentuados, tanto na variação da amplitude quanto no deslocamento da posição dos picos. Isto deve-se ao fato de que não existe mais modo aprisionado na estrutura espalhadora, fazendo com que toda onda incidente seja espalhada e chegue à superfície  $S_a$ ,



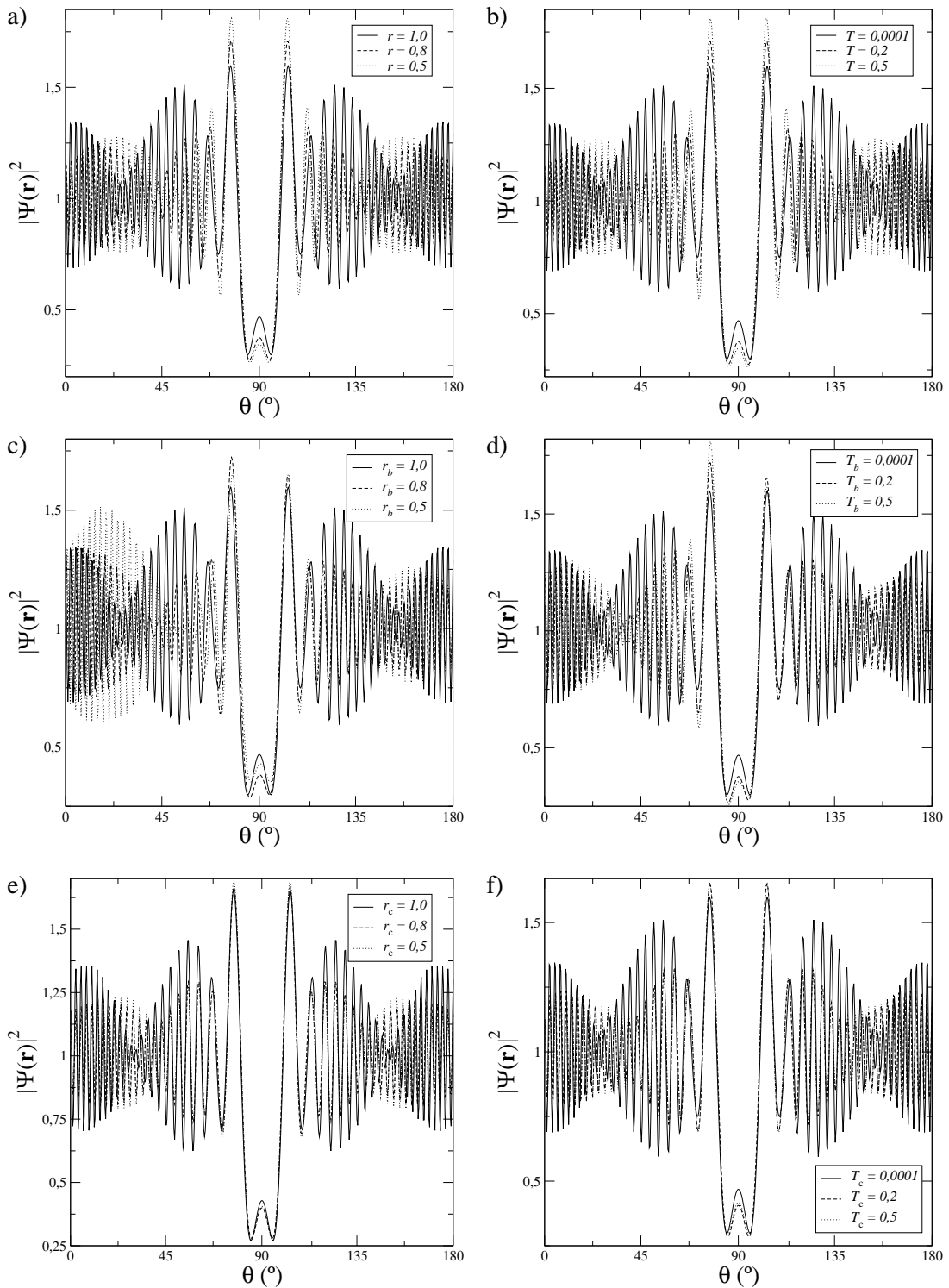


Figura 5.15: Distribuição angular da função de onda  $|\psi(\vec{r})|^2$  para variações do raio e transmissão dos discos para os parâmetros do primeiro modo quase ressonante. a) variação do raio de todos os discos (em cada curva  $r_a = r_b = r_c = r$ ). b) variação da transmissão de todos os discos (em cada curva  $T_a = T_b = T_c = T$ ). Em c) e d) variam  $r_b$  e  $T_b$ , respectivamente. Em e) e f) variam  $r_c$  e  $T_c$ , respectivamente. A medida é feita num raio de, aproximadamente, 10 vezes o tamanho do bilhar.

onde é calculado  $F$ .

A equivalência entre variação de  $\mathcal{T}$  e  $r$  pode ser melhor observada quando é analisado o comportamento de  $F(k)$ . Para efeito de discussão vamos considerar  $(1 - r)$  ao invés de  $r$ .

Na figura 5.16.a), comparando as curvas  $F(k) \times (1 - r_b)$  e  $F(k) \times \mathcal{T}_b$ , percebe-se que ambas apresentam comportamento qualitativo muito parecido. Em 5.16.b) as variações são feitas no disco  $C_c$ . Neste caso, também existe a semelhança qualitativa entre as curvas, porém bem mais acentuada para valores pequenos ( $< 0,2$ ) ou grandes ( $> 0,8$ ) de  $\beta$ . Na região intermediária, as duas curvas apresentam tendências diferentes: o gráfico para  $(1 - r_c)$  cresce linearmente durante boa parte do intervalo, ao passo que o gráfico para  $\mathcal{T}$  apresenta um mínimo local.

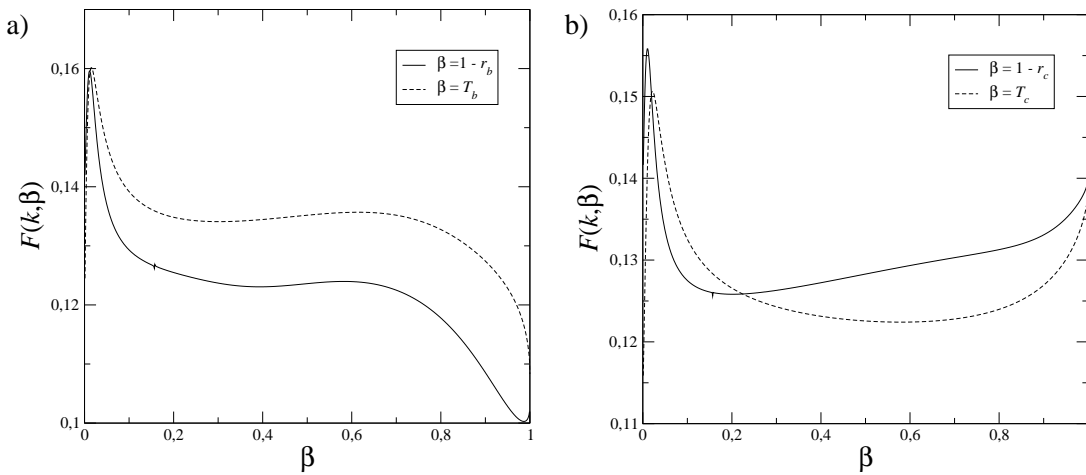


Figura 5.16: Os dois gráficos mostram a comparação do comportamento de  $F(k)$  com a variação da transmissão  $\mathcal{T}$  (curva cheia) e do raio  $r$ . Em a) a variação feita no disco  $C_b$  e em b) no disco  $C_c$ . O onda incidente tem  $k = 2,848$ , valor do modo quase-ressonante.

O pico observado no início de todas as curvas é associado ao estado quase-ressonante do sistema. Sua sobrevivência até aproximadamente  $\mathcal{T} = 0,1$  é mais uma confirmação de que a estrutura global dos discos pode sustentar o quase-estado para perturbações não geométricas relativamente intensas. Seu deslocamento da origem é relacionado à já comentada “relaxação” no seu comprimento de onda.

É interessante notar ainda como o comportamento da quase-ressonância se sobrepõe ao do simples espalhamento em  $F(k)$  visto pelos picos em 5.16.a) e b), que são semelhantes. Entretanto, as formas globais das duas figuras são bastante distintas quando  $\beta \rightarrow 1$ . Tomando 5.16.a),  $F \rightarrow 0$  com  $\beta \rightarrow 1$ , neste limite estamos tendendo ao problema de dois discos, e devido ao ângulo da onda incidente, o espalhador age mais como uma barreira do que como um ressonador. No gráfico 5.16.b)  $F$  sai de um mínimo muito próximo da origem, cresce abruptamente até um máximo relacionado à quase-ressonância, cai novamente até um mínimo e então

crece até o final do intervalo. Este mínimo está relacionado ao limite até o qual o modo quase-ressonante pode ser mantido pelo bilhar. Enquanto a quase-ressonância consegue ser excitada, mesmo que fracamente, a onda incidente consegue penetrar na região interna da estrutura, passando pelos dois discos  $C_a$  e  $C_b$ , e como a área de espalhamento do disco  $C_c$  diminui, a integral de espalhamento  $F$  também decresce. Quando não existe mais a possibilidade da existência da quase-ressonância a onda incidente não consegue mais passar por  $C_a$  e  $C_b$  ocasionando o aumento do espalhamento na região anterior aos dois discos (o que pode ser constatado, por exemplo, na figura 5.11) gerando o aumento de  $F$  na segunda metade do gráfico 5.16.b).

## 5.4 Conclusões parciais

Neste capítulo o método de contorno de paredes foi aplicado no estudo do problema de um bilhar quântico aberto formado por três discos. Corroboramos tanto resultados qualitativos já discutidos na literatura, como propusemos novas análises do sistema, além de estudar uma nova situação, discos permeáveis e suas propriedades de espalhamento.

Foi estudado inicialmente o caso do espalhador formado por discos rígidos, um problema extensamente abordado na literatura, para o qual obtivemos os estados quase-ressonantes de vida longa, através da análise de  $F$ , integral da função de onda espalhada (GASPARD; RICE, 1989a, 1989b, 1989c; SAKURAI, 1994). Por meio de análises da matriz  $T$ , também foi possível observar como funciona a “construção” do primeiro quase-estado.

Na segunda parte da análise estudamos a mesma geometria espalhadora, mas agora formada por discos permeáveis, um tema ainda não explorado até o presente momento. O cálculo da função de onda  $\psi(\vec{r})$  e de  $F$ , possibilitou estudar a dinâmica do primeiro estado quase-ressonante como função da transmissão do bilhar. Dentre os resultados observados destacam-se a “migração” do valor de  $k$  quase-ressonante e a existência de uma equivalência qualitativa entre a variação da permeabilidade e a variação do raio dos discos.

A grande quantidade de resultados obtidos neste capítulo, advinda da liberdade da variação dos parâmetros espalhador e a fácil e rápida implementação numérica do MCP, fazem dele uma interessante abordagem alternativa para o espalhamento quântico de bilhares abertos formado por discos. Outra vantagem que o método apresenta é não existirem expansões e truncamentos como em análises semiclássicas, ou ainda abordar o difícil problema de incluir modos evanescentes (ORTIZ; ALMEIDA, 1997), além de ser um modo mais “visual” e físico de se tratar o problema.

## 6 Bilhares acoplados por guias de onda

O crescimento que a engenharia quântica de sistemas micro e mesoscópicos tem experimentado nas últimas décadas tem ocasionado um aumento na importância do estudo de fenômenos envolvendo estruturas compostas. Estes arranjos são formados pela composição de elementos mais básicos, tais como cavidades e guias de onda, dando origem a novos sistemas, que devem exibir comportamento diferenciado de seus componentes iniciais.

Alguns exemplos da vasta gama de aplicações deste tipo de sistema no âmbito experimental são: fabricação de moléculas artificiais através de pontos quânticos (SADREEV et al., 2005; BRUNNER et al., 2007); construção de máquinas microscópicas (LINKE et al., 2001), etc. Na física teórica sua maior importância reside no estudo qualitativo de caos quântico e sua influência nos fenômenos de transporte (ISHIO et al., 2001).

Estruturas compostas, assim como já visto para suas unidades mais primárias, nada mais são do que problemas de fronteira, os quais podem ser modelados através de formalismos desenvolvidos para solução de bilhares. Vários trabalhos têm sido feitos no sentido de propor e resolver geometrias compostas partindo desta motivação. Alguns exemplos, são:

- bilhares acoplados por guias de onda (FRAHM; PICHARD, 1995; SADREEV et al., 2005), onde o objetivo principal é estudar a distribuição da função de onda na geometria modificada;
- bilhares regulares (SADREEV, 2004; SADREEV et al., 2006) e caóticos (ALT et al., 1998; AKIS et al., 2002; SAICHEV et al., 2002) abertos por meio guias de onda, também chamados de “acoplados ao contínuo”. Neste tipo de sistema é analisada essencialmente a transmissão através do bilhar e o comportamento dos estados ressonantes (soluções associadas àquelas do bilhar original) na nova estrutura.

Neste capítulo, o MCP será aplicado ao estudo de bilhares acoplados através de guias de onda. Devido à grande liberdade que o método confere à escolha e à variação da fronteira espalhadora, sua aplicação mais natural na abordagem deste tipo de estrutura é a análise da

transmissão e comportamento dos autoestados do bilhar, quando sua geometria é modificada.

Três casos serão estudados: dois quadrados acoplados (figura 6.1); um quadrado e um quarto de disco acoplados (figura 6.16) e um quadrado acoplado ao contínuo (aberto) por guias de onda (figura 6.25). O estudo enfocará o comportamento das soluções à medida que os parâmetros associados à guia de onda, tais como largura, comprimento e posição de acoplamento ao bilhar, são mudados.

É importante salientar que tal tipo de análise (proposta acima) não é feita na literatura, sendo, portanto, uma contribuição nova no entendimento destes sistemas. A maioria dos trabalhos opta por manter o foco na forma dos bilhares em si, mantendo em segundo plano o seu meio de ligação. Porém, a despeito de sua simplicidade, a variação da guia de ligação pode levar a resultados que afetam toda a dinâmica do sistema.

Dentre os temas a serem abordados neste capítulo, podem ser citados o limite até o qual os bilhares conservam suas soluções individuais, os novos autoestados criados na estrutura composta, o limite que as dimensões da guia impõem ao acoplamento entre as soluções, a influência da posição de ligação da guia de onda na criação e transmissão dos modos através da estrutura, etc.

Nas simulações que serão mostradas neste capítulo, o tamanho  $N \times N$  da matriz  $M_{ij}$  não é fixo. É necessário que  $N$  se ajuste em cada diferente estrutura, a fim de manter constante o valor de cada elemento infinitesimal  $ds$  ( $= \text{perímetro}/N$ ) na discretização do bilhar. Fazer  $ds$  constante garante que é mantida precisão nos cálculos para todos os casos. Em todo o capítulo será utilizado  $ds = 0,01$ . A matriz referente à função de onda  $\Psi(\vec{r}_{i,j})$  é mantida fixa.

## 6.1 Dois quadrados acoplados por uma guia de onda

O primeiro caso estudado neste capítulo será o acoplamento de dois quadrados,  $Q_1$  e  $Q_2$ , através de uma guia de onda de comprimento  $w$  e largura  $h$  (ver figura 6.1). Esta é uma boa escolha como ponto de partida de um estudo pois a solução do bilhar quadrado é amplamente conhecida na literatura de mecânica quântica (ver, por exemplo, (COHEN-TANNOUDI et al., 1977)) e já foi explorada através do MCP (LUZ et al., 1997; ZANETTI et al., fevereiro/2007).

Em todas as simulações, a menos que mencionado o contrário, os lados dos quadrados e a largura da guia de onda são mantido fixos, sendo  $ld_1 = ld_2 = 1,0$  e  $w = 0,5$ .

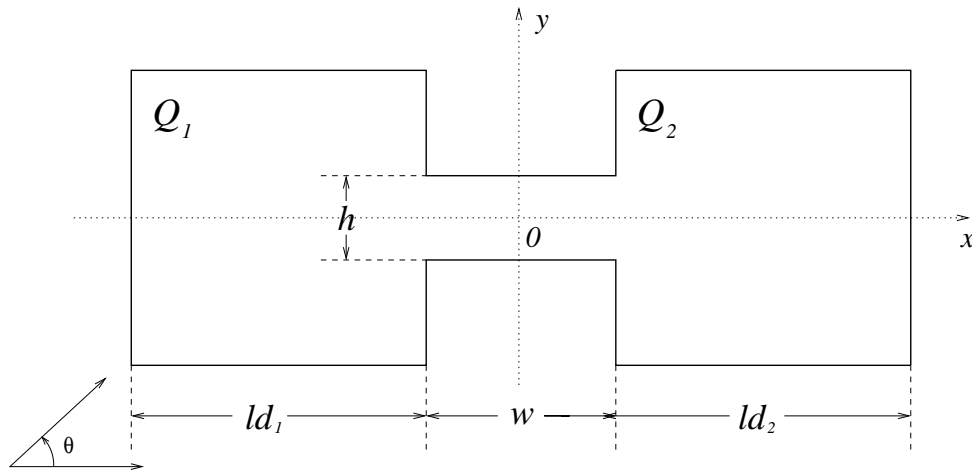


Figura 6.1: Dois quadrados  $Q_1$  e  $Q_2$ , com lados  $ld_1$  e  $ld_2$ , respectivamente, acoplados por uma guia de onda de largura  $h$  e comprimento  $w$ .  $\theta$  indica o ângulo da onda incidente.

### 6.1.1 Autoestado par do quadrado

O primeiro autoestado a ser analisado na seção corresponde à ressonância de simetria  $6 \times 6$  do quadrado, sua energia é caracterizada pelo número de onda  $k_{6,6} = 26,675$ , que pode ser obtido pela relação  $k_{m,n} = \pi \sqrt{m^2 + n^2}$  com  $m = n = 6$ . Como pode ser visto nos gráficos a)-c) da figura 6.2, o aumento de  $h$  ocasiona a diminuição da intensidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$ , mas sem deformação de sua aparência. Outra característica desta configuração é a relação do comprimento da guia de onda e do lado  $ld = ld_1 = ld_2$  dos quadrados.

Como este modo possui número de máximos verticais  $n$  par, nos referimos ao autoestado como sendo par; da mesma forma, o autoestado que será estudado na seção seguinte que possui  $n$  ímpar será chamado de autoestado ímpar. Utilizamos esta nomenclatura pelo fato de que nas análises da interação do modo do bilhar com a guia de onda é o número de modos verticais que nos causa mais interesse, uma vez que são estes os que estão em “contato direto” com a abertura da guia de onda de acoplamento.

Como  $w = \frac{ld}{2}$ , cabem na guia de onda metade dos modos do quadrado e quando  $h = \frac{ld}{3} = \frac{1}{3}$  cabem exatamente dois modos transversais na guia. Então, como pode ser visto em 6.2.d), além dos modos em  $Q_1$  e  $Q_2$  é excitado um modo na guia de onda, que acopla as soluções dos dois bilhares. Pelos gráficos subsequentes observamos o mesmo comportamento para as larguras  $h = \frac{2}{3}$  e  $h = \frac{3}{3} = 1$ .

A solução apresentada em 6.2.i) é a solução correta do retângulo de lados 1,0 e 2,5, com número de onda  $k_{15,6} = 22,223$ , o qual pode ser obtido pela relação  $k_{m,n} = \pi \sqrt{(\frac{m}{ld_g})^2 + (\frac{n}{ld_p})^2}$ , na qual  $ld_g$  e  $ld_p$  referem-se aos lados maior e menor, respectivamente. A condição para

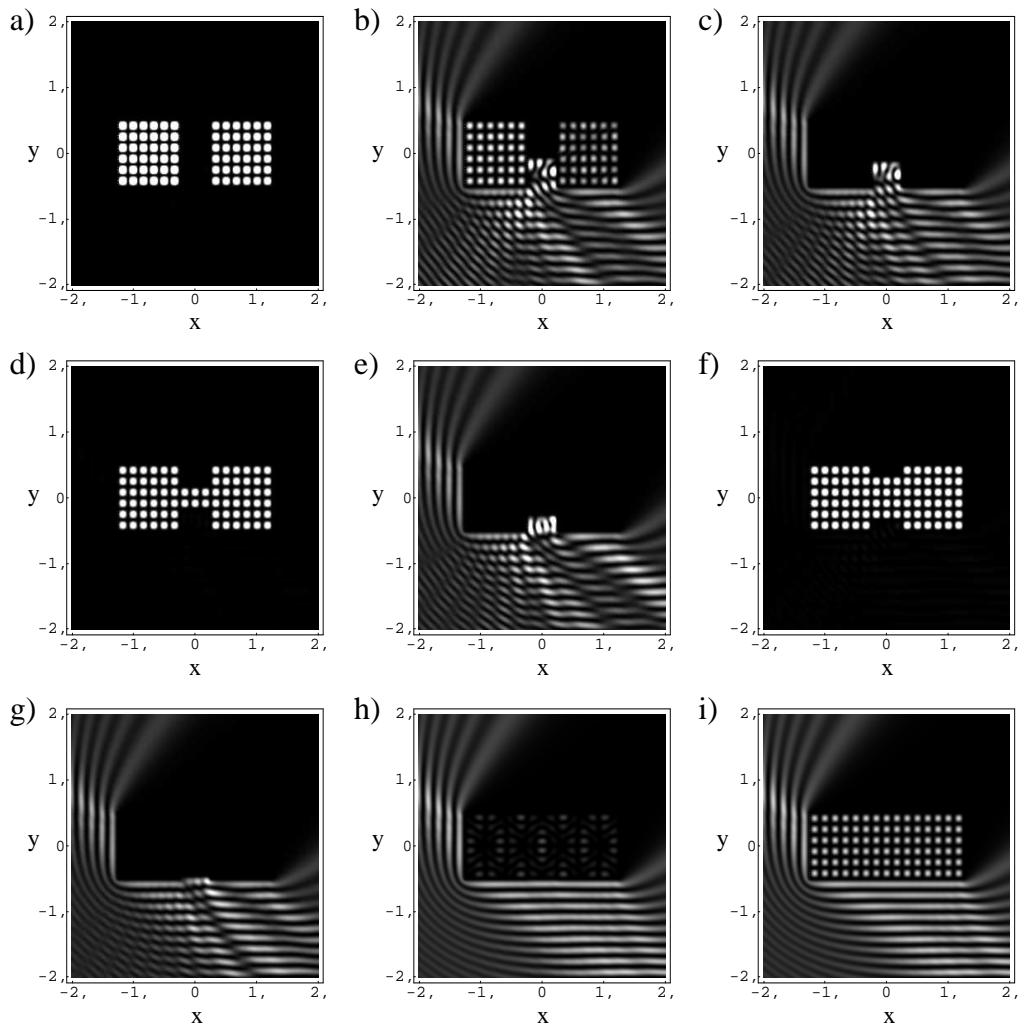


Figura 6.2: Gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para o espalhamento por dois quadrados. Para todos os casos  $k = 26,657$  e ângulo de incidência  $\theta = 45^\circ$  em relação ao eixo  $x$  positivo. A largura  $h$  da guia de onda vale 0,001 em a), 0,1 em b), 0,2 em c), 0,333 em d), 0,5 em e), 0,666 em f), 0,9 em g), 0,99 em h) e 1,0 em i). As diferenças de amplitude da onda espalhada de um gráfico para outro, devem-se a normalização, que teve por objetivo realçar a solução externa.

ocorrência de tal fenômeno é que a largura da guia de onda seja um múltiplo inteiro do lado  $ld$  dividido pela metade dos modos verticais, ou seja,  $h = \frac{2ld}{n}$ . O fator 2 deve-se ao fato de a guia estar colocada no centro dos quadrados. Assim, devemos acomodar dois modos transversais (imediatamente acima e abaixo de  $y = 0$ ). Esta mesma condição deve ser válida para autoestados nas guias para ressonâncias ímpares, com a diferença de que neste caso não é preciso o fator 2 multiplicando  $h$ , visto que haverá sempre um modo alinhado à guia de onda.

A dependência do autoestado na guia de onda com o comprimento  $w$  será analisada mais adiante.

### 6.1.2 Autoestado ímpar do quadrado

O segundo caso abordado é do autoestado degenerado  $k_{7,1} = k_{1,7} = k_{5,5} = 22,223$  ( $\lambda = 0,283$ ) do quadrado. A diferença básica deste caso para o anterior (autoestado par) é que, neste, o modo possui um máximo alinhado nas proximidades da abertura da guia de onda. Dependendo da direção de incidência da onda uma das três degenerescências é excitada. A seguir será mostrado como a variação da largura  $h$  afeta cada um dos autoestados.

Na figura 6.3.a) é mostrada solução para a largura da guia de onda  $h = 0,001$  e ângulo de incidência  $\theta = 45^\circ$ . Nesta situação praticamente não existe ligação entre os bilhares e a solução obtida é idêntica à solução exata  $5 \times 5$  ( $m = n = 5$ ) do quadrado. A função de onda  $|\psi(\vec{r})|^2$  é mais intensa em  $Q_1$  por este sofrer a incidência direta da onda, ao passo que em  $Q_2$  esta é bloqueada parcialmente por  $Q_1$ . Foi verificado que, invertendo o lado do bilhar pelo qual incide o vetor de onda  $\vec{k}$ , o resultado também inverte-se. Os gráficos seguintes mostram o comportamento do autoestado à medida que  $h$  aumenta. Para b) e c) ( $h = 0,1$  e  $h = 0,2$ , respectivamente), a função de onda mantém sua intensidade, porém, percebe-se uma mudança radical na sua forma.

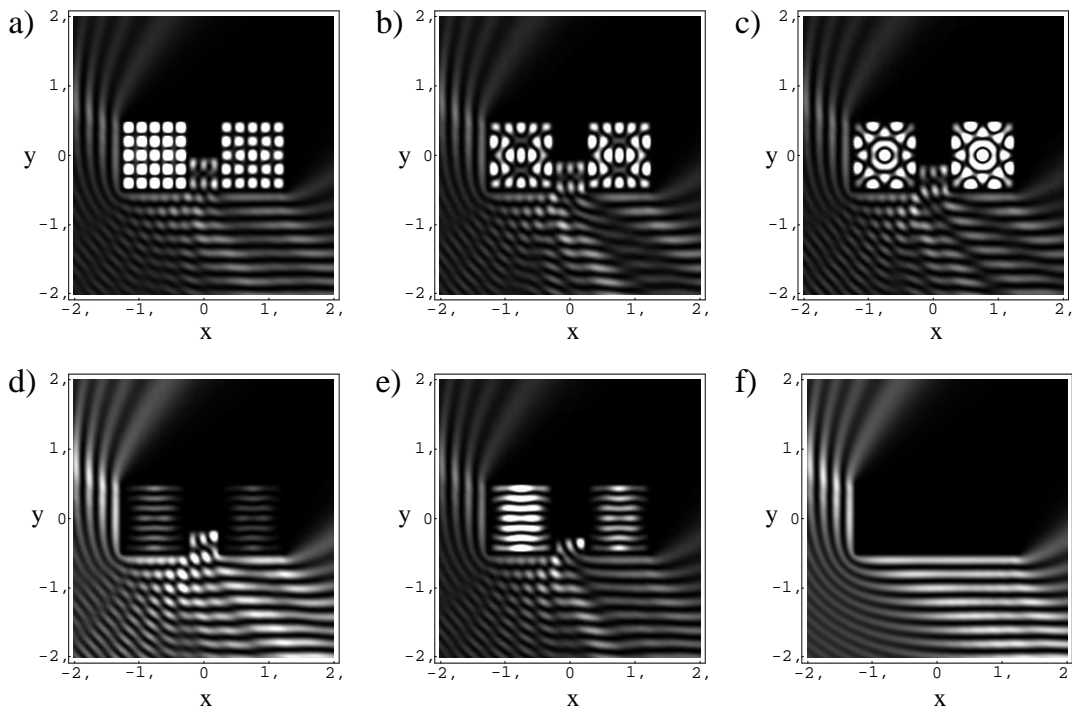


Figura 6.3: Gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para o espalhamento por dois quadrados. Para todos os casos  $k = 22,223$  e ângulo de incidência  $\theta = 45^\circ$ . A largura  $h$  da guia de onda vale 0,001 em a), 0,1 em b), 0,2 em c), 0,3 em d), 0,5 em e) e 1,0 em f).

Na figura 6.3.d) ( $h = 0,3$ ), a variação de  $h$  favorece a excitação da simetria  $1 \times 7$  da



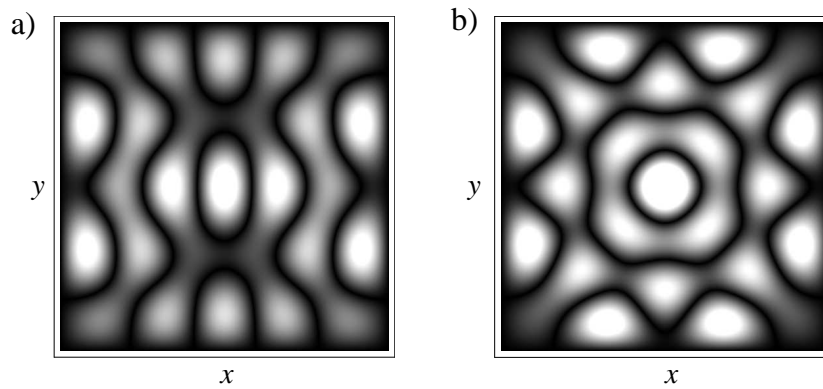


Figura 6.4: Gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  da solução de um quadrado de lado  $ld = 1,0$ , obtido através da superposição dos estados degenerados da energia  $k = 22,223$ . Em a)  $\psi = \psi_{7,1} - \psi_{5,5}$ ; e b)  $\psi = \psi_{7,1} - \psi_{5,5} + \psi_{1,7}$ .

energia degenerada. Este resultado indica que os dois casos anteriores, gráficos b) e c), estão associados com a transição entre a excitação de duas degenerescências, onde a forma diferenciada de  $\psi$  é devida à interferência de ambas as soluções, cujas ressonâncias são diferentes destas para o quadrado isolado. Isto é visto na figura 6.4, que representa diferentes combinações lineares dos estados  $\psi_{1,7}$ ,  $\psi_{7,1}$  e  $\psi_{5,5}$  e que resultam justamente nas figuras 6.3.b) e 6.3.c). À medida que  $h$  aumenta, a função de onda diminui até perder-se completamente, como é mostrado na figura f) para o limite extremo de  $h = 1,0$ , onde  $Q_1$  e  $Q_2$  ligam-se para formar o retângulo de lados  $1,0$  e  $2,5$ .

A figura 6.5 mostra as soluções para  $k = 22,223$  com ângulo de incidência  $\theta = 0^\circ$ . Neste caso, o autoestado excitado é o  $7 \times 1$ . Isto pode ser verificado no gráfico 6.5.a), onde  $h = 0,001$  e a solução é semelhante àquela do bilhar original. Como a direção de incidência coincide com o eixo  $x$  positivo, quase toda a onda é espalhada por  $Q_1$ , e assim, nenhuma solução é

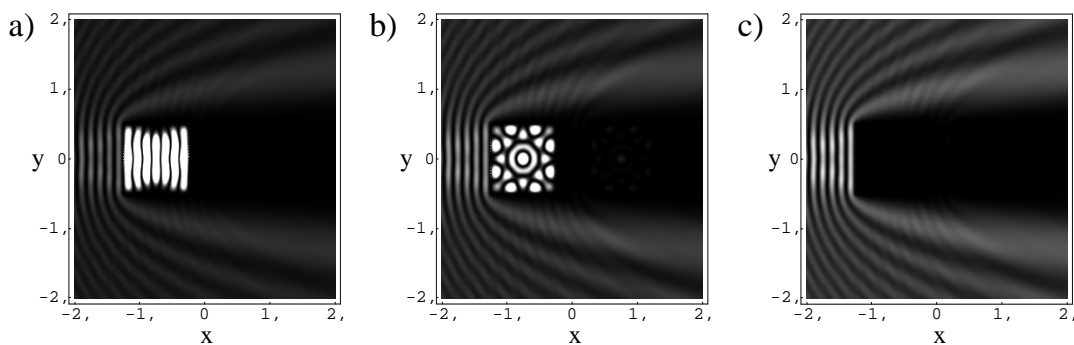


Figura 6.5: Gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para o espalhamento por dois quadrados. Para todos os casos  $k = 22,223$  e ângulo de incidência  $\theta = 0^\circ$ . A largura  $h$  da guia de onda vale  $0,001$  em a),  $0,2$  em b),  $0,3$  em c).

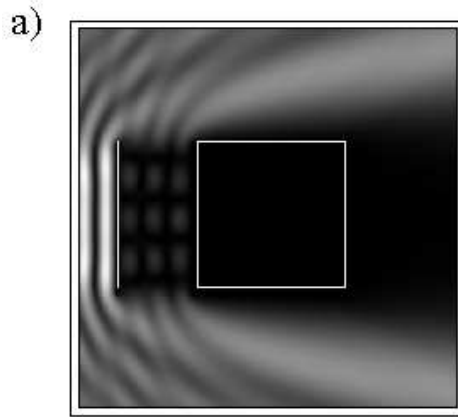


Figura 6.6: Gráfico de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para o espalhamento de um quadrado de lado  $ld = 1,0$  bloqueado por uma parede de comprimento  $1,0$  com a onda incidente de  $k = 22,223$ . Note-se que, apesar de  $k$  ser o valor correto da ressonância  $5 \times 5$  do quadrado o autoestado não pode ser excitado devido ao bloqueio.

observada em  $Q_2$ , como é exemplificado na figura 6.6 para um quadrado bloqueado por uma parede. No gráfico b), para a largura  $h = 0,2$ , nota-se a semelhança com o 6.3.c) (mesma largura mas ângulo de incidência diferente). Este resultado é mais um indício de que a variação de  $h$  ocasiona a seleção de diferentes combinações dos autoestados degenerados do bilhar, que no caso intermediário interferem, formando uma nova solução através de sua superposição. Este é um resultado conhecido da literatura no estudo de transmissão ressonante em bilhares abertos (AKIS et al., 2002; SADREEV, 2004; SADREEV et al., 2005).

A última degenerescência do autoestado  $k = 22,223$  a ser estudada é referente à simetria  $1 \times 7$ , que é excitada com a onda plana incidindo por um ângulo de  $\theta = 90^\circ$ , figura 6.7. Como nos dois casos anteriores, a) mostra o espalhamento para a estrutura com guia de onda de largura  $h = 0,001$ , resultando no estado não-perturbado  $1 \times 7$ . Nos gráficos seguintes, de b) a f), não percebe-se variação significativa na forma da função de onda, com exceção de c), porém mesmo este mantém a característica geral de um padrão horizontal. Esta “rigidez” na distribuição dos modos indica uma menor susceptibilidade da função de onda à variação de  $h$ . Este fato é corroborado pela observação de que apenas para larguras acima de  $0,6$  (figura 6.7.e))  $|\psi(\vec{r})|^2$  apresenta um decaimento significativo.

É interessante notar que, para esta determinada geometria da guia de onda ( $w = 0,5$  e  $0,0 < h < 1,0$ ), e energia da onda incidente, não são excitados modos na região da guia. Isto deve-se ao fato de o comprimento fracionário da guia ( $w = 1,77\lambda$ ) não permitir a acomodação de modos em seu interior. Mais adiante será analisada a dependência das autoenergias excitadas com o comprimento da guia.

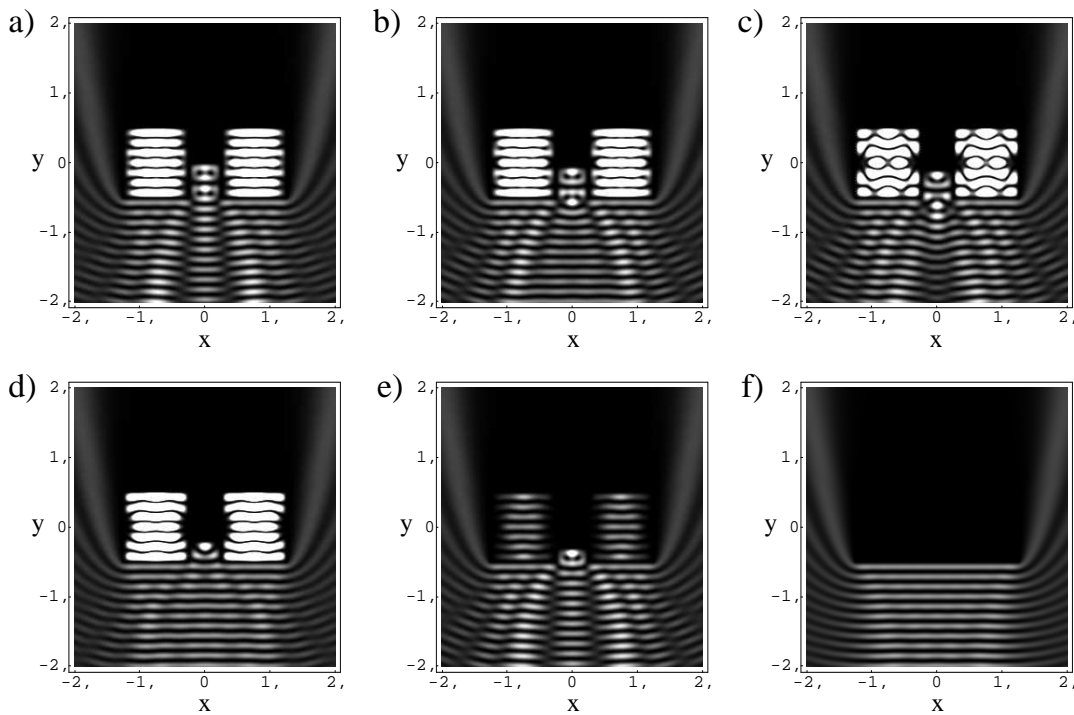


Figura 6.7: Gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para o espalhamento por dois quadrados. Para todos os casos  $k = 22,223$  e ângulo de incidência  $\theta = 90^\circ$ . A largura  $h$  da guia de onda vale 0,001 em a), 0,1 em b), 0,2 em c), 0,4 em d), 0,6 em e) e 1,0 em f).

### Quadrados $Q_1$ e $Q_2$ com medidas diferentes

Até agora, as simulações focaram o caso em que  $Q_1$  e  $Q_2$  possuem as mesmas dimensões, logo, os mesmos autoestados individuais são excitados. É interessante então modificar o comprimento  $ld$  de um deles e verificar o comportamento da solução.

Fazemos assim simulações para dois quadrados acoplados, onde  $Q_2$  tem o comprimento  $ld_2 = \sqrt{\pi}/2$  com o comprimento da guia de onda sendo  $w = ld_1 - ld_2$ . Estas novas medidas do quadrado  $Q_2$  e da guia garantem que não exista nenhum autoestado comum entre os dois quadrados, a não ser no caso extremo em que  $h \rightarrow 1,0$ . Nesta situação a solução  $k_{2m,n}$  é a de um retângulo de lado maior 2,0 e menor 1,0, que é coincidente com as autoenergias de  $Q_1$ .

A figura 6.8 mostra as simulações para a geometria descrita acima. A onda incidente tem o mesmo valor  $k$  que nos casos anteriores, e ângulo de incidência  $\theta = 45^\circ$ . Como esperado, apenas em  $Q_1$  é excitado o autoestado, que decai e anula-se a medida que  $h$  aumenta. Isto pode ser visto em a) e b). O gráfico c), para  $h = 0,299$ , mostra o resultado interessante, no qual a solução da simetria  $6 \times 6$  em  $Q_1$  acopla-se a uma solução de  $Q_2$ , criando um estado estendido de toda a estrutura. Nos gráficos seguintes, a medida que  $h \rightarrow 1,0$ , temos o resultado esperado do autoestado  $k_{12,6}$  do retângulo sendo excitado.

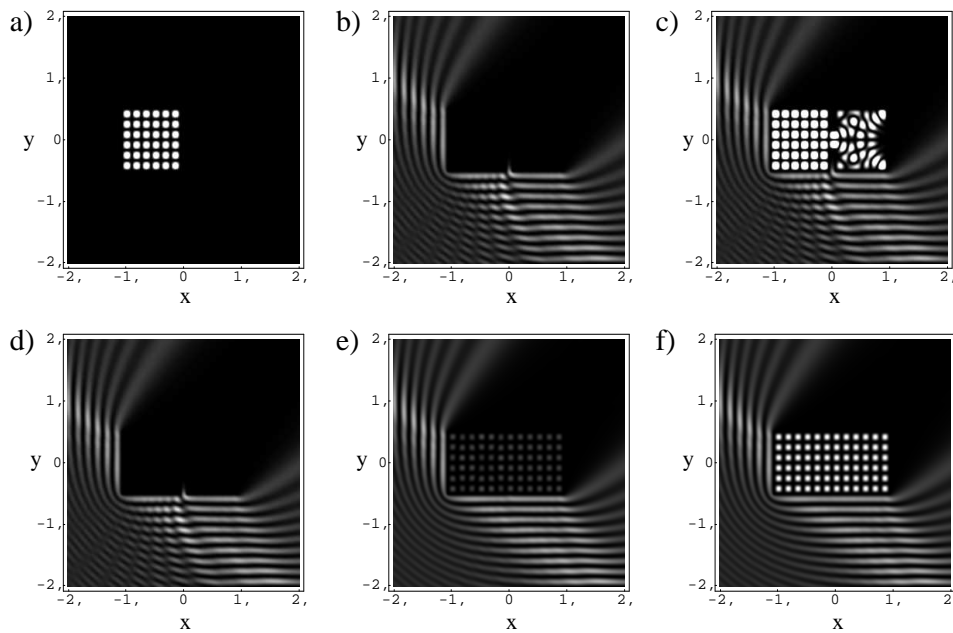


Figura 6.8: Gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para o espalhamento por dois quadrados. Para todos os casos  $k = 26,657$  e ângulo de incidência  $\theta = 45^\circ$ . Nesta estrutura  $ld_2 = \sqrt{\pi}/2$  e  $w = ld_1 - ld_2$ . A largura  $h$  da guia de onda vale 0,001 em a), 0,2 em b), 0,299 em c), 0,4 em d), 0,99 em e) e 1,0 em f). As diferenças de amplitude da onda espalhada devem-se à normalização, que teve por objetivo realçar a solução externa.

### 6.1.3 Autoestados da estrutura acoplada

Nas duas seções anteriores, foram estudados os efeitos da variação da geometria da guia de onda sobre os autoestados individuais dos quadrados  $Q_1$  e  $Q_2$ . Porém, é de se esperar que a junção dos dois bilhares gere autoestados ressonantes próprios da estrutura acoplada, dependentes da forma da guia de onda. Isto pode ser visto na figura 6.8.c), onde um autoestado não-pertencente ao quadrado é excitado em  $Q_2$  e acopla-se à solução do quadrado não-perturbado de  $Q_1$ .

Como mostrado no capítulo 2, nas proximidades das energias ressonantes de um bilhar, os elementos da matriz  $T$  possuem comportamento muito diferenciado daquele apresentado em energias longe de qualquer autovalor do sistema. Tal característica de  $T$  pode ser utilizada na determinação do espectro dos bilhares. Devemos então ser capazes de determinar as ressonâncias pela análise da modificação de um dos elementos de  $T$ , quando é variado algum dos parâmetros do sistema, por exemplo, energia da onda incidente ou geometria do bilhar (ZANETTI, 2004; ZANETTI et al., fevereiro/2007).

### Varição da largura $h$ para energia fixa

Primeiramente, faremos a análise da variação de um elemento de  $T$  quando é fixada a energia e variada a largura  $h$  da guia de onda. Este procedimento nos fornece os autoestados da estrutura associados a uma determinada energia e diferentes configurações geométricas do sistema.

O gráfico 6.9 mostra  $h \times |T(i, j)|^2$  para o número de onda fixo  $k = 11,1437$  quando a largura  $h$  varia de 0,0 (bilhares desacoplados) a 1,0 (retângulo) com  $w = 0,5$ . O elemento de matriz escolhido possui  $i = j = 150$ , o que o localiza no lado vertical esquerdo de  $Q_1$ . Como a matriz não depende da direção de incidência da onda, não importa se o elemento é escolhido no quadrado  $Q_1$  ou no quadrado  $Q_2$ , pois, seus valores são iguais. O motivo de escolhermos um valor pequeno de  $k$  ( $\lambda$  grande) é termos um espectro menos “povoado”, e assim facilitar a observação dos resultados. Quanto maior a energia da onda incidente ( $\lambda$  pequeno), maior o

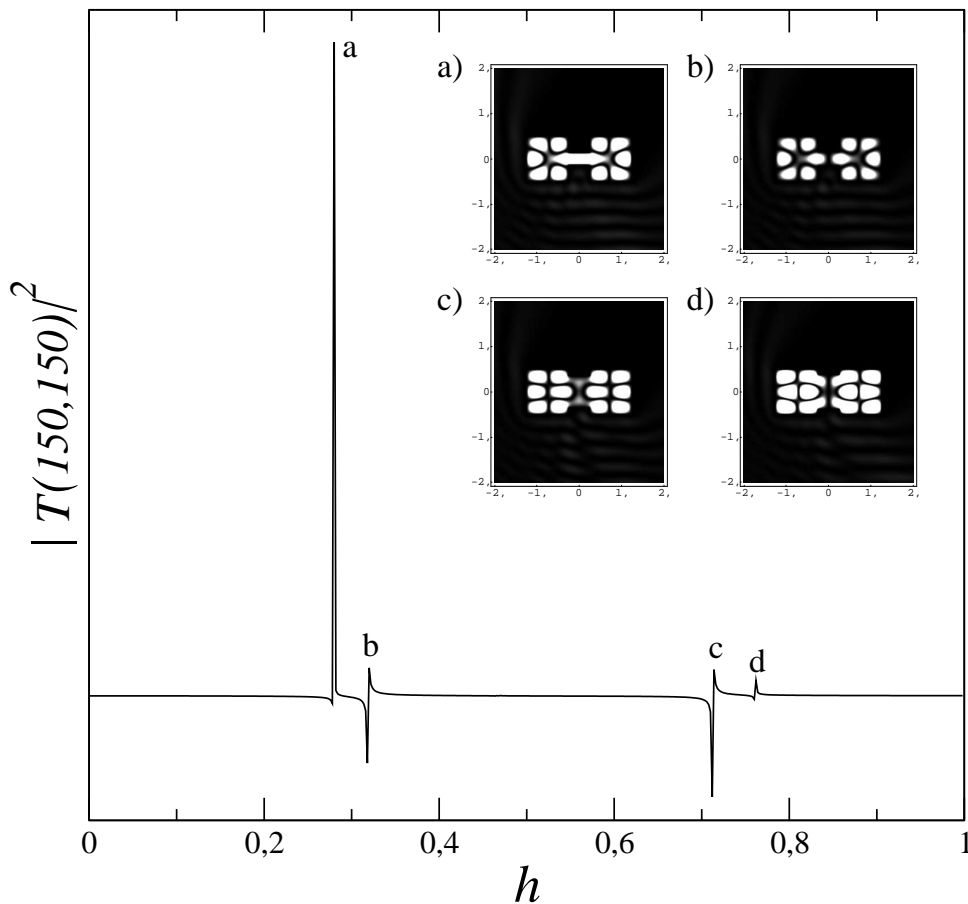


Figura 6.9: Gráfico de  $h \times |T|^2$ , onde  $k = 11,1437$ ,  $w = 0,5$  e o elemento é da matriz  $i = j = 150$ , localizado no primeiro bilhar. Os gráficos inseridos são as funções de onda para as estruturas com as guias de onda de largura  $h$  indicada pelas letras.

número de diferentes possibilidades de rearranjos dos modos dentro da estrutura e, conseqüentemente, mais denso seu espectro de autovalores.  $k = 11,1437$  não corresponde a nenhuma solução do bilhar quadrado, porém está próximo da ressonância  $k_{2,3} = 11,327$ , logo, os novos autoestados do bilhar acoplado devem ser formados por perturbações deste caso.

A figura 6.9 mostra que, para a energia escolhida, a variação da largura  $h$  da guia fornece quatro autoestados diferentes para o problema, todos relacionados à simetria  $2 \times 3$ , como comentado acima. O primeiro autoestado (primeiro pico, indicado pela letra  $a$ ) recai sobre o valor  $h = 0,282 \approx \frac{\lambda}{2}$ . Sua forma mostra que os picos dos modos não perturbados  $2 \times 3$  do quadrado próximos das aberturas da guia se “unem”, formando um único modo que atravessa a guia. O segundo autoestado (pico  $b$  com  $h = 0,317 \approx \frac{3\lambda}{5}$ ) tem valor de  $h$  próximo ao caso ressonante  $a$ , tendo portanto, uma função de onda similar. Porém,  $b$  apresenta um mínimo no centro da guia de onda dividindo o modo comum. O terceiro (pico  $c$  com  $h = 0,712 \approx \frac{5\lambda}{4}$ ) e quarto (pico  $d$  com  $h = 0,761 \approx \frac{27\lambda}{20}$ ) autoestados possuem comportamento parecido com o primeiro par, mas nestes casos, há uma menor distorção dos estados  $2 \times 3$  não perturbados de cada quadrado.

### Variação da largura $h$ e da energia

O próximo passo nas simulações é variar o número de onda  $k$  da onda incidente, além da largura  $h$ . Isto é mostrado nos gráficos da figura 6.10 para dois elementos diferentes da matriz  $T(i, j)$ . Considerar elementos diferentes significa estarmos observando posições diferentes na matriz e, conseqüentemente, posições diferentes no bilhar. No primeiro gráfico  $i = j = 150$  é localizado no meio de um dos lados de  $Q_1$ , ou seja, estamos observando a probabilidade de, com a variação de  $h$  e  $k$ , criarmos um autoestado no primeiro quadrado. Pela simetria de  $T(i, j)$  a análise para outro elemento em  $Q_2$  é idêntica. No caso b) temos  $i = 150$  (pertencente a  $Q_1$ ) e  $j = 450$  (pertencente a  $Q_2$ ), o que significa que estamos observado a probabilidade de ser criado um autoestado acoplado entre  $Q_1$  e  $Q_2$ . Os pontos mais claros representam a região onde existe um autoestado do bilhar, enquanto que nas áreas mais escuras não existem autoestados. Então, seguindo algum dos “caminhos” apresentados nos gráficos, estamos acompanhando a variação de um autoestado à medida que a forma do bilhar muda.

Analisemos separadamente as duas situações apresentadas em 6.10. Nos casos extremos de a) obtemos os espectros corretos de autoenergias para: o quadrado de lados  $ld = 1,0$  quando  $h \rightarrow 0,0$ ; e para o retângulo de lados  $ld_g = 2,5$  e  $ld_p = 1,0$  quando  $h \rightarrow 1,0$ . A medida que  $h$  aumenta (partindo de  $0,0$ ) os autoestados se mantêm praticamente constantes em sua autoenergia até  $h$  valer aproximadamente  $\frac{\lambda}{4}$ , a partir deste valor elas começam a “migrar”

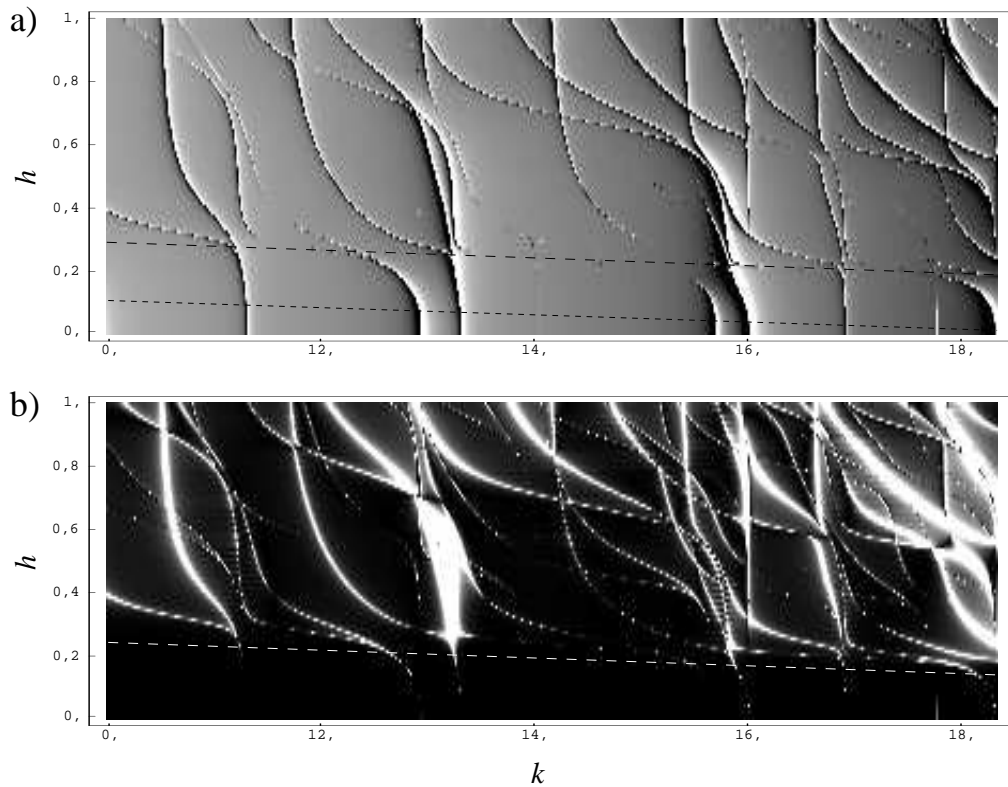


Figura 6.10:  $k \times h \times |T(i, j)|^2$  para  $w = 0,5$ . a) elemento de  $T(i, j)$  com  $i = j = 150$  (localizado em  $Q_1$ ). b) elemento de  $T(i, j)$  com  $i = 150$  (localizado em  $Q_1$ ) e  $j = 450$  (localizado em  $Q_2$ ).

para valores menores de  $k$ . Assim,  $\frac{\lambda}{4}$  é o limite para a manutenção das ressonâncias originais do quadrado, como vimos anteriormente nas subseções 6.1.2 e 6.1.1 através do comportamento das funções de onda  $|\psi(\vec{r})|^2$ . O deslocamento dos autoestados para valores menores de  $k$  ( $\lambda$  maior) é devido ao aumento da área do bilhar, acarretado pelo crescimento da largura da guia de onda (AKIS et al., 2002). A criação de mais espaço ocasiona uma “relaxação” dos modos na estrutura, fazendo com que o comprimento de onda sofra também um acréscimo.

Quando caminhamos no sentido positivo do eixo  $k$ ,  $\lambda$  decresce e o limite para o qual a solução do bilhar isolado se mantém também diminui de forma linear. Tal região é representada pela linha com o tracejado menor. Subindo no eixo de  $h$  (vertical), quando a largura se aproxima do valor  $\frac{\lambda}{2}$  (linha com tracejado mais largo) os autoestados apresentam dois comportamentos distintos: alguns bifurcam-se, como o primeiro autoestado; e outros diminuem até sumirem, como o que inicia-se próximo a  $k = 16,0$ . Além dessa bifurcação e extinção progressiva dos autoestados, ainda existem autoestados que são criados nesta região, como é o caso do que inicia-se nas proximidades da bifurcação do primeiro autoestado.

A análise de 6.10.a) nos fornece informações gerais sobre os autoestados, porém, não nos permite afirmar com exatidão se os modos criados são estados acoplados, ou seja, esta-

dos da estrutura como um todo. Neste sentido, a investigação de b) é complementar à de a). Do segundo gráfico, deduz-se que todos os estados que sobrevivem, ou que são criados, nas proximidades da região de  $\frac{\lambda}{2}$  são autoestados acoplados da estrutura composta. Esta afirmação decorre do fato de que, acima deste limite todo autoestado de a) encontra um correspondente em b). Abaixo de  $\frac{\lambda}{2}$  não existem autoestados visíveis em b), logo, este deve ser o limite para o qual as soluções desacopladas de cada um sejam mantidas. Além disso, lembramos que em 6.10.b) olhamos um elemento da matriz  $T$  que liga  $Q_1$  e  $Q_2$ , logo, tais autoestados devem corresponder a soluções estendidas.

À medida que a energia (número de onda  $k$ ) cresce em 6.10, a estrutura vai ficando cada vez mais complicada, com a densidade de caminhos aumentando e emaranhando-se. Isto deve-se justamente ao aumento da energia ( $\lambda$  diminui), levando a rearranjos dos autoestados no bilhar, ou seja, para pequenas variações de energia e largura, a forma do autoestado pode ter grande variação.

### Mudança da forma do autoestado com a variação da estrutura

A análise anterior teve como objetivo a observação do comportamento geral dos autoestados perante mudanças na geometria da estrutura acoplada, sem ater-se à sua forma. É interessante então, acompanhar um dos “caminhos” e observar como a função de onda  $|\psi(\vec{r})|^2$  é alterada sobre ele. Para tanto, escolhemos o primeiro autoestado da figura 6.10, que inicia-se em  $k = 11,332$  e é mostrado em detalhe na figura 6.11.

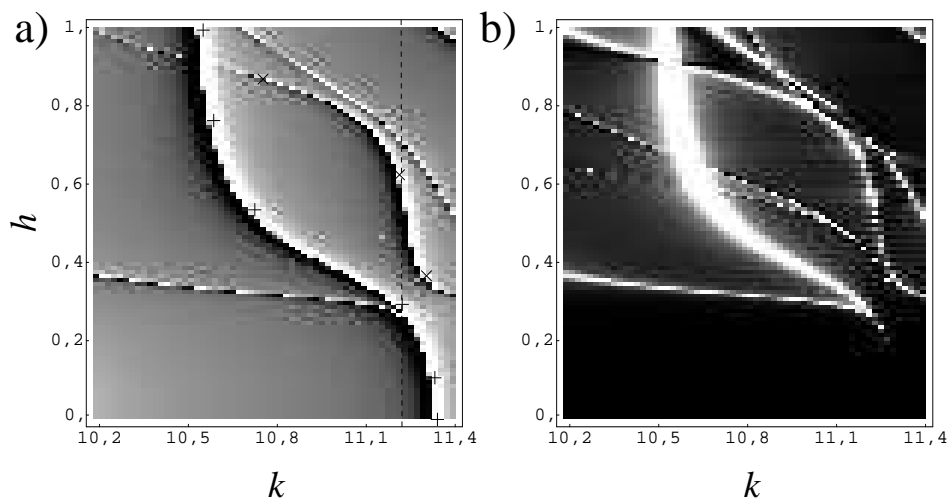


Figura 6.11: Detalhe da região inicial do gráfico 6.10. A linha tracejada em a) corresponde à variação de  $h$  para energia fixa 11,1437 mostrada figura 6.9.



Inicialmente, observaremos o caminho central (mais intenso) da figura 6.11, que começa em  $k = 11,332$  e termina em  $k = 10,535$ , sobrevivendo à variação de  $h$  desde 0,0 até 1,0. Na figura 6.12 são mostrados os gráficos de densidade da função de onda  $\psi(\vec{r})$  para as posições marcadas por cruzes + no gráfico 6.11. Pode-se observar nos gráficos de a) a f) como o autoestado inicial de  $2 \times 3$  evolui se redistribuindo espacialmente e tendo sua energia modificada à medida que  $h$  varia. Nas proximidades da região de bifurcação, os modos de  $Q_1$  e  $Q_2$  acoplam-se e evoluem conjuntamente até chegar no autoestado  $k_{8,1}$  do retângulo.

O caminho inferior, formado pela bifurcação do autoestado inicial, é o correspondente ao gráfico de densidade mostrado na figura 6.9.a). Em comparação com os outros caminhos evidentes na figura 6.11, a sensibilidade da sua autoenergia a variações de  $h$  é muito maior, ou seja, variações grandes de  $h$  destroem facilmente esta família de autoestados. O porquê deste comportamento fica evidente quando observamos que o autoestado tem um modo que atravessa toda a guia de onda. Note que não existe um mínimo no centro da guia, o que é o caso do braço principal, como visto na figura 6.12. Como este autoestado não suporta grandes variações da estrutura do bilhar, devido a esta particularidade seu formato sobre o caminho não irá diferir substancialmente daquele mostrado em 6.9.a).

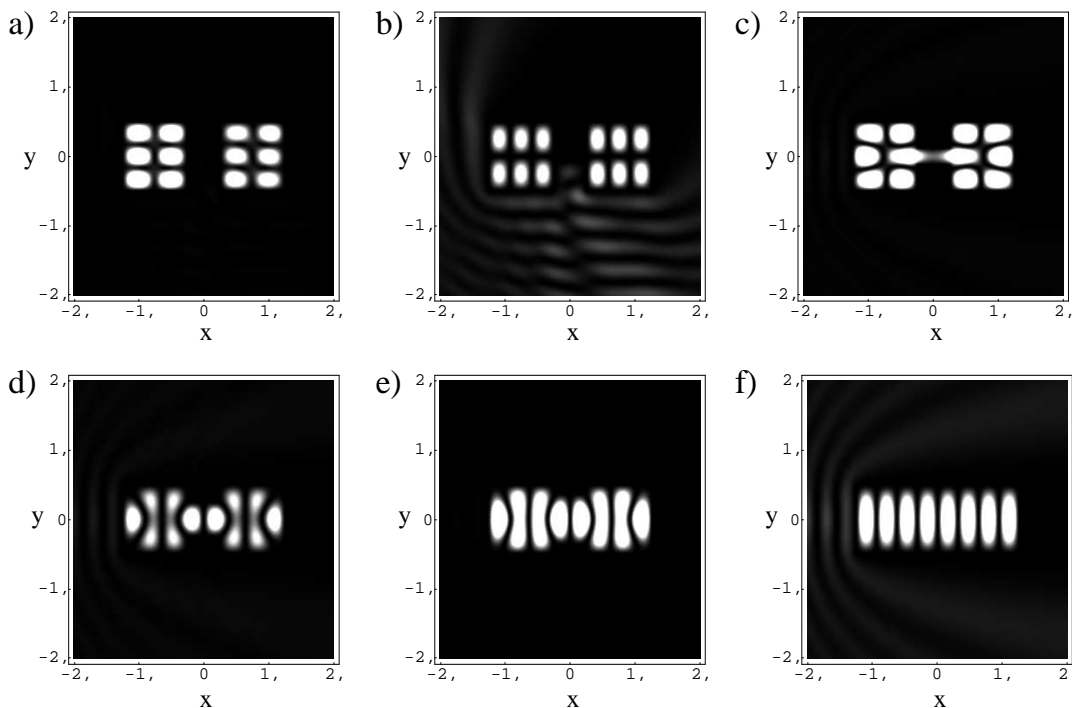


Figura 6.12: Gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para os valores de energia e largura da guia de onda marcados por + no gráfico 6.11.a) que são: a)  $k = 11,332$  e  $h = 0,0$ ; b)  $k = 11,332$  e  $h = 0,12$ ; c)  $k = 11,232$  e  $h = 0,25$ ; d)  $k = 10,745$  e  $h = 0,5$ ; e)  $k = 10,578$  e  $h = 0,75$ ; f)  $k = 10,535$  e  $h = 1,0$ .

O caminho superior, nascido perto das bifurcações mas não ligado a esta, é um caso diferente dos anteriores. Ao invés de evoluir de um estado do quadrado, ele forma-se nas proximidades da região de  $\frac{\lambda}{2}$  (região de limite entre os autoestados acoplados/desacoplados). Neste caso, ao invés de os autoestados de  $Q_1$  e  $Q_2$  serem acoplados pela interação de suas próprias funções de onda, é criado um novo modo na guia de onda, como mostrado na figura 6.13.a). Por este motivo tal autoestado é criado na região de  $h > \frac{\lambda}{2}$ , que é a largura necessária para que um modo seja criado na guia. Os gráficos seguintes mostram como os modos vão unindo-se até que, no limite de  $h \rightarrow 1,0$ , cheguem à solução do retângulo de simetria  $1 \times 3$ .

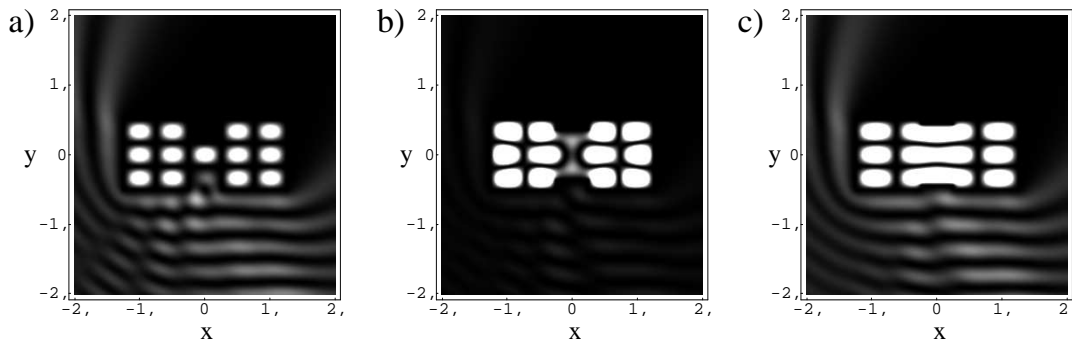


Figura 6.13: Gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para os valores de energia e largura da guia de onda marcados por  $\times$  no gráfico 6.11.a) que são: a)  $k = 11,332$  e  $h = 0,333$ ; b)  $k = 11,144$  e  $h = 0,713$ ; c)  $k = 10,679$  e  $h = 0,880$ .

### Variação do comprimento $w$ para energia fixa

Nas análises efetuadas anteriormente, mais notadamente nas seções 6.1.1 e 6.1.2, foi visto que a criação/penetração de modos no interior da guia de onda é também extremamente dependente do seu comprimento  $w$ .

Na figura 6.14 são mostradas as curvas de  $|T(150,450)|^2 \times w$ . As energias escolhidas foram as já utilizadas na apresentação dos autoestados pares ( $k_{6,6} = 26,657$ ) e ímpares ( $k_{5,5} = 22,223$ ) do quadrado. As larguras  $h$  foram escolhidas para a primeira configuração de modos transversais que, como visto, podem ser obtidas através da relação  $h = \frac{2ld}{n} = 0,333$  para o caso par e  $h = \frac{ld}{n} = 0,2$  para o caso ímpar, onde em ambos os casos  $n$  é número de modos verticais.

Analisando-se primeiramente a curva contínua, do autoestado ímpar, fica evidente que os picos possuem espaçamento constante, medindo  $\Delta w \cong \frac{3\lambda}{4}$ . Observamos na figura 6.15 a forma da função de onda correspondente a cada pico (gráficos a), b) e c)). O primeiro *a* está associado a um autoestado praticamente nulo na guia de onda. O segundo *b* possui um pico, e o terceiro 2 picos na região da guia. Destes resultados pode-se deduzir que, para o modo ímpar,

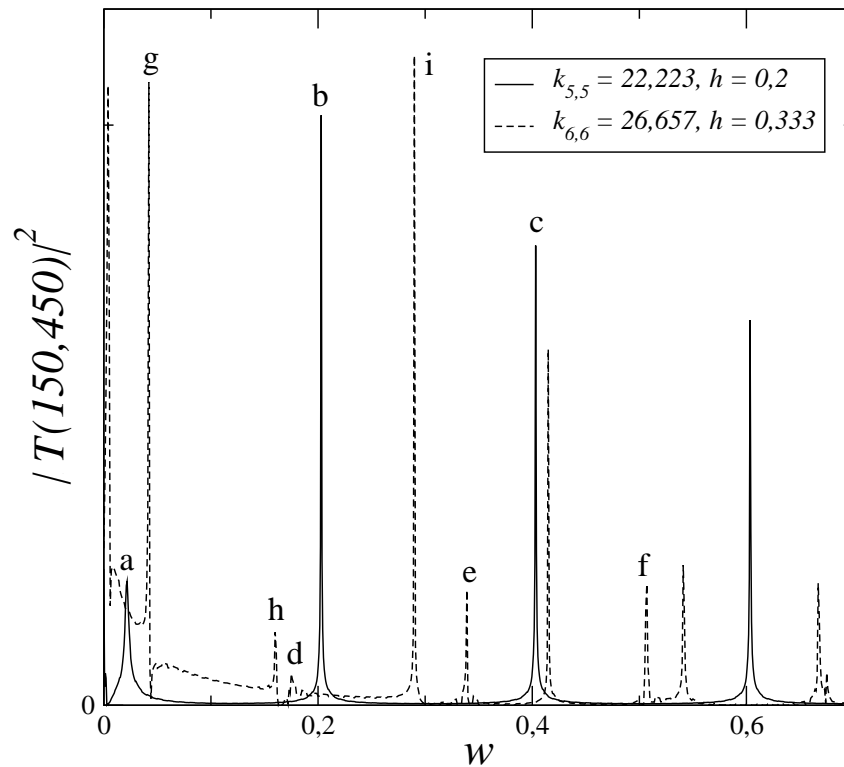


Figura 6.14: Gráfico de  $|T(150,450)|^2 \times w$ . os parâmetros utilizados são fornecidos na legenda. As indicações sobre os picos referem-se aos gráficos da figura 6.15.

a condição para serem criados os modos na guia de onda é que  $w - \delta$  seja um múltiplo inteiro de  $\frac{3\lambda}{4}$ , isto é,  $w = \delta + l\frac{3\lambda}{4}$ , com  $l = 0, 1, 2, \dots$  sendo  $l$  o número de modos pertencentes à guia de onda e  $\delta$  é primeiro valor de  $w$  para o qual aparece este tipo de modo.

A curva tracejada (para o autoestado par) revela duas seqüências de picos, que levam a comportamentos distintos dos autoestados correspondentes. A primeira seqüência é formada pelos picos  $d$ ,  $e$  e  $f$ , que apresentam  $\Delta w = \frac{3\lambda}{4}$  de distanciamento entre si (na verdade a seqüência inicia-se no pico localizado em  $w = 0,004$ , quando o autoestado é praticamente nulo na guia). Os autoestados correspondentes a cada pico mostrados em  $d$ ,  $e$  e  $f$  da figura 6.15 são a soma das soluções corretas de  $Q_1$  e  $Q_2$  sem perturbação, mais a solução correta para a guia de onda retangular, resultado semelhante ao visto na subseção 6.1.1. Este caso é similar ao discutido no parágrafo anterior, com a condição idêntica de criação dos modos na guia.

A segunda seqüência de picos da curva tracejada é formada por  $g$ ,  $h$  e  $i$ ), que possuem espaçamento  $\Delta w = \frac{\lambda}{2}$  entre si. Observando na figura 6.15 a forma da função de onda correspondente a cada pico, vemos que este caso difere drasticamente do anterior. Nesta situação, o autoestado perde o caráter “separável” que apresentava, para adquirir uma forma mais complexa com os modos da guia de onda e dos quadrados misturando-se e interagindo. A condição

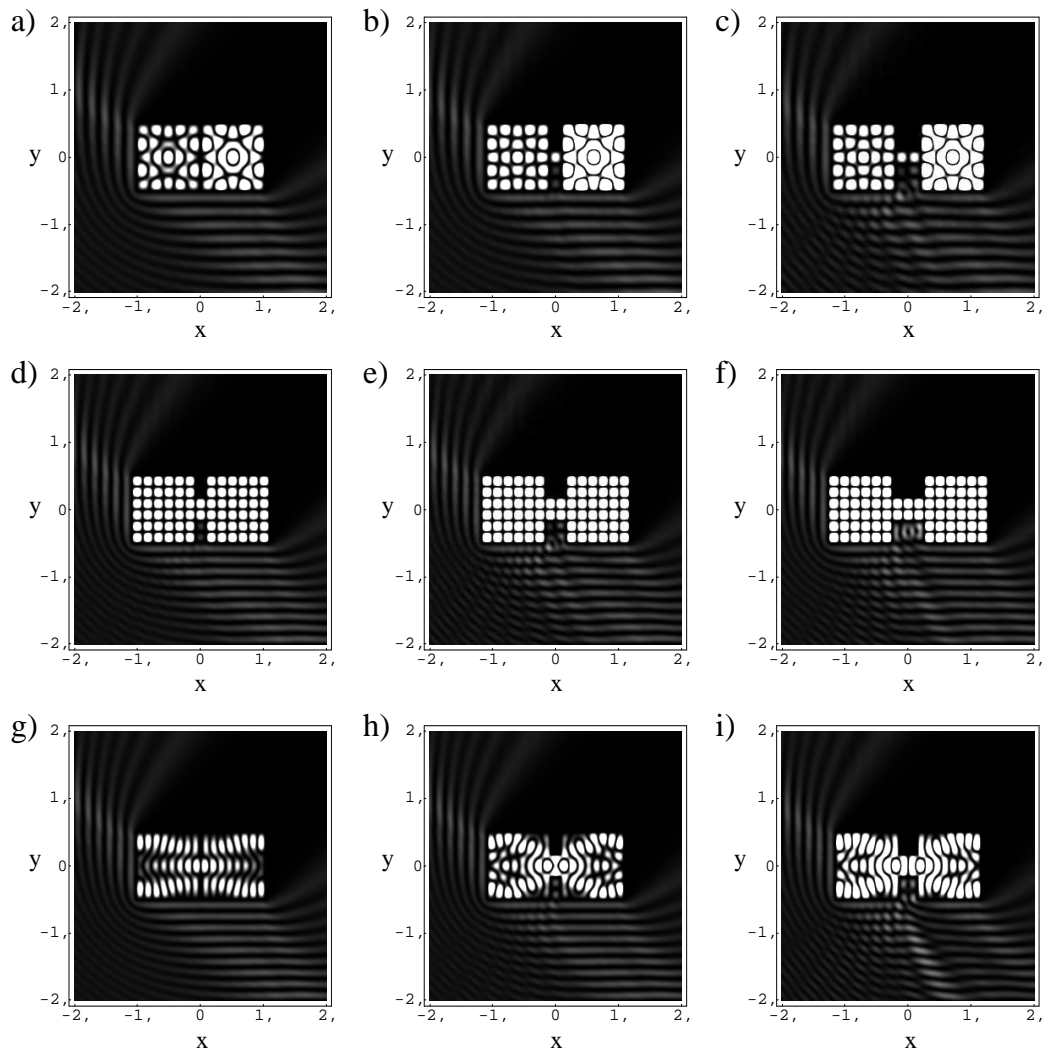


Figura 6.15: Gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  referentes às posições indicadas na figura anterior 6.14. Os comprimentos da guia de onda  $w$  para cada caso são:  $w = 0,0215$  em a),  $0,203$  em b) e  $0,4032$  em c);  $w = 0,173$  em d),  $0,339$  em e) e  $0,507$  em f);  $w = 0,042$  em g),  $0,161$  em h) e  $0,290$  em i).

de manutenção dos modos na guia de onda para este caso é dada por  $w = \delta + l\frac{\lambda}{2}$ , com  $\delta$  sendo o valor do comprimento da guia de onda que permite a excitação de autoestado em  $Q_1$  e  $Q_2$ , sem criar nenhum modo na guia, e  $l = 0, 1, 2, 3, \dots$

## 6.2 Quadrado acoplado a um quarto de círculo por uma guia de onda

A segunda geometria a ser tratada neste capítulo é formada por um quadrado  $Q$  de lado  $ld$  acoplado a um quarto de círculo  $QC$  de raio  $r$ , isto é feito por uma guia de onda de largura  $h$  e comprimento  $w$ , ver figura 6.16. Em todas as simulações  $ld = r = 1,0$ .

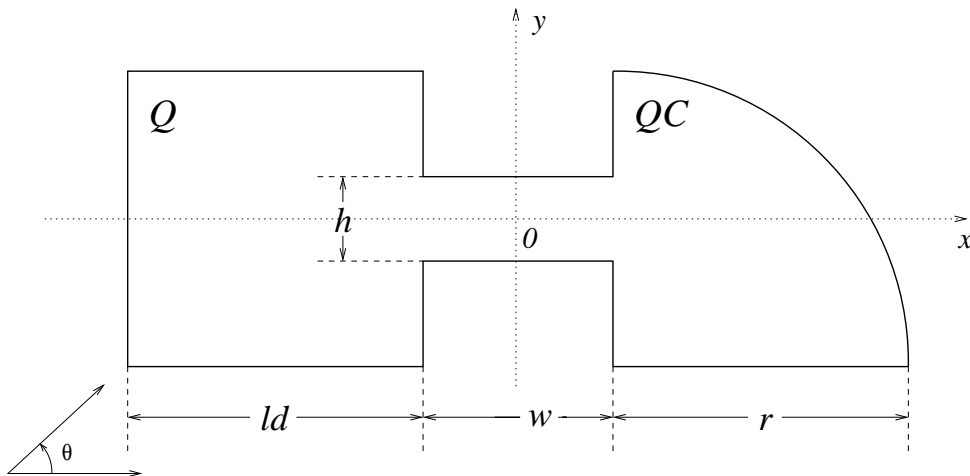


Figura 6.16: Quadrado  $Q$  de lado  $ld$  acoplado a um quarto de círculo  $QC$  de raio  $r$ , por uma guia de onda de largura  $h$  e comprimento  $w$ .  $\theta$  indica o ângulo da onda incidente.

Assim como na seção anterior, quando a largura da guia de onda entre os bilhares é muito pequena,  $h \rightarrow 0,0$ , os dois bilhares são desacoplados e possuem dinâmica individual e regular. Quando  $h$  começa a aumentar os comportamentos são também similares, ou seja, podem persistir as dinâmicas individuais ( $h < \frac{1}{2}$ ) ou podem ser criados autoestados acoplados, próprios da estrutura como um todo ( $h > \frac{1}{2}$ ). Porém, para o caso extremo  $h \rightarrow ld$ , o acoplamento tende a soluções diferentes: para dois quadrados, a solução tende a dinâmica regular de um retângulo, como já visto. Para um quadrado acoplado a um quarto de círculo, a solução tende à dinâmica irregular de um quarto de estádio, sistema de grande importância em caos quântico (HELLER, 1984).

### 6.2.1 Autoestados do quadrado $Q$

Iniciaremos a análise do quarto de círculo acoplado ao quadrado observando o comportamento de autoestados do quadrado  $Q$  quando a largura  $h$  da guia de onda de acoplamento varia.

Na figura 6.17 são mostrados os autoestados correspondentes às duas degenerescências de  $k_{3,6} = k_{6,3} = 21,085$  para  $w = 0,25$  fixo. Em a), b) e c) são mostrados os gráficos de densidade dos autoestados de simetria  $6 \times 3$ , excitados com o ângulo de incidência  $\theta = 18,4^\circ$  (em relação ao eixo  $x$  positivo). Percebe-se que estes são muito sensíveis à variação de  $h$ , visto que para  $h = 0,05$  ( $\approx \frac{1}{6}$ ), gráfico 6.17.c),  $|\psi(\vec{r})|^2$  já é praticamente nulo no interior de todo o bilhar. Os três gráficos seguintes mostram que o autoestado de simetria  $3 \times 6$  possui menor sensibilidade à variação da largura da guia de onda, com  $|\psi(\vec{r})|^2$  anulando-se para  $h \approx 0,2$  ( $\approx \frac{1}{2}$ ). Esta diferença de comportamento para as duas degenerescências deve-se ao fato de que a primeira possui número de modos verticais  $n$  ímpar, enquanto que na segunda  $n$  é par. Como visto na seção anterior, os casos em que existe um máximo alinhado com a abertura da guia de onda ( $n$  ímpar) são mais suscetíveis às variações em  $h$ .

Apesar da existência de autoestados do quarto de círculo nas vizinhanças da energia utilizada nas simulações (que serão analisados a seguir), a proximidade não é o bastante para excitar o autoestado em  $QC$ . Isto pode ser percebido em 6.17.f), onde  $|\psi(\vec{r})|^2$  é diferente de zero

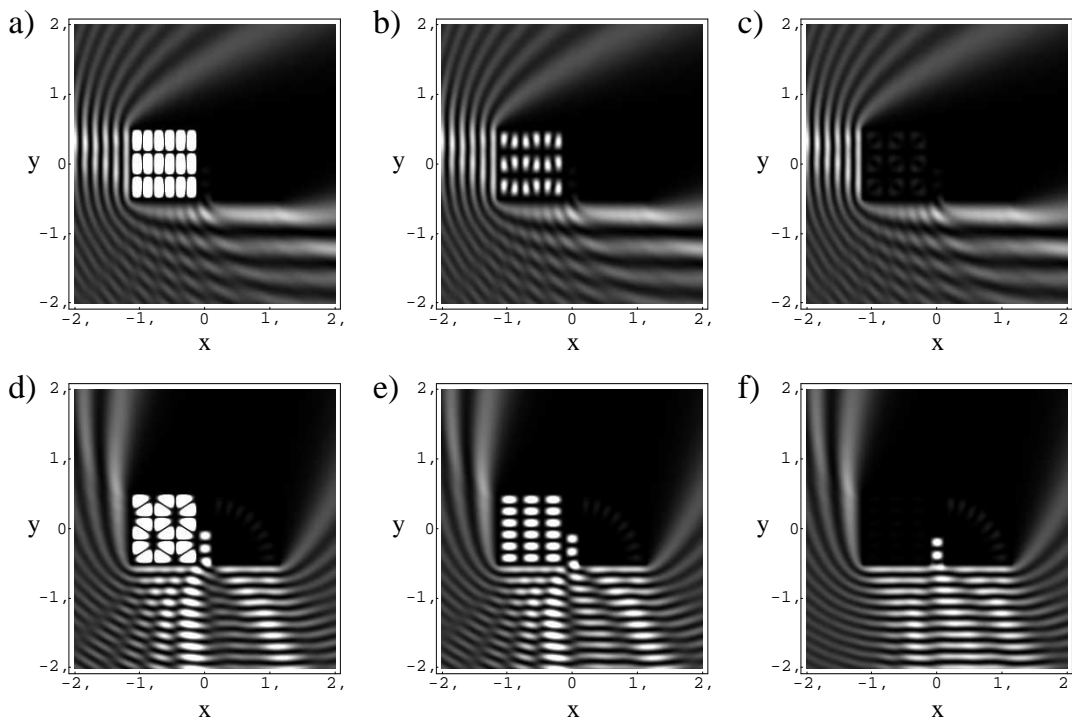


Figura 6.17: Gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para o bilhar formado pelo quadrado  $Q$  acoplado a um quarto de círculo  $QC$  por uma guia de onda de comprimento  $w = 0,25$  e largura  $h$ . O número de onda da onda incidente é  $k = 21,085$  temos que o ângulo de incidência é  $\theta = 18,4^\circ$  (ressonância  $k_{6,3}$  de  $Q$ ) para os três primeiros gráficos e  $\theta = 71,6^\circ$  (ressonância  $k_{3,6}$  de  $Q$ ) para os três últimos. O valor da largura para cada gráfico é:  $h = 0,01$  em a),  $h = 0,025$  em b),  $h = 0,05$  em c),  $h = 0,01$  em d),  $h = 0,1$  em e) e  $h = 0,2$  em f).

no semidisco, mas muito pequeno, uma espécie de “semente” de estado, estando relacionado com a precisão numérica utilizada. Por esse motivo não são observados modos na guia de onda para estados desacoplados. Estes só surgem quando são excitados os autoestados nos dois bilhares ao mesmo tempo, criando assim as condições de contorno necessárias para a existência de modos na guia.

## 6.2.2 Autoestados do quarto de círculo $QC$

Nesta subseção serão analisadas duas situações nas quais a onda incidente tem energia coincidente com autoestados do quarto de círculo  $QC$ .

Nos gráficos a), b) e c) da figura 6.18 é mostrado o autoestado de número de onda  $k = 21,097$  para ângulo de incidência  $\theta = 71,6^\circ$ ,  $w = 0,25$  e  $h$  variando de 0,01 a 0,3. A presença de  $|\psi(\vec{r})|^2$  pequeno, mas não-negligenciável, em c), demonstra que este autoestado tem grande resistência à variação da largura da guia, pois não possui máximos na sua região de abertura. Este é o autoestado do quarto de círculo mais próximo ao de simetria  $3 \times 6$  do

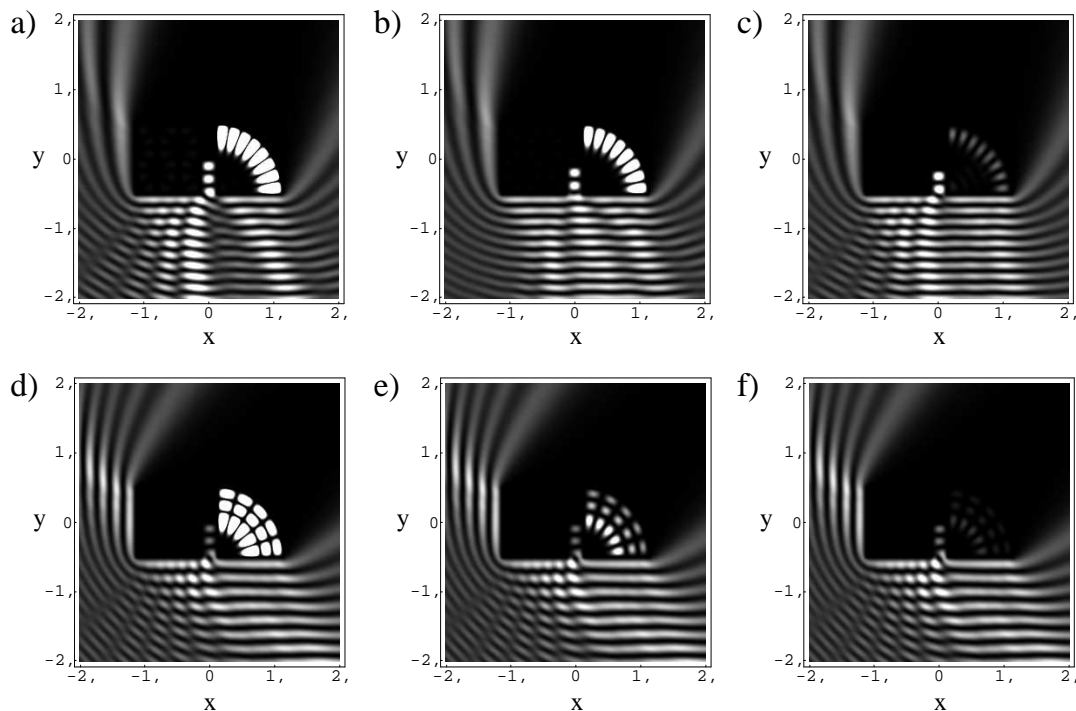


Figura 6.18: Gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para o bilhar formado pelo quadrado  $Q$  acoplado a um quarto de círculo  $QC$  por uma guia de onda de comprimento  $w = 0,25$  e largura  $h$ . O número de onda é  $k = 21,097$  e ângulo de incidência  $\theta = 71,6^\circ$  para os três primeiros gráficos e  $k = 22,0595$  e  $\theta = 45,0^\circ$  para os três últimos. O valor da largura para cada gráfico é:  $h = 0,01$  em a),  $h = 0,2$  em b),  $h = 0,3$  em c),  $h = 0,01$  em d),  $h = 0,015$  em e) e  $h = 0,025$  em f).

quadrado (utilizado em 6.17), possuindo uma variação  $\Delta k$  de apenas +0,012 em seu número de onda e sendo excitado no mesmo ângulo de incidência. Porém, nem mesmo essa proximidade é suficiente para excitar os dois estados ao mesmo tempo.

O segundo caso estudado, mostrado nos gráficos d), e) e f) da figura 6.18, é o da ressonância  $k = 22,0595$ , a seguinte no espectro do quarto de círculo. Para este caso, com  $h = 0,025 \approx \frac{\lambda}{12}$  o autoestado anula-se, mostrando sua pouca tolerância a variação da largura.

Assim como nas ressonâncias do bilhar quadrado analisadas na subseção 6.2.1, percebe-se aqui a tendência dos autoestados que possuem máximos nas proximidades da abertura da guia (figura 6.18.a)) terem muito menos tolerância às variações de  $h$ , quando comparados com o caso oposto (figura 6.18.d)).

### 6.2.3 Autoestados da estrutura acoplada

Nesta seção serão estudados três autoestados da estrutura acoplada. Em cada um dos casos,  $\psi$  na região da guia de onda apresenta características diferentes. As ressonâncias foram encontradas através da análise de  $|T|^2 \times k$  para os bilhares  $Q$  e  $QC$  acoplados por uma guia de onda com  $w = h = 0,25$ .

No primeiro caso, mostrado na figura 6.19.a), o autoestado possui número de onda  $k = 9,655$ . Sua aparência é relacionada à ressonância do quadrado  $k_{3,1} = 9,935$ , da qual está próximo. As porções da função de onda pertencentes às regiões de  $Q$  e  $QC$  estão ligadas por um “braço” que une os picos mais próximos das entradas nas duas extremidades da guia de onda, mostrado no gráfico a). Em 6.19.b), o comprimento da guia de onda é diminuído para  $w = 0,2$  e o autoestado é perdido completamente. No gráfico seguinte, nas proximidades de  $w = 0,4$ , as autofunções desacoplam-se e, conseqüentemente, o modo pertencente à guia de onda se anula e, sem a condição para o acoplamento, apenas a parte pertencente a  $Q$  sobrevive para variações maiores de  $w$ , como mostra o gráfico d), formando uma espécie de garrafa de Helmholtz (MENDEZ-BERMUDEZ et al., 2003; MOLONEY, 2004). Qualquer variação na largura  $h$  também destrói o modo de acoplamento.

Para o autoestado do bilhar acoplado de energia  $k = 12,369$  (próximo e semelhante à ressonância  $k_{4,1} = 12,953$  do quadrado), a constituição do autoestado é semelhante ao exemplo anterior, porém, neste caso o modo que acopla as porções de  $\psi(\vec{r})$  pertencentes às regiões de cada bilhar possui um mínimo próximo à região de acoplamento a  $QC$ , como pode ser observado na figura 6.20.a). Nos gráficos seguintes b)-d), observa-se que as variações no comprimento  $w$  afetam a função de onda em toda a estrutura, sendo que o modo na região da guia de onda tem



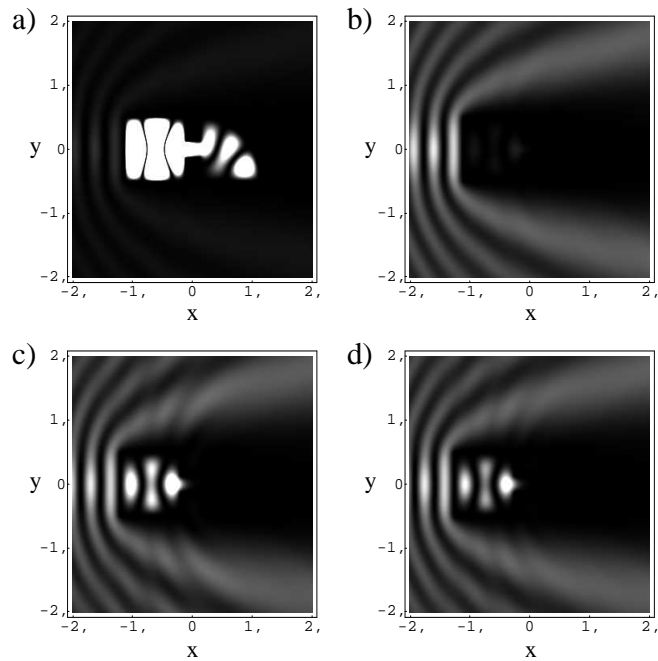


Figura 6.19: Gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para o bilhar formado pelo quadrado  $Q$  acoplado a um quarto de círculo  $QC$  por uma guia de onda de largura  $h = 0,25$  e comprimento  $w$ . A onda incidente tem número de onda  $k = 9,655$  e ângulo de incidência  $\theta = 0^\circ$ . O valor do comprimento para cada gráfico é:  $w = 0,25$  em a),  $w = 0,2$  em b),  $w = 0,4$  em c) e  $w = 0,5$  em d).

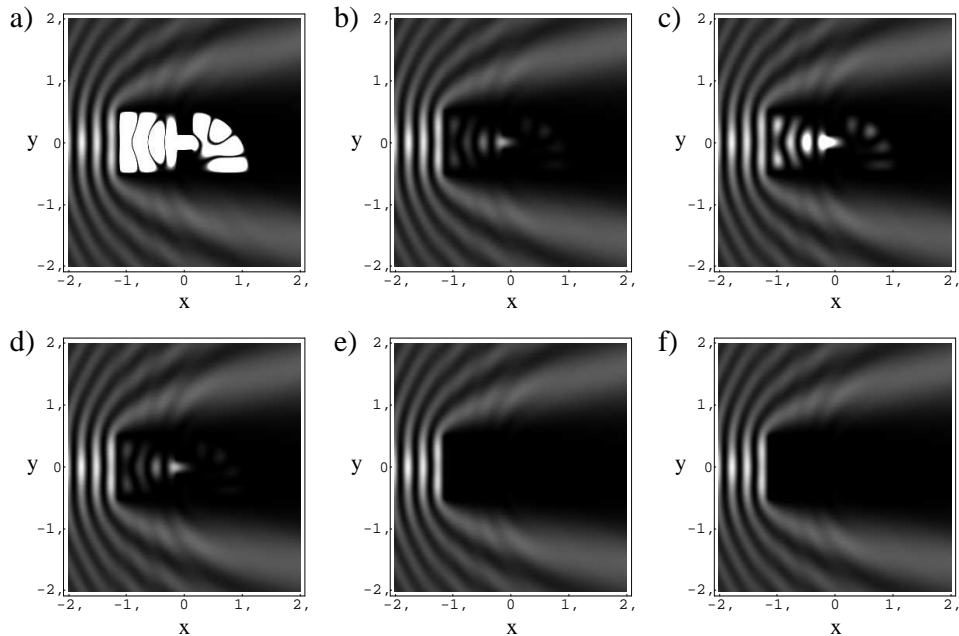


Figura 6.20: Gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para o bilhar formado pelo quadrado  $Q$  acoplado a um quarto de círculo  $QC$  por uma guia de onda de largura  $h$  e comprimento  $w$ . A onda incidente tem número de onda  $k = 12,369$  e ângulo de incidência  $\theta = 0^\circ$ . Os valores de  $w$  e  $h$  para cada gráfico são:  $h = 0,25$  e  $w = 0,25$  em a),  $h = 0,25$  e  $w = 0,23$  em b),  $h = 0,25$  e  $w = 0,26$  em c),  $h = 0,25$  e  $w = 0,27$  em d),  $h = 0,245$  e  $w = 0,25$  em e) e  $h = 0,255$  e  $w = 0,25$  em f).

vida mais longa que as partes pertencentes a  $Q$  e  $QC$ . Em e) e f) nota-se que pequenas variações em  $h$  destroem o autoestado rapidamente.

No terceiro e último exemplo, a parte da função de onda na região da guia não está unida nem à parte de  $\psi(\vec{r})$  pertencente ao quadrado, nem ao quarto de círculo, ao invés disso, possui nós nas duas aberturas da guia. A figura 6.21.a) mostra esta situação para o autoestado  $k = 16,204$ , próximo em valor e aparência da ressonância  $k_{5,1} = 16,019$  do quadrado. De b) a d) observa-se que pequenas variações tanto no comprimento  $w$ , quanto na largura  $h$ , são suficiente para destruir o autoestado do bilhar acoplado.

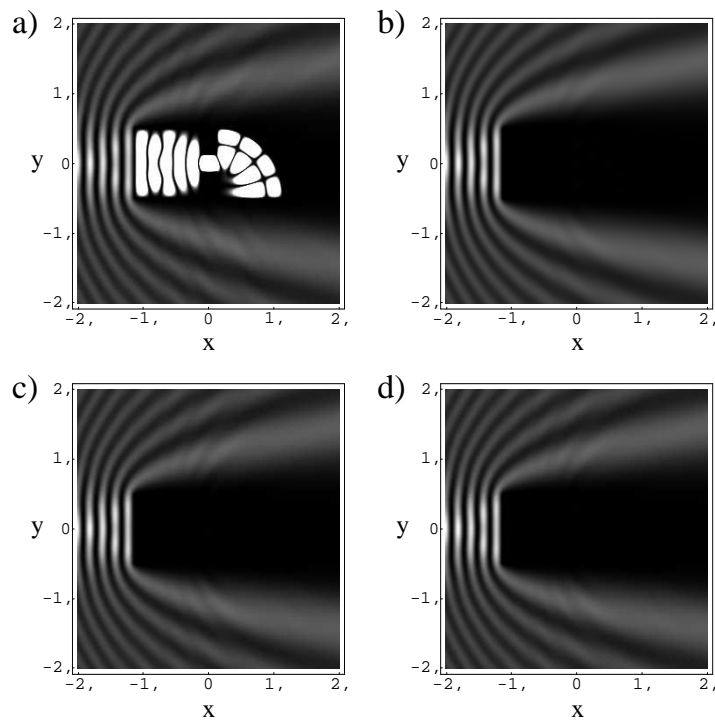


Figura 6.21: Gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para o bilhar formado pelo quadrado  $Q$  acoplado a um quarto de círculo  $QC$  por uma guia de onda de largura  $h$  e comprimento  $w$ . A onda incidente tem número de onda  $k = 16,204$  e ângulo de incidência  $\theta = 0^\circ$ . O valor do comprimento para cada gráfico é:  $h = 0,25$  e  $w = 0,25$  em a),  $h = 0,25$  e  $w = 0,24$  em b),  $h = 0,25$  e  $w = 0,26$  em c) e  $h = 0,24$  e  $w = 0,25$  em d).

Dos três exemplos analisados percebe-se a grande relação entre variação da geometria da guia de onda com a manutenção do autoestado da estrutura acoplada. Isto deve-se à ligação direta entre o autoestado acoplado e a existência de um modo de acoplamento na guia. A variação na largura  $h$  é o fator que afeta mais rapidamente a porção de  $\psi(\vec{r})$  pertencente à guia de onda.

Por questão de simplicidade e de uma melhor visualização, as análises acima foram efetuadas para autoestados de energia relativamente baixas, que sustentam apenas um modo na

guia de onda. Autoestados de maior energia, que apresentam uma estrutura mais intrincada de modos, apresentam comportamentos semelhantes.

### **Variação da largura $h$ e da energia**

Como visto na seção 6.1 para dois quadrados acoplados e na subseção anterior para o quadrado acoplado a um quarto de círculo, os autoestados na estrutura acoplada têm grande dependência com a forma da guia de onda. Isto advém da necessidade de manutenção de modos na região da guia, que criam as condições de contorno essenciais à coexistência da autofunção nas duas estruturas primárias do bilhar acoplado. Desta forma, a seguir faremos uma análise de como os autoestados variam quando a geometria do sistema é modificada, ou seja, de como um autoestado modifica-se, acomodando-se na nova estrutura.

O estudo é então similar ao efetuado na subseção 6.1.3, onde os autoestados são encontrados através da análise do comportamento de um elemento da matriz  $T(i, j)$  quando a geometria do bilhar composto e a energia da onda incidente são variados.

Na figura 6.22 são mostrados gráficos da variação do módulo quadrado de um elemento de  $T(i, j)$  com a largura da guia de onda  $h$  e o número de onda  $k$  da onda incidente. Fixamos o comprimento em  $w = 0,5$ . Os gráficos diferem na escolha do elemento da matriz  $T(i, j)$ , sendo que: em a),  $i = j$  é tomado no centro da parede vertical esquerda de  $Q$ ; em b),  $i = j$  é tomado no ponto médio do arco do quarto de circunferência; e, em c),  $i$  é tomado no ponto de observação utilizado em a) e  $j$  no utilizado em b). Os pontos localizados sobre um determinado elemento de um mesmo bilhar ( $Q$  ou  $QC$ ) fornecem mais informações acerca dos autoestados deste bilhar, ao passo que, quando são tomados pontos em bilhares diferentes, a informação é relacionada apenas a um autoestado que conecta esses dois pontos, ou seja, um estado acoplado que se estende por todo o bilhar composto.

O gráfico 6.22.a) mostra como  $T(i, j)$ , fortemente relacionado ao quadrado  $Q$ , comporta-se quando é variada a largura  $h$  da guia de onda. Cada um dos “caminhos” mais claros é referente a uma solução diferente e quando  $h \rightarrow 0,0$ , os caminhos coincidem com o espectro do quadrado sem acoplamento. À medida que a largura  $h$  aumenta, a energia deve diminuir ( $\lambda$  aumentar) para acomodar o modo na nova estrutura, pois, essa possui área maior que a anterior. A mesma análise é válida para 6.22.b), que dá informações acerca da parte da autofunção correspondente a  $QC$ .

Em nenhum dos dois gráficos a) e b) pode-se definir com clareza uma região onde esse fenômeno de migração para  $k$ 's menores se inicia, como pode ser feito no acoplamento dos dois

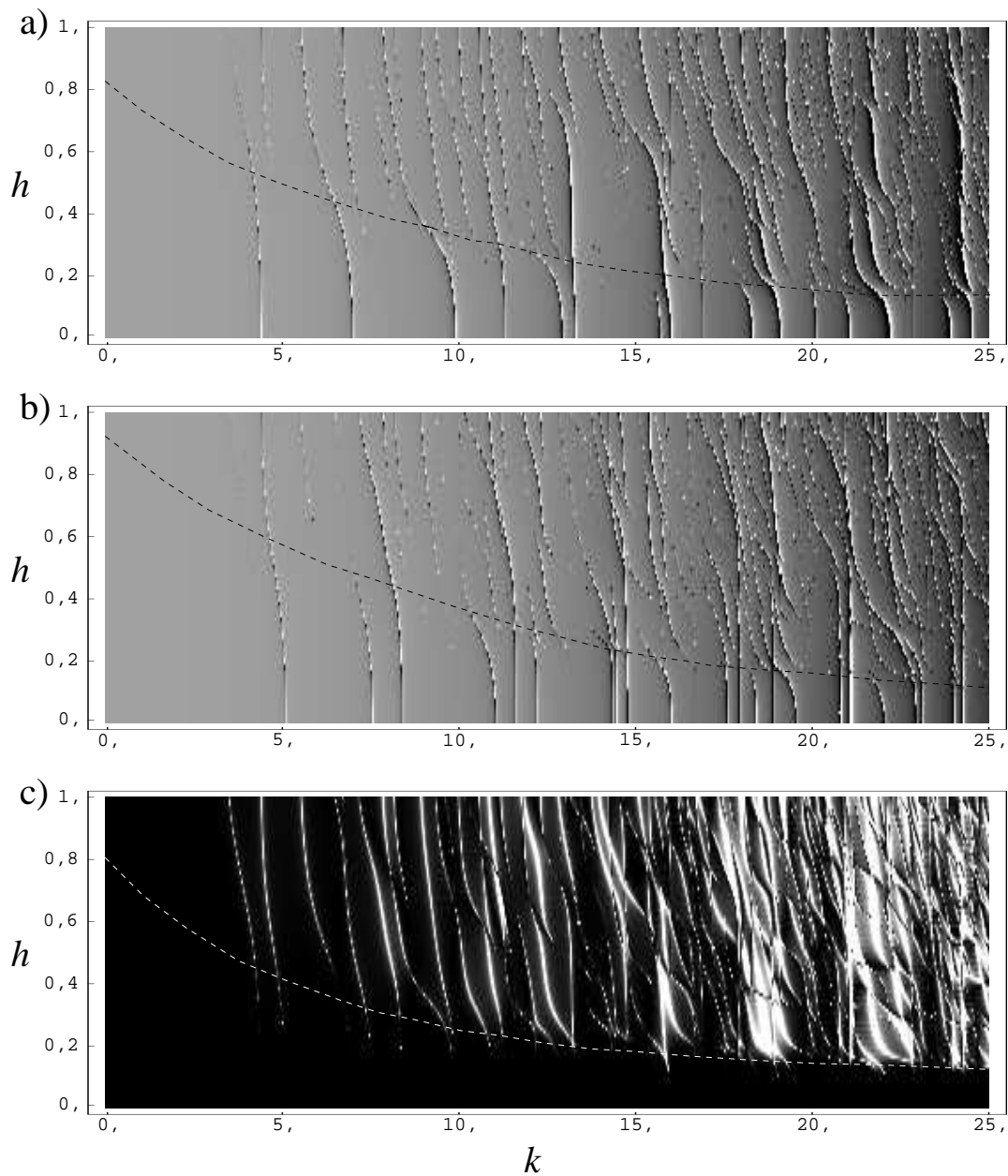


Figura 6.22:  $k \times h \times |T(i, j)|^2$  para  $w = 0,5$ . a) elemento de  $T(i, j)$  com  $i = j$  localizado no centro de um dos lados de  $Q$ . b) elemento de  $T(i, j)$  com  $i = j$  localizado no centro do arco do quarto de círculo  $QC$ . c) elemento de  $T(i, j)$  com  $i$  localizado  $Q$  e  $j$  em  $QC$ .

quadrados. Naquele caso, pelos dois bilhares serem iguais e, conseqüentemente, terem o mesmo espectro, a condição de acoplamento para ambos é igual, o que confere a dependência linear da região de  $h$  até onde a autoenergia se mantém. No caso presente, os bilhares  $Q$  e  $QC$  possuem espectros diferentes, então a condição de casamento da função de onda dos dois deve adequar-se à distribuição dos autoestados, fazendo com que alguns modos sobrevivam para variação maior de  $h$  (como o primeiro autoestado do quadrado e do círculo) e outros comecem a migrar para  $k$ 's menores e para  $h$ 's pequenos (como o quinto autoestado do quadrado ou quarto do quarto de

círculo).

Tanto para o quadrado quanto para o quarto de círculo existem três comportamentos básicos dos autoestados à medida que  $h$  aumenta, que são aqueles já observados para o acoplamento de dois quadrados. Alguns autoestados sobrevivem por todo o intervalo, desde  $0,0 < h < 1,0$ ; alguns autoestados desaparecem; e alguns autoestados são criados. Estes comportamentos são observados nas proximidades da linha pontilhada nos gráficos, que decai de forma obviamente não-linear.

Através da comparação de a) e b) percebe-se que todos os estados que sobrevivem ou são criados acima da linha pontilhada são autoestados do bilhar acoplado. Isto é confirmado pelo gráfico c). Abaixo da linha pontilhada a densidade é bem menor, sendo a região dominada pelos autoestados das soluções não acopladas de  $Q$  e  $QC$ .

### **Variação da largura $h$ e do comprimento $w$ da guia de onda para energia fixa**

O último caso a ser tratado nesta seção é o de como uma energia fixa pode gerar vários autoestados diferentes dependendo da geometria do bilhar. Para tanto faremos uma análise parecida com a anterior, porém agora fixaremos o número de onda  $k$  e variaremos a largura  $h$  e o comprimento  $w$  da guia de onda.

A figura 6.23 mostra o comportamento de um elemento de  $T(i, j)$  quando são variados  $h$  e  $w$  para duas energias  $k = 8,7$  em a), b) e c) e  $k = 12,369$  em d), e) e f). Os elementos de  $T(i, j)$  utilizados são os mesmo da figura 6.22, com a) e d) fornecendo a variação da solução em  $Q$ , b) e e) em  $QC$  e c) e f) as soluções acopladas. Comparando os gráficos vemos que para um acréscimo de aproximadamente 40% na energia ( $\Delta k \approx 3,5$ ), o número de autoestados diferentes que podem ser criados variando os parâmetros da guia de onda dobra. Em ambos os gráficos os autoestados são criados para valores de  $h > \frac{1}{2}$ , ou seja, acima da linha tracejada da figura 6.22, o que mostra que estes autoestados são essencialmente soluções da estrutura acoplada.

Para exemplificar como muda a distribuição espacial da autofunção quando fixa-se a energia e é variada a geometria do bilhar, a figura 6.24 mostra os gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para os valores marcados no gráfico 6.23.a). Os diferentes símbolos pertencem a diferentes famílias de autoestados. A primeira família, marcado por círculos  $\circ$ , possui um modo comum entre  $Q$  e  $QC$ , o que faz com que tenha grande sensibilidade à variação de  $h$ . Note que, ao longo da mesma  $h$  quase não muda. A segunda família, marcada por cruces  $+$ , é associada à ressonância  $k_{2,2} = 8,886$  do quadrado. Esta possui dependência mais forte com relação a  $h$ . Logo, qualquer variação na largura destrói o autoestado. Porém, ele é insensível a variações

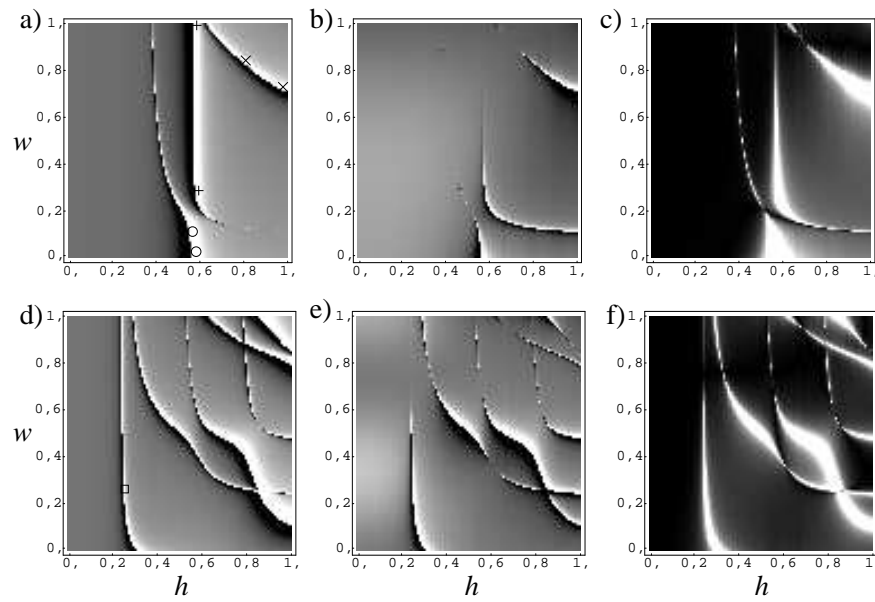


Figura 6.23:  $h \times w \times |T(i, j)|^2$  para  $k = 8,7$  em a), b) e c) e  $k = 12,369$  em d), e) e f). Em a) e d) elemento de  $T(i, j)$  com  $i = j$  localizado no centro de um dos lados de  $Q$ . Em b) e e) elemento de  $T(i, j)$  com  $i = j$  localizado no centro do arco do quarto de círculo  $QC$ . Em c) e f) elemento de  $T(i, j)$  com  $i$  localizado  $Q$  e  $j$  em  $QC$ . Os sinais em a) marcam as posições referentes aos parâmetros  $h$  e  $w$  utilizados nos gráficos da figura 6.24. A marca em d) marca a posição referente ao gráfico 6.20.a).

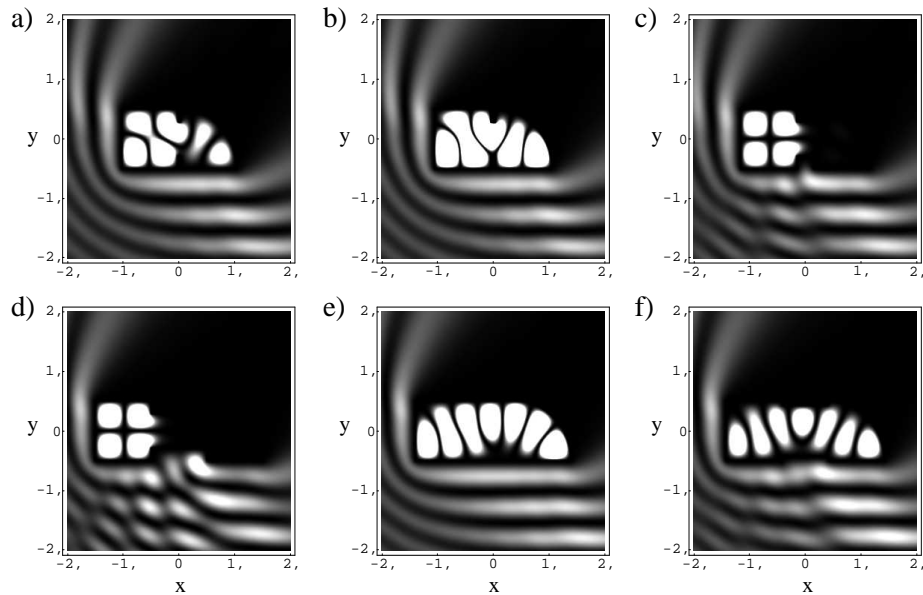


Figura 6.24: Gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para os valores de  $h$  e comprimento  $w$  marcados na figura 6.23.a). A onda incidente tem número de onda  $k = 8,7$  e ângulo de incidência  $\theta = 45^\circ$ . Os valores do comprimento e largura da guia para cada gráfico são:  $h = 0,557, w = 0,05$  em a) e  $h = 0,1, w = 0,34$  em b), valores referentes aos pontos marcados com  $o$ ;  $h = 0,573, w = 0,3$  em c) e  $h = 0,573$  e  $w = 1,0$  em d), marcados com  $+$ ;  $h = 1,0, w = 0,775$  em e) e  $h = 0,856$  e  $w = 0,83$  em f), marcados com  $\times$ .

do comprimento  $w$ , como pode-se ver por c) e d). A terceira família, marcada por  $\times$ , é uma solução de  $Q$  acoplado a  $QC$  por um modo na guia de onda, que evolui para a solução de um bilhar quarto de estádio no limite  $h \rightarrow 1,0$ , 6.24.e) e f). Note que ela surge apenas para  $w$ 's altos.

Em 6.23.d), o ponto marcado por um quadrado  $\square$  é referente à posição dos parâmetros na simulação do autoestado mostrado na figura 6.20.a), na sua análise vimos que, o autoestado é muito sensível a variações de  $h$  e possui alguma durabilidade perante variações de  $w$ , o que pode ser confirmado pela observação de 6.20.d).

### 6.3 Transmissão através de um bilhar quadrado com guias de onda acopladas

O terceiro e último tipo de bilhar com estrutura composta a ser abordado é o quadrado com guias de onda acopladas, mostrado na figura 6.25. Ao contrário dos dois casos estudados anteriormente, o bilhar abordado agora é aberto ao meio externo, o que lhe confere características diferentes das vistas para os bilhares fechados, a começar pela abordagem do estudo.

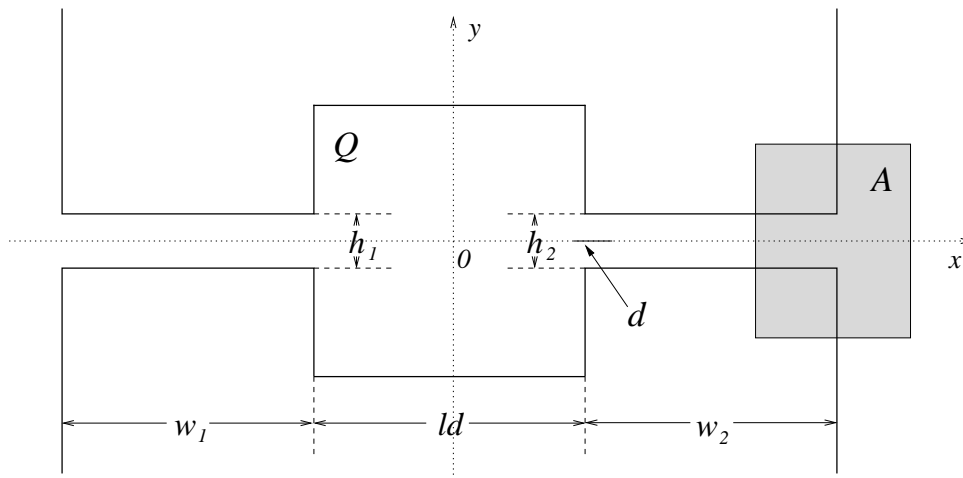


Figura 6.25: Quadrado aberto  $Q$ , de lado  $ld$ , acoplado às guias de onda de larguras  $h_1$  e  $h_2$  e comprimentos  $w_1$  e  $w_2$ . O centro de cada guia é acoplado ao quadrado na posição  $d$ .

Bilhares abertos são de grande aplicação no estudo de transmissão e transporte em estruturas, que na maioria das vezes é calculada através do formalismo de Landauer (ALT et al., 1998; AKIS et al., 2002; SAICHEV et al., 2002; SADREEV, 2004; SADREEV et al., 2006).

Neste tipo de problema, além da análise de como se dá a construção da função de onda estacionária no bilhar quando são acopladas guias, pode-se também explorar como a transmissão através da estrutura pode ser favorecida ou não pela sua presença. Isto é feito pela mediação da amplitude da função de onda na guia de entrada acoplando-a com a amplitude na guia de saída.

Usualmente, o estudo de transporte em bilhares é feito por tratamentos estatísticos que levam em conta uma superposição randômica de onda planas para bilhares caóticos (BERRY, 2002). Apesar de aparentemente mais simples, a transmissão em bilhares regulares é mais complexa do que em bilhares caóticos, pois nestes a função de onda não pode ser escrita como composições de  $\exp[i\vec{k} \cdot \vec{r}]$  com  $\vec{k}$  de direção aleatória, neste caso o método mais comum de solução é utilizando técnicas de espalhamento (SADREEV, 2004).



Os bilhares abertos não possuem um espectro de ressonâncias como no caso fechado, pois seu acoplamento ao meio externo contínuo inibe a formação de autoestados com níveis discretos de energia na sua região interior. Porém, quando a energia da onda transmitida pela guia de entrada aproxima-se da energia correta de algum autoestado do bilhar, a forma da função de onda na estrutura é muito similar àquela referente a ressonância do bilhar sem as guias. Esta é a chamada transmissão ressonante (SADREEV, 2004), que será vista nas simulações mostradas a seguir.

Quando a energia na onda incidente não coincide com nenhum autoestado do bilhar, como é o caso da transmissão não-ressonante, vários estados contribuem para a formação da função de onda e transmissão, sendo selecionados pelo casamento de simetria do acoplamento do bilhar com as guias de onda.

Nesta seção será estudado como variações nas guias de entrada e saída, acopladas ao bilhar quadrado, afetam a transmissão da função de onda. A abordagem tem por finalidade uma demonstração qualitativa de como o MCP pode ser útil na obtenção das geometrias que mais favorecem a transmissão. Para tanto serão variados a largura de ambas as guias ( $h_1$  e  $h_2$ ) e a posição de acoplamento  $d$  da guia de saída.

As implicações da variação da estrutura serão observados através da quantidade  $F$ , que é definida como a integral de  $|\psi(\vec{r})|^2$  sobre a área  $A$  (ver figura 6.25)

$$F = \int_A |\psi(\vec{r})|^2 dA. \quad (6.1)$$

A versão discretizada de  $F$ , própria para a implementação numérica, é

$$F = \sum_{i=1}^{N_x} \sum_{j=1}^{N_y} |\psi(\vec{r}_{i,j})|^2 dx_i dy_j, \quad (6.2)$$

na qual  $\vec{r}_{i,j}$  é o vetor posição do centro do elemento de área  $dA_{ij} = dx_i dy_j$ . Os índices  $i$  e  $j$  variam de 1 a  $N_x$  e 1 a  $N_y$ , respectivamente, sendo  $N_x$  e  $N_y$  o número de células  $\Delta x$  e  $\Delta y$  da área  $A$ .

São fixados nas simulações o tamanho do quadrado  $Q$  ( $ld = 1,0$ ) e o comprimento das guias ( $w_1 = w_2 = 1,0$ ). A área  $A$  onde é medido o fluxo  $F$  varia de acordo com o valor da largura  $h_2$  da guia de saída, visando manter a proporção entre cada diferente medida. Seu valor é  $A = (0,6)(0,6 + h_2)$ , onde a variação ocorre apenas na componente  $y$ , pois, o comprimento  $w_2$  é mantido fixo. Juntamente com  $y$  variamos também o  $N_y$  a fim de manter constante a discretização em cada caso. Em todas as simulações  $\Delta x = \Delta y = 0,01$ . A onda incide sempre no

eixo  $x$  positivo, ou seja, a onda entra sempre pela guia da esquerda e sai pela da direita.

As paredes verticais ligadas ao início da guia de entrada e fim da guia de saída são destinadas apenas a barrar contribuições de espalhamentos externos do bilhar, garantindo que apenas a contribuição referente à transmissão está sendo integrada no fluxo.

As simulações serão efetuadas para três valores de energia da onda incidente:  $k_{6,10} = 36,637$ , autoestado de simetria  $6 \times 10$  do bilhar quadrado;  $k_{4,11} = 36,771$ , autoestado de simetria  $4 \times 11$  do bilhar quadrado;  $k = 36,704$ , valor que reside no centro do intervalo entre os dois autovalores do quadrado. Veremos que as diferentes simetrias no eixo  $y$ , para os três valores, levam a resultados diferentes de transmissão.

### 6.3.1 Variação da largura $h_1$ da guia de onda de entrada

O primeiro caso a ser considerado nesta seção é o de como se comporta a transmissão quando é variada a largura  $h_1$  da guia de onda de entrada, sendo a largura da guia de saída  $h_2$  e a energia da onda incidente fixos.

A largura da guia de entrada  $h_1$  varia de 0 a, aproximadamente,  $2\lambda$ . Na guia de saída mantemos  $h_2 \approx \frac{\lambda}{2} = 0,089$ . É escolhido este valor para  $h_2$  porque, quando fixamos  $h_1 = h_2 = \frac{\lambda}{2}$  e  $k_{4,11}$  para a onda incidente, então encontramos uma condição de transmissão ressonante. Como as energias escolhidas são todas muito próximas, apresentando variação de menos de 0,5%, é razoável manter a largura  $h_2$  nas simulações para os três valores de  $k$ .

A figura 6.26 mostra a curva de  $F \times h_1$  para uma onda incidente de  $k = 36,637$ , que corresponde ao autovalor da ressonância  $6 \times 10$  do quadrado. Como é de se esperar, para  $h_1 < \frac{\lambda}{2}$  o fluxo é nulo, pois a largura da guia é muito pequena para permitir a penetração da onda. Para larguras maiores do que  $\frac{\lambda}{2}$  sempre existe transmissão diferente de zero ao fim da guia de saída. Logo após o primeiro pico, em  $h_1 \approx 0,089$ , o fluxo oscila rapidamente, devido aos efeitos de difração na saída da guia. Aos poucos estabiliza-se e cresce continuamente, até o valor de  $h_1 \approx \frac{3}{2}\lambda \approx 0,257$ , onde novamente começa a oscilar, com amplitude maior.  $\frac{\lambda}{2} < h_1 < \frac{3}{2}\lambda$  é o intervalo onde apenas um modo transversal é transmitido pela guia de entrada. Acima de  $\frac{3}{2}\lambda$ , mais modos podem ser acomodados e interferir na guia de onda, como pode ser visto nos gráficos para  $|\psi(\vec{r})|^2$ .

O acoplamento da guia de onda ao centro do quadrado faz com que o bilhar não possua a forma correta para sustentar estados de transmissão similares aos autoestados com número de picos verticais pares do bilhar isolado, pois, nenhum máximo localiza-se alinhado à entrada das guias. Logo, a função de onda espalhada criada no interior do bilhar não terá a aparência

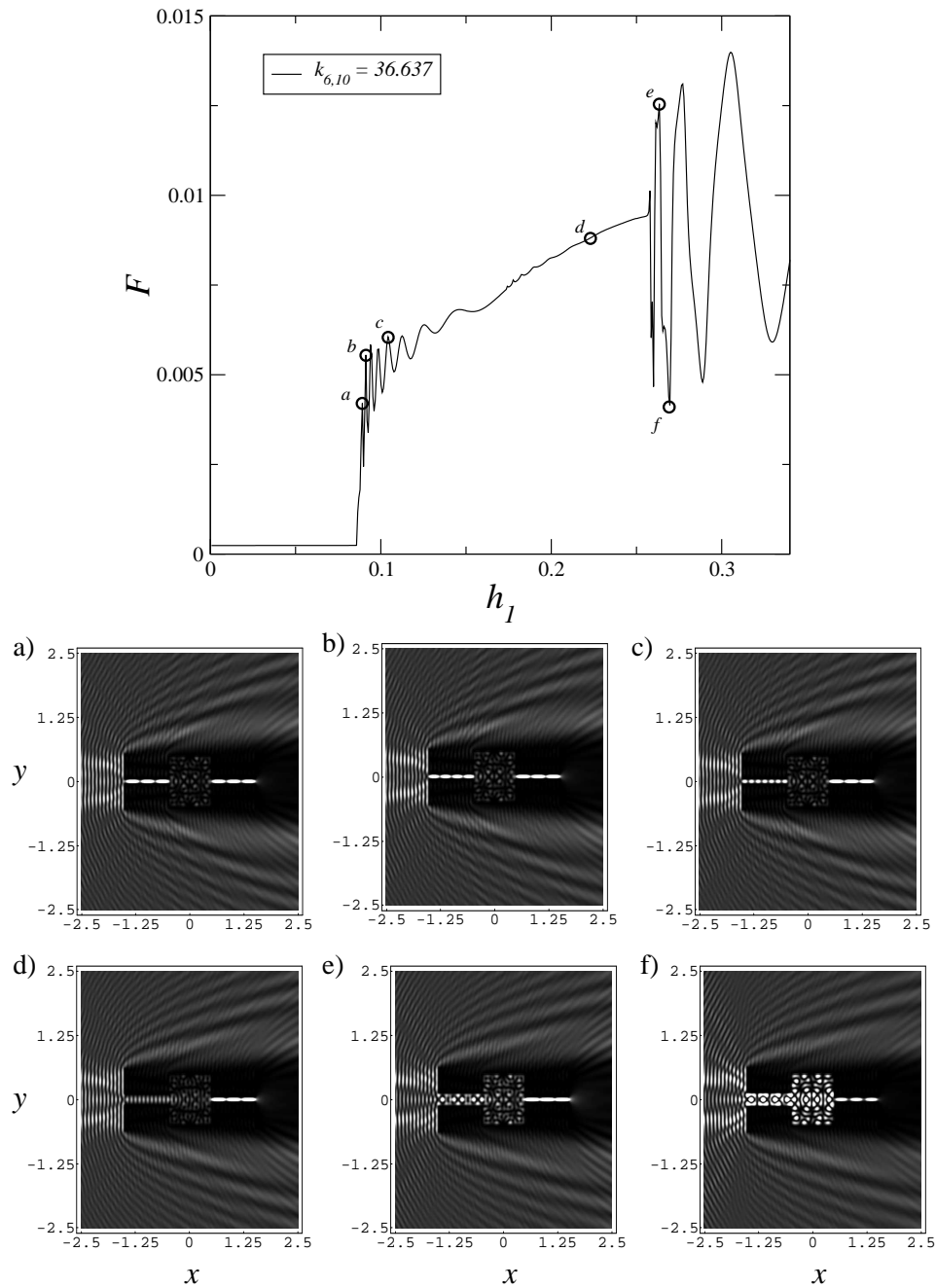


Figura 6.26: À esquerda  $F \times h_1$  para  $h_2 = 0,089$  e  $k = 36,637$ . À direita, gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para os valores de  $h_1$  marcados na curva. Em a)  $h_1 = 0,089$ , b)  $h_1 = 0,091$ , c)  $h_1 = 0,104$ , d)  $h_1 = 0,223$ , e)  $h_1 = 0,263$  e f)  $h_1 = 0,269$ .

semelhante ao autoestado  $k_{6,10}$ , apresentando uma distribuição mais desordenada para  $\psi$ . Isto pode ser visto nas figuras 6.26.a-f), que são os gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para os pontos marcados por  $\circ$  na curva. Percebe-se que, com exceção de f), em nenhum dos gráficos a função de onda interna ao bilhar tem grande amplitude, porém todos possuem transmissão significativa até o fim da segunda guia.

A variação de  $F \times h_1$  para  $k = 36,704$ , mostrado na figura 6.27, é muito semelhante ao caso analisado para a energia anterior. A diferença mais destacada é o fato de o primeiro mínimo da segunda série de oscilações ( $F = 0,0009$ ) ser muito menor do que no caso anterior ( $F = 0,004$ ). Dos gráficos de  $|\psi(\vec{r})|^2$  6.27.a)-b), observa-se que a função de onda interna ao bilhar é muito mais intensa e começa a mostrar indícios do modos da ressonância  $4 \times 10$  do quadrado, que será analisado a seguir.

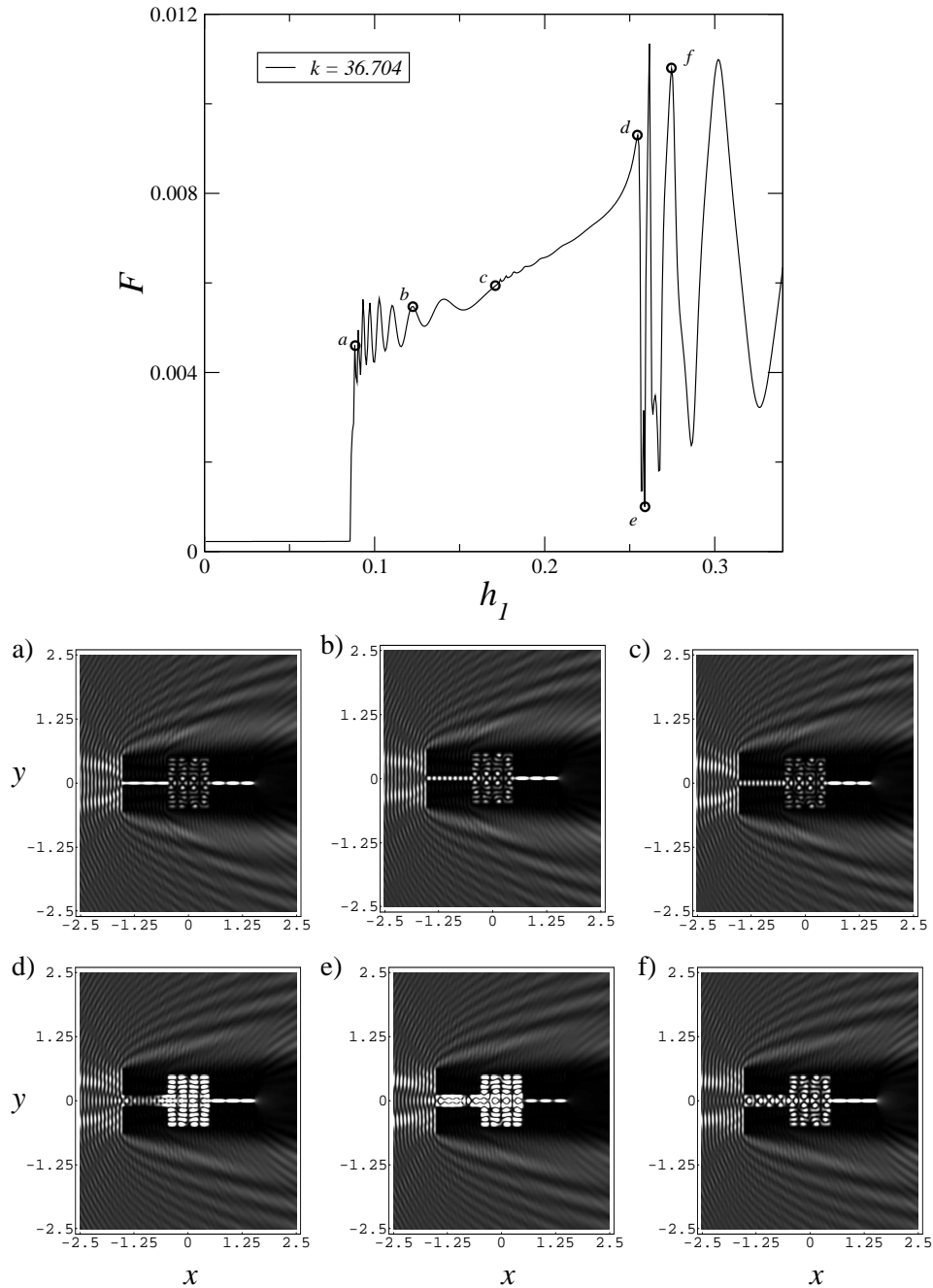


Figura 6.27: À esquerda  $F \times h_1$  para  $h_2 = 0,089$  e  $k = 36,704$ . À direita, gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para os valores de  $h_1$  marcados na curva. Em a)  $h_1 = 0,089$ , b)  $h_1 = 0,122$ , c)  $h_1 = 0,171$ , d)  $h_1 = 0,255$ , e)  $h_1 = 0,259$  e f)  $h_1 = 0,275$ .

A onda incidente com número de onda  $k = 36,771$  possui a simetria  $4 \times 11$  do bilhar quadrado. As simetrias com um número  $n$  ímpar de máximos na vertical possuem sempre um máximo alinhado com o centro da guia de onda, o que favorece a transmissão ressonante (criação de uma função de onda espalhada no interior do bilhar com a forma muito semelhante a da autofunção original). Isto é visto nos gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  da figura 6.28. A curva de  $F \times h_1$  apresenta o mesmo comportamento geral que os dois casos anteriores até  $h_1 \approx \lambda$ ,

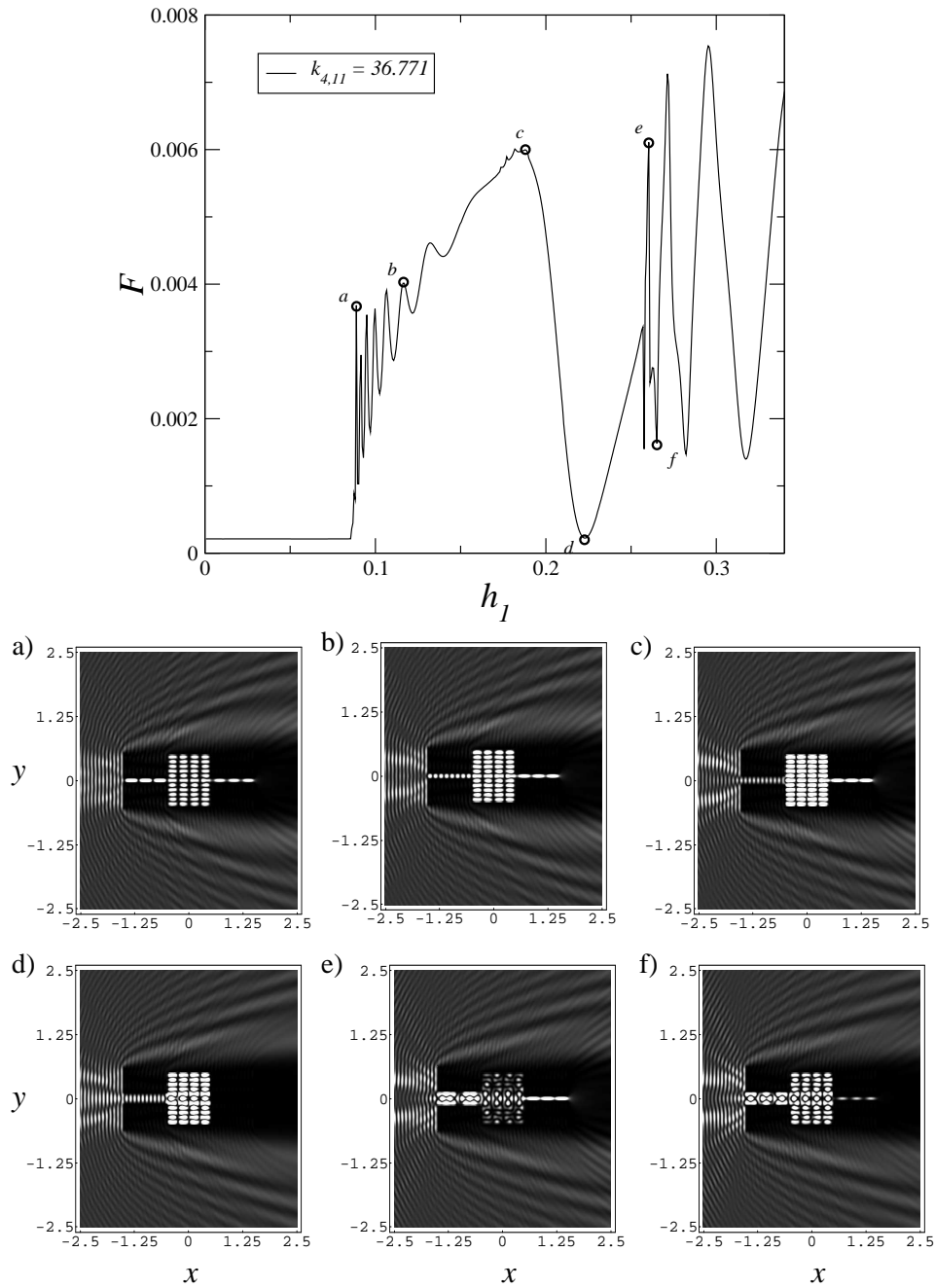


Figura 6.28: À esquerda  $F \times h_1$  para  $h_2 = 0,089$  e  $k = 36,771$ . À direita, gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para os valores de  $h_1$  marcados na curva. Em a)  $h_1 = 0,089$ , b)  $h_1 = 0,116$ , c)  $h_1 = 0,187$ , d)  $h_1 = 0,223$ , e)  $h_1 = 0,250$  e f)  $h_1 = 0,265$ .

quando começa decrescer até chegar a  $F = 0,0$  para  $h_1 \approx \frac{4}{3}\lambda$ . O gráfico 6.28.d) mostra que apesar deste mínimo para  $F$ , a função de onda  $\psi$  na parte interna ao bilhar quadrado é muito intensa, ou seja, a onda é aprisionada no interior do bilhar aberto. Neste tipo de situação diz-se que o sistema possui um estado ligado ao contínuo (*bound state in the continuum*) (SADREEV et al., 2006).

### 6.3.2 Variação da largura $h_2$ da guia de onda de saída

Nesta subseção será feita uma análise onde é fixada a largura  $h_1$  da guia de onda de entrada e o número de onda incidente  $k$ , e observamos como  $F$  se comporta à medida que a guia de onda de saída varia. As energias utilizadas são as mesmas do caso anterior.

Observando as figuras 6.29, 6.30 e 6.31, que mostram  $F \times h_2$  para as três diferentes energias da onda incidente, percebe-se que sua estrutura geral se assemelha àquelas obtidas para a situação onde  $h_1$  varia. Em todos os gráficos a transmissão inicia-se para  $h_2 \approx \frac{\lambda}{2}$ , apresentando o segundo ciclo de oscilações a partir de  $h_2 \approx \frac{3}{2}\lambda$ . Porém, há uma diferença básica entre 6.29 e 6.30. Após o primeiro ciclo de oscilações,  $F$  sofre um pequeno decréscimo até o início do segundo ciclo. Isto decorre do fato de que quando é variada a primeira guia, a partir de  $\frac{\lambda}{2}$  a onda tem liberdade para penetrar na estrutura continuamente (uma vez que vem do contínuo) e, então, a transmissão aumenta. Para penetrar na guia de saída, a função de onda deve ajustar-se aos modos internos do bilhar, próximos da sua entrada. Isso faz com que a transmissão seja mais sensível à variação de  $h_2$ , o que pode ser visto nos gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  referentes a estes pontos. Tais gráficos também mostram comportamentos parecidos ao visto na subseção anterior.

Em 6.31 observa-se o mesmo fenômeno de  $F \rightarrow 0,0$ , que acarreta o aprisionamento da função de onda no interior do bilhar, o que é mostrado no gráfico 6.31.d).

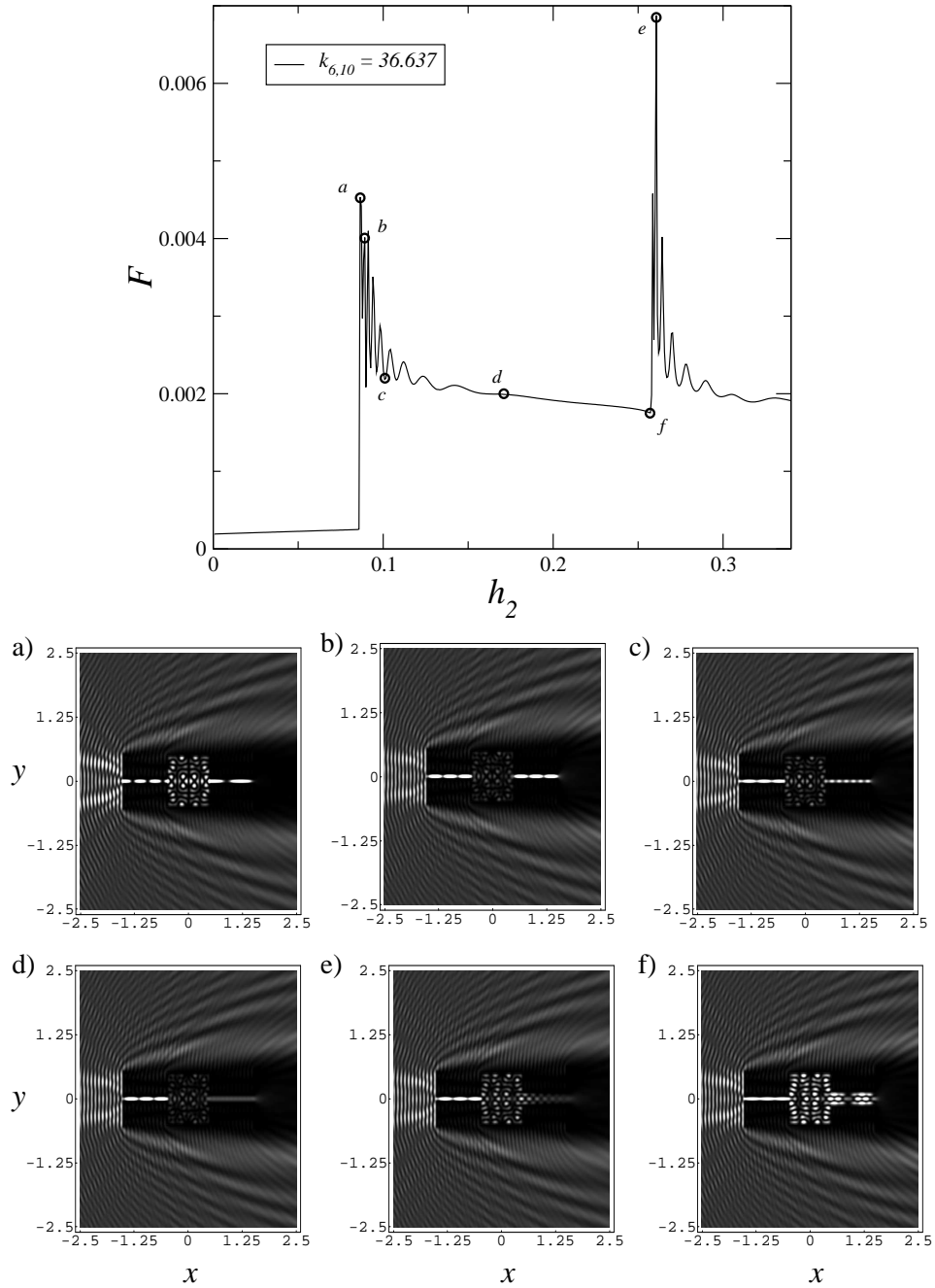


Figura 6.29: À esquerda  $F \times h_2$  para  $h_1 = 0,089$  e  $k = 36,637$ . À direita, gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para os valores de  $h_2$  marcados na curva. Em a)  $h_2 = 0,087$ , b)  $h_2 = 0,089$ , c)  $h_2 = 0,101$ , d)  $h_2 = 0,171$ , e)  $h_2 = 0,257$  e f)  $h_2 = 0,260$ .

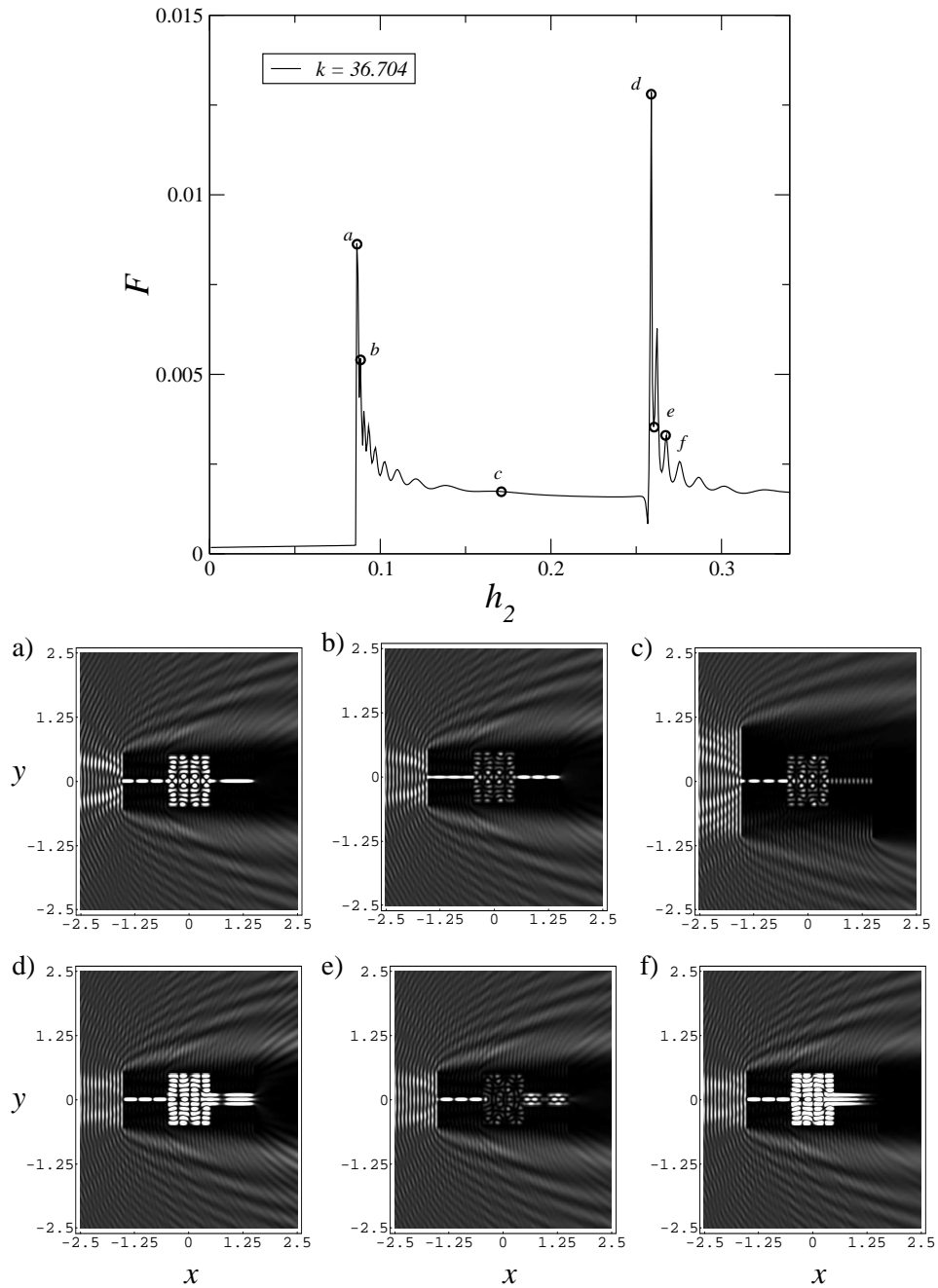


Figura 6.30: À esquerda  $F \times h_2$  para  $h_1 = 0,089$  e  $k = 36,704$ . À direita, gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para os valores de  $h_2$  marcados na curva. Em a)  $h_2 = 0,089$ , b)  $h_2 = 0,116$ , c)  $h_2 = 0,171$ , d)  $h_2 = 0,223$ , e)  $h_2 = 0,258$  e f)  $h_2 = 0,259$ .



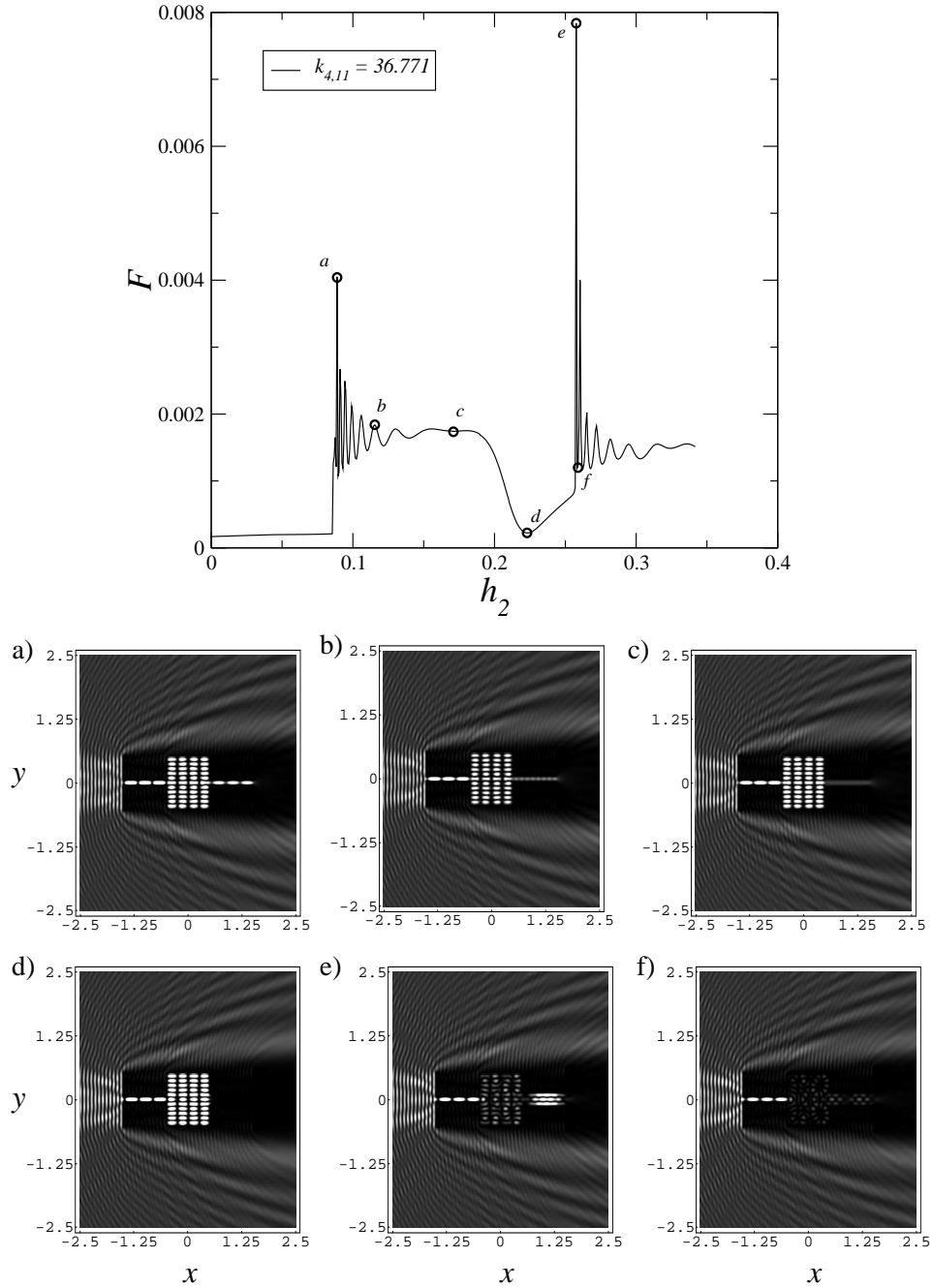


Figura 6.31: À esquerda  $F \times h_2$  para  $h_1 = 0,089$  e  $k = 36,771$ . À direita, gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para os valores de  $h_2$  marcados na curva. Em a)  $h_2 = 0,087$ , b)  $h_2 = 0,089$ , c)  $h_2 = 0,171$ , d)  $h_2 = 0,258$ , e)  $h_2 = 0,260$  e f)  $h_2 = 0,267$ .

### 6.3.3 Variação da posição $d$ da guia de onda de saída

Foi visto nas simulações mostradas até agora que a interação entre as simetrias da função de onda no interior do bilhar quadrado  $Q$  com as da guias de onda tem grande influência na transmissão. Suas características dependem da paridade da função em relação ao eixo- $y$ , passando da transmissão “desordenada”, ou não-ressonante, para ondas com energias associadas aos autoestados de número de máximos verticais  $n$  pares, para a transmissão ressonante quando  $n$  é ímpar. Este comportamento foi observado até agora com as guias de onda alinhadas e fixas ao centro dos lados verticais do quadrado. Seria interessante então analisar como modifica-se a transmissão quando é quebrada esta simetria entre as posições de acoplamento das guias.

Nesta subseção será considerada a variação de  $F$  com a posição de acoplamento  $d$  da guia de onda de saída, para a guia de entrada mantida fixa no centro de  $Q$  ( $y = 0,0$ ). Como veremos, os gráficos possuem simetria em relação a  $d = 0$ . Então, os comentários serão feitos apenas para  $d$  positivo, visto que para  $d < 0$  as conclusões são análogas. As larguras  $h_1$  e  $h_2$  das duas guias são mantidas constantes em cada simulação. Serão utilizadas as mesmas energias que nas seções anteriores para a onda incidente.

Na figura 6.32 é mostrado o gráfico de  $F \times d$  para uma onda incidente com  $k_{6,10} = 36,637$  em bilhares com três valores das larguras das guias:  $h_1 = h_2 = 0,088$  (linha contínua);  $h_1 = h_2 = 0,089$  (linha tracejada);  $h_1 = h_2 = 0,090$  (linha pontilhada). A simetria da curva em relação a  $d = 0$  é evidente. Todas as curvas apresentam um pico pronunciado em  $d = 0$ , indicando que apenas esta posição de acoplamento da guia é favorável à transmissão para a energia escolhida. A curva tracejada ainda apresenta um pequeno pico nas proximidades de  $d = 0,181 \approx \frac{\lambda}{2}$ , porém muito pequeno em comparação com pico principal, aproximadamente 45 vezes menor.

Na parte de baixo da figura 6.32 aparecem os gráficos de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para o pico de cada curva de  $F \times d$ . Para  $h_1 = h_2 = 0,089$  (gráfico b)), apesar de a transmissão ocorrer de forma “normal” até o fim da guia de onda de saída, a função de onda tem amplitude muito baixa no interior de  $Q$ , como visto anteriormente. Porém, para os dois outros casos,  $h_1 = h_2 = 0,088$  (gráfico a)) e  $h_1 = h_2 = 0,090$  (gráfico c)), a amplitude da função de onda no quadrado é comparável à das guias.

Comparando as três funções de onda de 6.32, observa-se que a solução no interior do quadrado é pequena quando a parte de  $\psi(\vec{r})$  transmitida pela guia de onda de entrada possui um ponto de mínimo localizado próximo a seu ponto de acoplamento em  $Q$ . Isto desfavorece a formação de amplitude alta em  $Q$  pois, para esta energia ( $6 \times 10$ ), o autoestado do bilhar

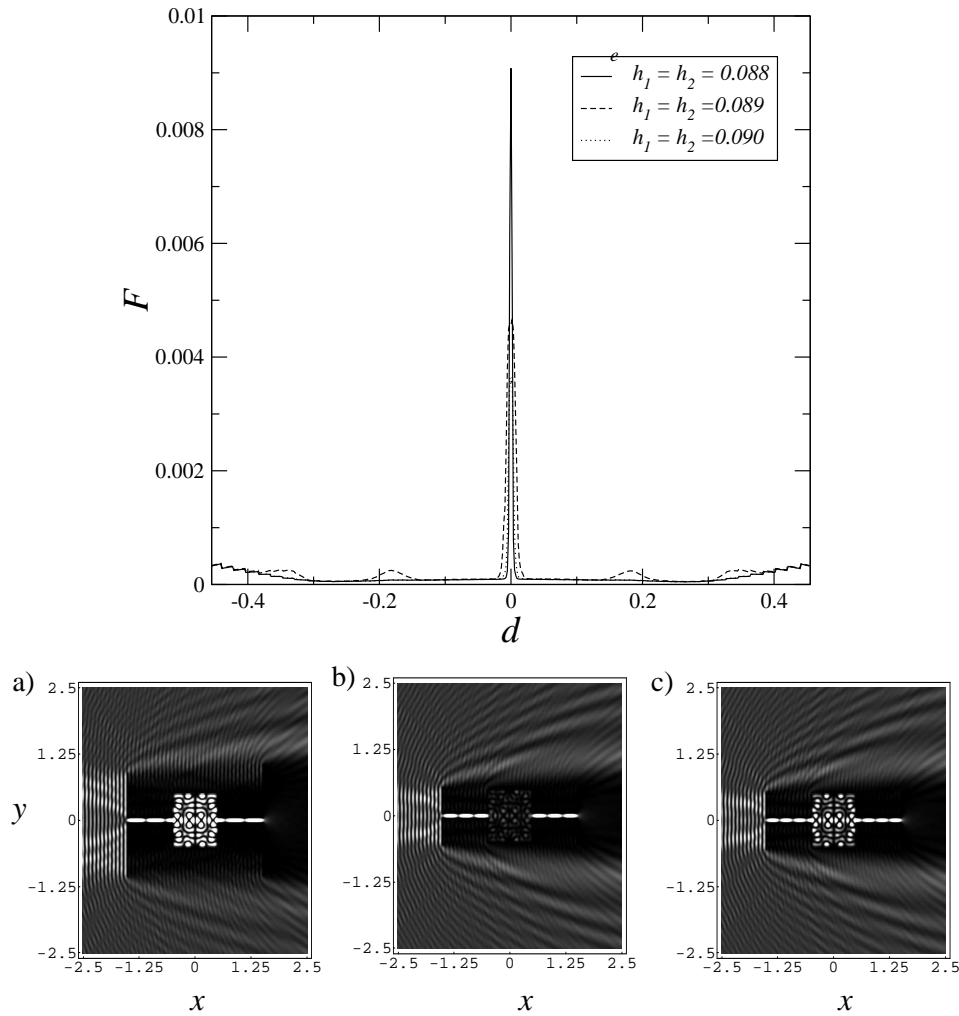


Figura 6.32: Variação do Fluxo  $F$  com a posição de acoplamento  $d$  da guia de onda de saída para número de onda da onda incidente  $k_{6,10} = 36,637$ . Três valores de largura são utilizados,  $h_1 = h_2 = 0,088$  (linha contínua),  $h_1 = h_2 = 0,089$  (linha tracejada) e  $h_1 = h_2 = 0,090$  (linha pontilhada). Em a)-c), são mostrados os gráficos de densidade da função de onda  $|\psi(\vec{r})|^2$  para as três curvas em  $d = 0,0$ .

quadrado não possui  $\psi$  intenso próximo à entrada da guia. Nos outros dois casos a função de onda transmitida possui o último máximo da guia de entrada penetrando em  $Q$ , logo, é mais fácil para esta configuração excitar um autoestado do bilhar correspondente a esta energia. Ainda em 6.32.a)-c) observa-se o fenômeno de “canalização” *channeling* de  $\psi$ , onde, a seqüência de modos da função de onda em  $y = 0,0$  forma um “canal” unindo as duas guias e facilitando o transporte entre as mesmas (SADREEV, 2004).

Passando para  $k = 36,704$ , valor intermediário entre  $k_{6,10}$  e  $k_{4,11}$ , a situação muda drasticamente, como pode ser visto na figura 6.33. Em contraste ao caso anterior, vários picos pronunciados aparecem em  $F \times d$ , indicando a existência de várias posições  $d$  que favorecem a transmissão. Para as larguras  $h_1 = h_2 = 0,088$  e  $h_1 = h_2 = 0,090$ , a posição  $d = 0$  gera trans-

missão considerável, porém, não é a melhor escolha, visto que em qualquer dos outros picos  $F$  é maior.

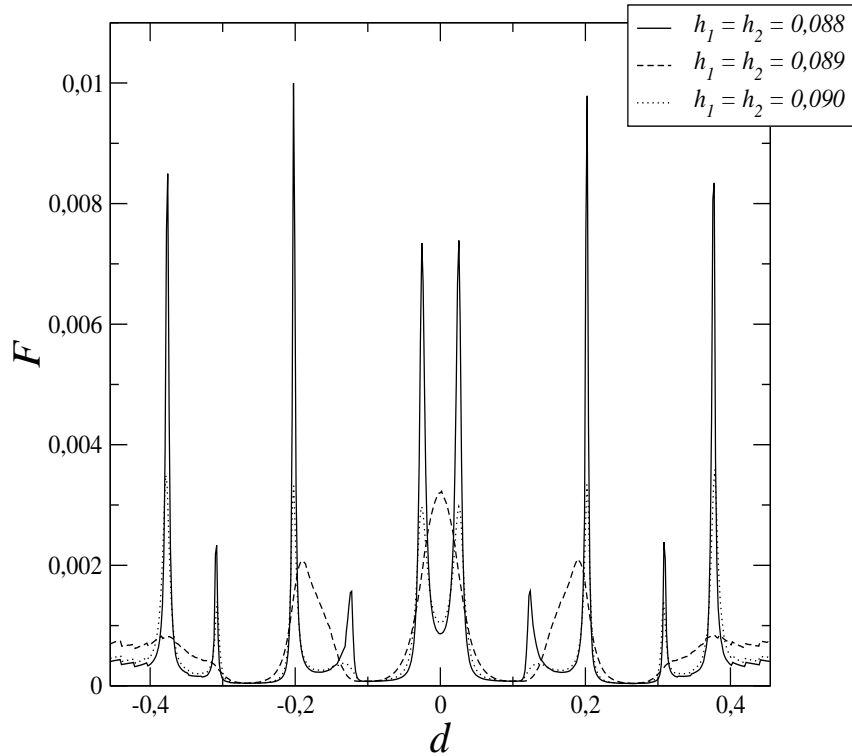


Figura 6.33: Variação do Fluxo  $F$  com a posição de acoplamento  $d$  da guia de onda de saída para número de onda da onda incidente  $k = 36,704$ . Três valores de largura são utilizados,  $h_1 = h_2 = 0,088$  (linha contínua),  $h_1 = h_2 = 0,089$  (linha tracejada) e  $h_1 = h_2 = 0,090$  (linha pontilhada).

Os picos da curva contínua em 6.33 podem ser divididos em duas seqüências relacionadas aos autoestados do quadrado com números de onda anterior e posterior a  $k = 36,704$ :

- a primeira é formada pelo segundo e quarto picos (os de menor amplitude), localizados em  $d = \frac{4}{3}\lambda$  e  $d = \frac{4}{7}\lambda$ , que podem ser encontrados pela forma geral

$$d = \frac{(n-m)}{l(n-m)-1}\lambda, \quad (6.3)$$

com  $m = 6$  e  $n = 10$ .

- a segunda é formada pelo terceiro e quinto picos (os de maior amplitude) que localizam-se em  $d = \frac{7}{8}\lambda$  e  $d = \frac{7}{15}\lambda$ , respectivamente, e possuem forma geral

$$d = \frac{(n-m)}{l(n-m)+1}\lambda, \quad (6.4)$$

com  $m = 4$  e  $n = 11$ .

As fórmulas (6.3) e (6.4) foram construídas a partir da observação da posição  $d$  dos picos em comparação com o valor de  $\lambda$ .

Então, a primeira seqüência é relacionada com a ressonância  $6 \times 10$ , a segunda com  $4 \times 11$ . Em ambas as fórmulas  $l$  é um inteiro positivo maior que zero. Esta análise mostra dois resultados importantes. Primeiramente, como  $d$  depende de  $m$  e  $n$ , pode-se constatar que as duas degenerescências ( $m \times n$  e  $n \times m$ ) do autoestado do quadrado estão participando da transmissão. Segundo, variando  $d$  pode-se ajustar o bilhar para a transmissão ser “mediada” pelo autoestado de energia anterior ou posterior à energia da onda incidente (correspondente a uma autoenergia do bilhar).

A figura 6.34 mostra os gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para alguns pontos da curva de  $h_1 = h_2 = 0,088$ : b) é referente ao primeiro pico localizado em  $d \approx \frac{\lambda}{7}$ , que está relacionado à ressonância ímpar; c) é referente a um ponto de mínimo; d) e f) possuem os valores correspondentes aos dois picos da primeira seqüência; e e) ao primeiro pico da segunda. Pela forma da função de onda no interior de  $Q$  pode-se mais uma vez perceber a influência distinta dos autoestados anterior ( $k_{6,10} = 36,637$ ) e posterior ( $k_{4,11} = 36,771$ ) na transmissão gerada pelas diferentes seqüências de picos. Na primeira, que possui  $n$  par, a função de onda  $|\psi(\vec{r})|^2 = 0,0$  sobre a linha  $y = 0,0$ , ao contrário da segunda, que possui  $n$  ímpar.

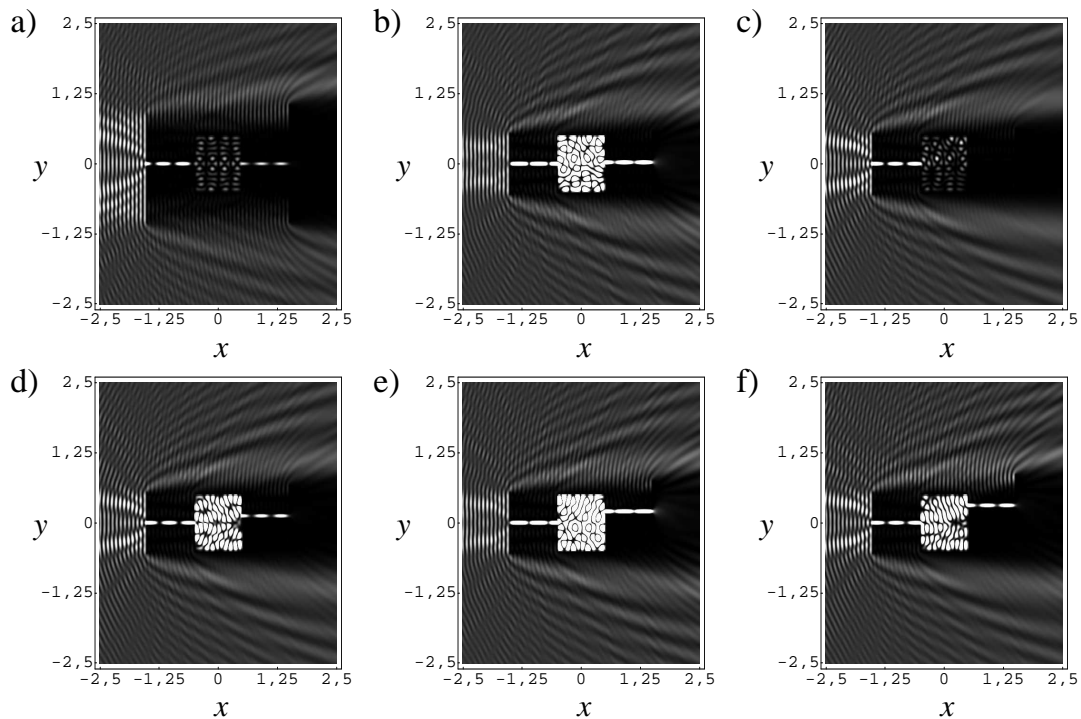


Figura 6.34: Gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  com  $k = 36,704$  para  $h_1 = h_2 = 0,088$  e a)  $d = 0,0$ , b)  $d = 0,025$ , c)  $d = 0,073$ , d)  $d = 0,122$ , e)  $d = 0,202$  e f)  $d = 308$ , relativos à figura 6.33.

A curva para  $h_1 = h_2 = 0,089$  de 6.33 mostra um comportamento semelhante à figura 6.32, com um pico mais alargado em  $d = 0$  e um pico secundário em  $d = \frac{7}{8}\lambda$ . Porém as amplitudes são diferentes. Na figura 6.35 é feito o gráfico da função de onda para os dois picos e para um valor de mínimo de  $F$  entre eles.

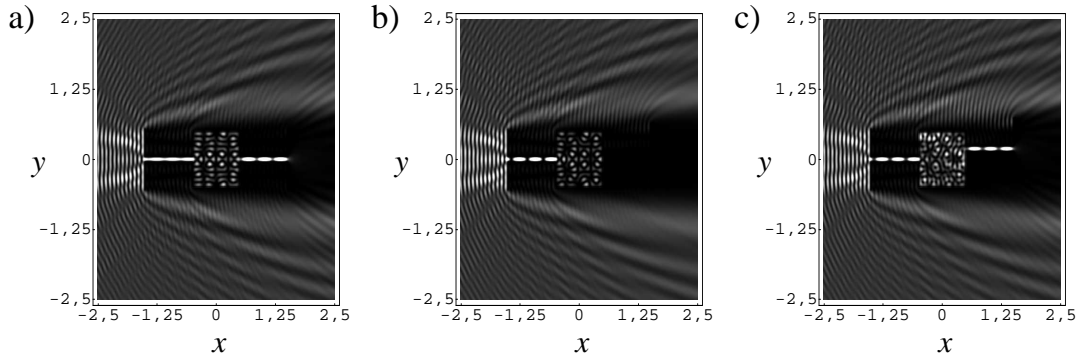


Figura 6.35: Gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  com  $k = 36,704$  para  $h_1 = h_2 = 0,089$  e a)  $d = 0,0$ , b)  $d = 0,1$  e c)  $d = 0,187$ , relativos à figura 6.33.

Ainda em 6.33 o caso de  $h_1 = h_2 = 0,090$  mostra comportamento semelhante ao de  $h_1 = h_2 = 0,088$ , a não ser pelos picos apresentarem menor amplitude. As funções de onda referentes aos picos, mostradas em 6.36, também apresentam aparência semelhante aos  $\psi$ 's vistos em 6.34, com a diferença de que em 6.36 observamos mais picos ao longo da guia de onda.

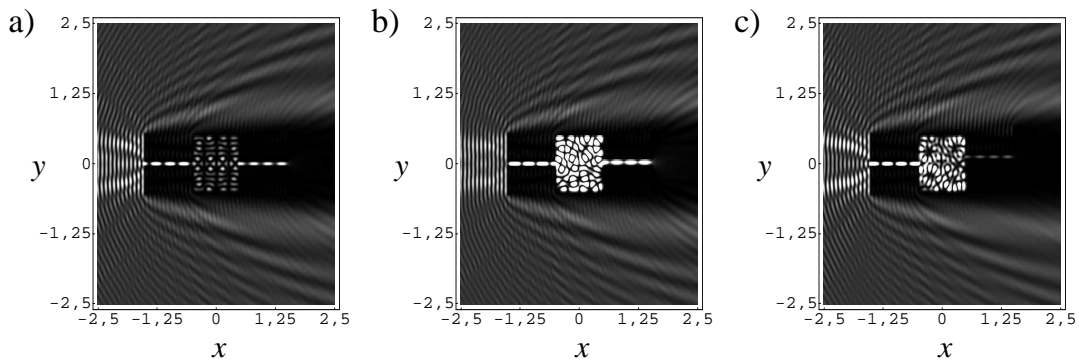


Figura 6.36: gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  com  $k = 36,704$  para  $h_1 = h_2 = 0,090$  e a)  $d = 0,0$ , b)  $d = 0,025$  e c)  $d = 0,202$ , relativos à figura 6.33.

A última energia considerada para a onda incidente com  $k = 36,771$ , coincidente com o autoestado  $4 \times 11$  do bilhar quadrado. Na figura 6.37 são mostradas as curvas de  $F \times d$  para os mesmos três valores de largura das guias que nos casos anteriores. Como no caso  $k_{6,10}$  (figura 6.32) as curvas possuem formas parecidas, apenas apresentando pequenos deslocamentos da posição  $d$  dos picos, cujas posições podem ser entendidas a partir de uma análise direta do

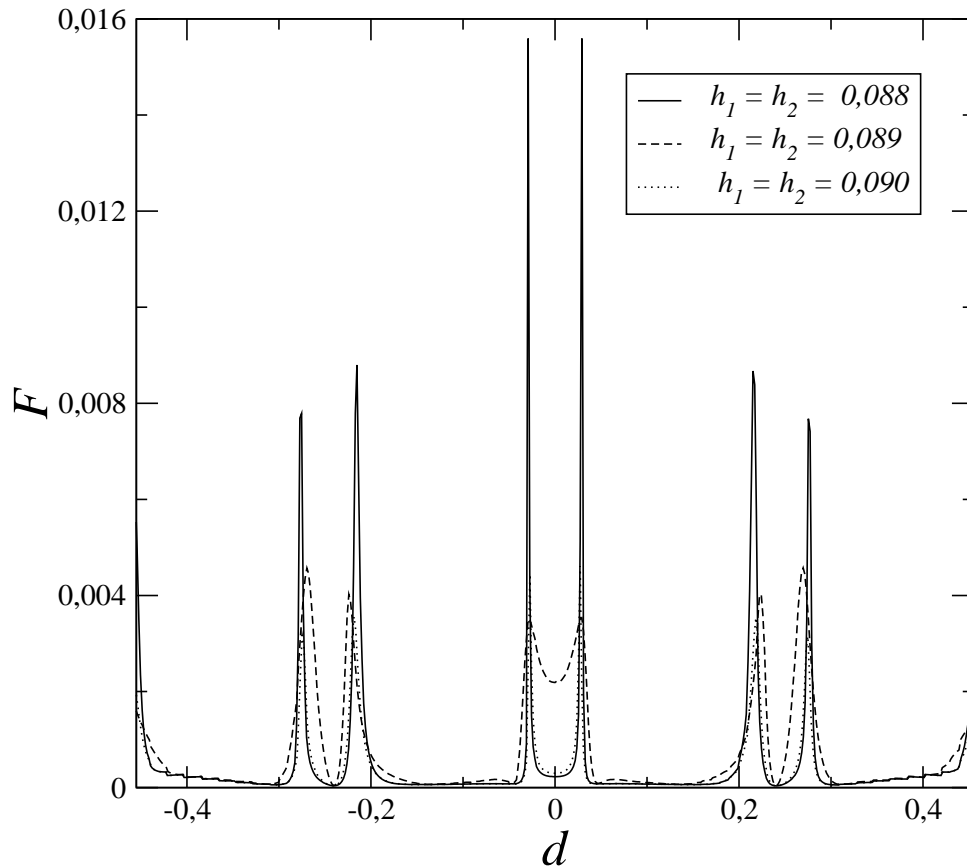


Figura 6.37: Variação do Fluxo  $F$  com a posição de acoplamento  $d$  da guia de onda de saída para número de onda da onda incidente  $k = 36,771$ . Três valores de largura são utilizados,  $h_1 = h_2 = 0,088$  (linha contínua),  $h_1 = h_2 = 0,089$  (linha tracejada) e  $h_1 = h_2 = 0,090$  (linha pontilhada).

gráfico de densidade da função de onda  $|\psi(\vec{r})|^2$ . Similar a outros casos já observados, novamente temos que, para  $h_1 = h_2 = 0,089$  e  $d = 0,0$  (figura 6.38.a)), a transmissão neste bilhar é ressonante para a energia incidente igual a do autoestado  $4 \times 11$ . Porém, em 6.38.b) pode-se observar que uma pequena variação na posição de acoplamento  $d$  faz com que seja excitada a segunda degenerescência do autoestado ( $11 \times 4$ ), modificando drasticamente a forma de  $\psi$  na região da guia de onda de saída (compare tal região em 6.38.a) e 6.38.b)). Efeito semelhante é visto em 6.38.d) e 6.38.f). As posições do segundo e terceiro picos em 6.37 são obtidas pela fórmula  $d = \frac{ld}{n} \mp d_1$ , construída pela observação do gráfico, onde  $d_1$  é a posição do primeiro pico.

Da forma da função de onda para os dois últimos picos de  $h = 0,089$ , figuras 6.38.d) e e), pode-se observar que as duas degenerescências participam da transmissão, interferindo e formando um novo estado em  $Q$ .

Ainda de 6.37, percebe-se que a condição de transmissão ressonante não é a de melhor

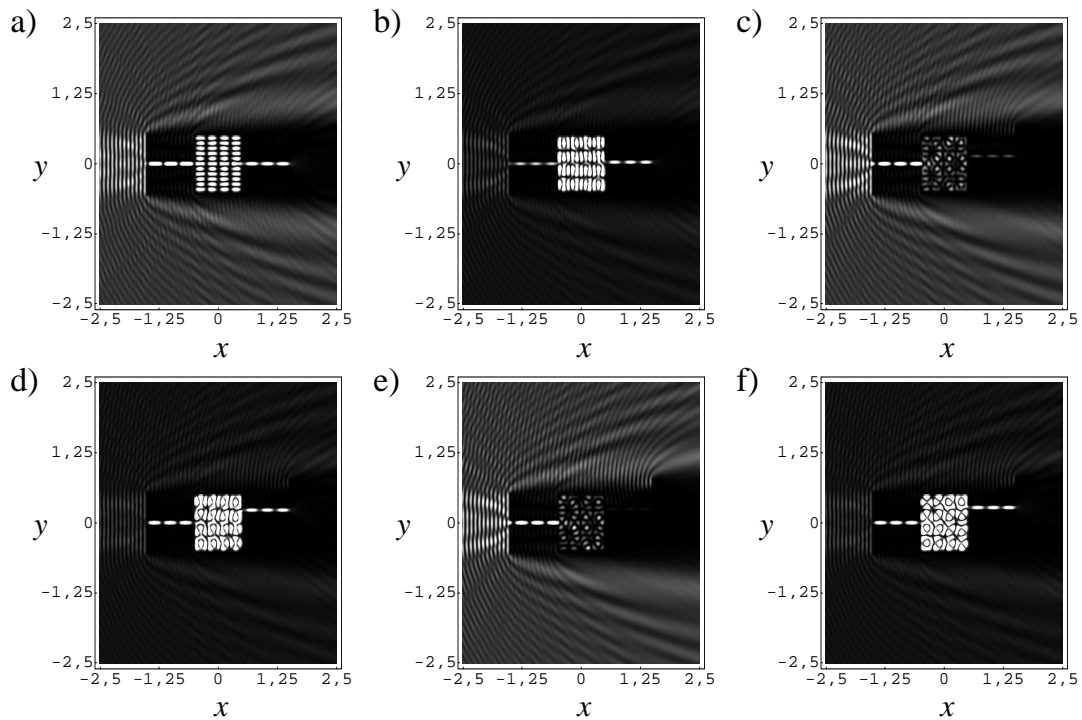


Figura 6.38: Gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para  $h_1 = h_2 = 0,089$  e a)  $d = 0,0$ , b)  $d = 0,0275$ , c)  $d = 0,135$ , d)  $d = 0,224$ , e)  $d = 0,240$  e f)  $d = 0,269$ , relativos à 6.37.

resultados nas simulações, pois, a amplitude em  $F(d = 0)$  é menor do que em qualquer dos picos.

A figura 6.39 mostra os gráficos de densidade para  $|\psi(\vec{r})|^2$  referentes à curva de  $h_1 = h_2 = 0,088$ . Observa-se uma inversão no comportamento da função de onda em  $Q$  entre o primeiro e terceiro pico, se comparado ao caso anterior. Aqui o primeiro (figura 6.39.b)) excita um estado onde participam as duas degenerescências e o último (figura 6.39.f)) excita apenas a simetria  $11 \times 4$ .

O comportamento da função de onda no caso da curva  $h_1 = h_2 = 0,090$  é semelhante ao do caso em que  $h_1 = h_2 = 0,088$ , por isso, não é mostrada aqui.



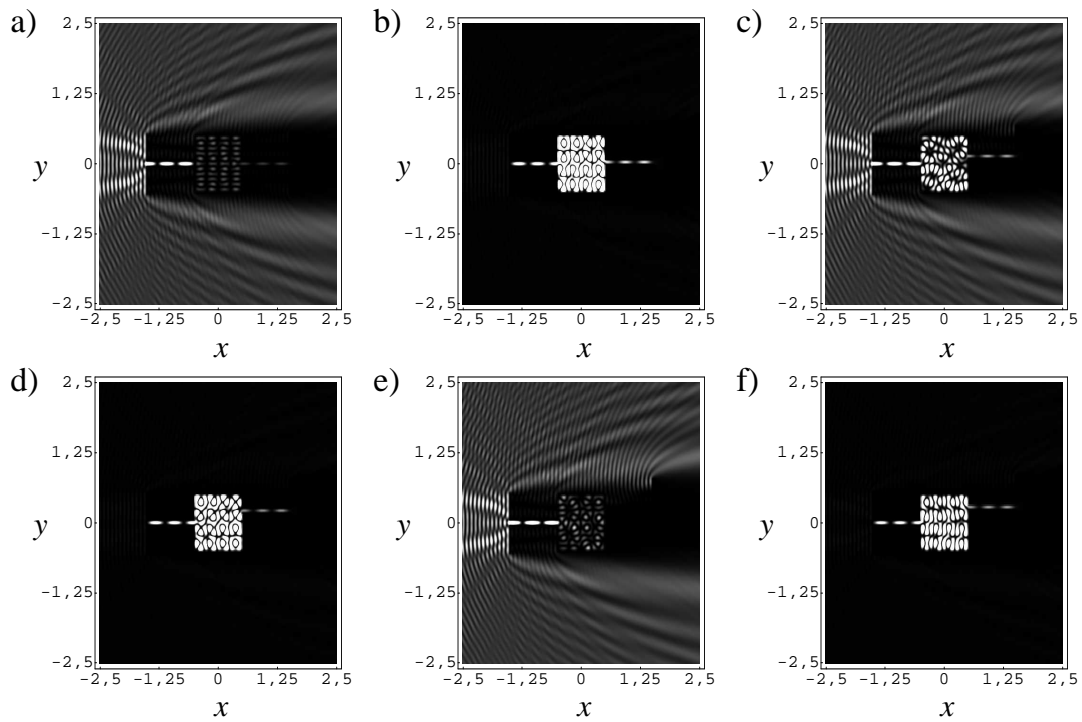


Figura 6.39: Gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para  $h_1 = h_2 = 0,088$  e a)  $d = 0,0$ , b)  $d = 0,029$ , c)  $d = 0,135$ , d)  $d = 0,215$ , e)  $d = 0,240$  e f)  $d = 276$ , relativos à 6.37.

### 6.3.4 Variação da energia da onda incidente para geometrias fixas

Nas simulações apresentadas nas seções anteriores foram sempre utilizadas energias fixas para a onda incidente. Da análise do comportamento da transmissão, percebe-se a grande dependência dos resultados com a relação entre a energia da onda incidente e geometria do sistema.

Nesta seção, o mesmo problema será observado por uma abordagem inversa. Para isso, será fixada uma certa geometria para o bilhar e obtido o comportamento de  $F$  à medida que a energia da onda incidente é mudada.

Na figura 6.40 é mostrado o gráfico de  $F \times k$  para o bilhar com as guias de onda acopladas em  $y = 0$  e largura  $h_1 = h_2 = 0,089$ . Comparando os picos de  $F$  com o espectro do quadrado neste intervalo (linhas pontilhadas verticais), percebe-se que a transmissão ressonante não é a condição mais favorável à transmissão para esta geometria, com a maior parte das ressonâncias aproximando-se mais dos pontos de mínimo do que dos pontos de máximo.

Para as duas energias degeneradas  $k_{3,11} = k_{7,9} = 35,837$  e  $k_{1,12} = k_{9,8} = 37,849$ ,  $F \times k$  apresenta “descontinuidades” similares àquelas que são encontradas para as ressonâncias nos gráficos de  $|T(i, j)| \times k$  (ZANETTI, 2004). Observando em 6.40.b) e e) a forma de  $|\psi(\vec{r})|^2$

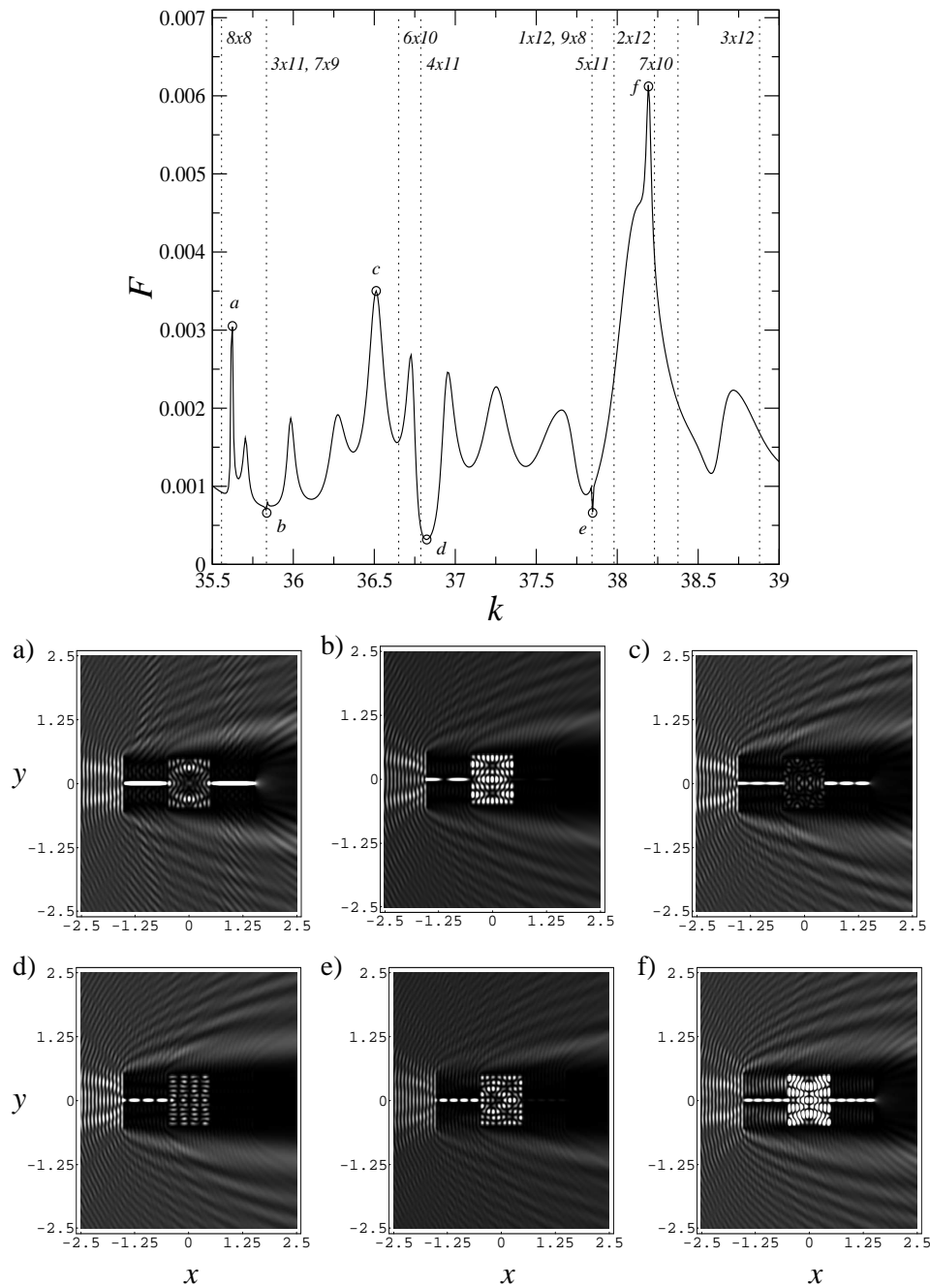


Figura 6.40: À esquerda, variação do Fluxo  $F$  com o número de onda  $k$  para um bilhar com larguras  $h_1 = h_2 = 0,089$  das guias de entrada e saída. As linhas pontilhadas marcam posições das ressonâncias do quadrado contidas neste intervalo de energia. À direita, gráficos de densidade da função de onda  $|\psi(\vec{r})|$  para os valores de  $k$  marcados com círculos  $\circ$  na curva de  $F \times k$ . Em a)  $k = 35,626$ , b)  $k = 35,837$ , c)  $k = 36,513$ , d)  $k = 36,821$ , e)  $k = 37,849$  e f)  $k = 38,193$ .

para estes valores de  $k$ , percebe-se que eles geram funções de onda que ficam aprisionadas no interior do bilhar quadrado (*bound states in the continuum*). Estes dois casos de aprisionamento da função de onda ocorrem em estados degenerados de energia, que possuem a mesma paridade no eixo- $y$  de transmissão ( $3 \times 11$  e  $7 \times 9$  para a primeira e  $1 \times 12$  e  $9 \times 8$  para a segunda), o que

está de acordo com resultados já conhecidos da literatura (SADREEV et al., 2006).

Ainda em 6.40 são mostrados gráficos de densidade de  $|\psi(\vec{r})|^2$  para alguns valores de  $k$  correspondentes a máximos e mínimos locais de  $F$ . É interessante notar as formas distintas das funções de onda nos diferentes exemplos de transmissão. Em a),  $|\psi(\vec{r})|^2$  é pequeno na linha  $y = 0,0$ , com os modos acomodando-se em uma forma aproximadamente “elíptica”. Em f),  $|\psi(\vec{r})|^2$  possui grande amplitude e uma seqüência de modos organizados na linha que une as guias, indicando a presença do fenômeno de canalização.

Na figura 6.41 é mostrado o detalhe do gráfico 6.40 na região dos números de onda utilizados no decorrer desta seção, os quais são marcados na curva pelos círculos  $\circ$ . Percebe-se que a ressonância  $k_{6,10}$  recai sobre um mínimo local de  $F$  e existe um máximo local entre as duas ressonâncias, onde os dois autoestados participam da transmissão. O valor de  $k = 36,704$ , estudado anteriormente, encontra-se próximo a este máximo local da figura 6.41.

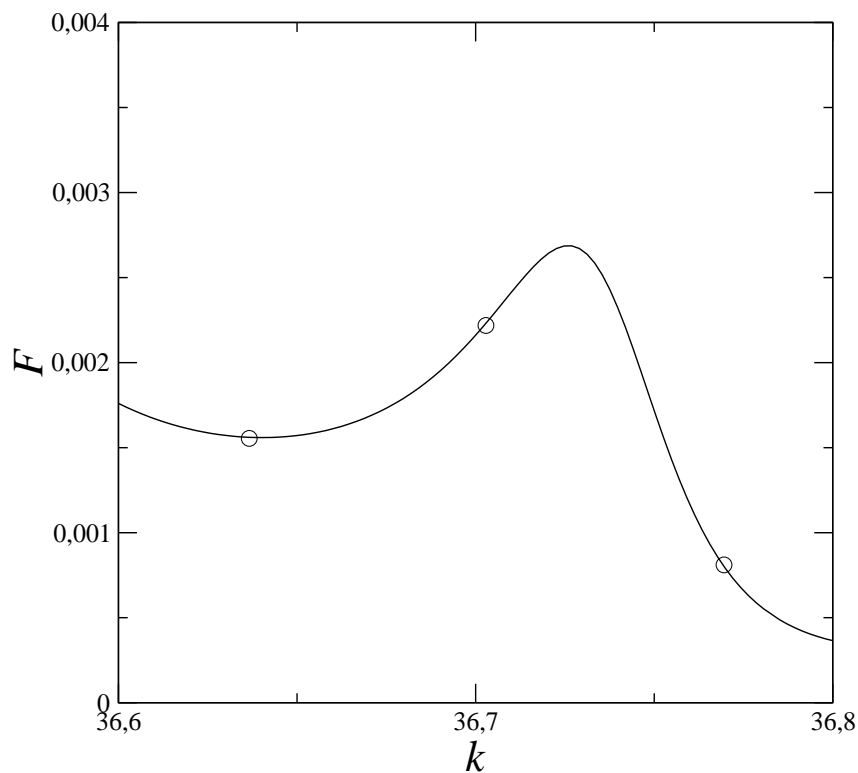


Figura 6.41: Detalhe da figura 6.40. Os círculos  $\circ$  marcam as posições das energias utilizadas nas simulações das seções anteriores.

## 6.4 Conclusões parciais

O MCP foi utilizado na solução numérica de três tipos de estruturas compostas. Foram estudados os bilhares fechados formados pelo acoplamento de dois quadrados, um quadrado e um quarto de disco, e ainda o sistema aberto formado por um quadrado ligado ao meio externo por intermédio de duas guias de onda.

Foram verificados resultados já conhecidos da literatura, tais como: a transmissão ressonante (MEKIS et al., 1996; SADREEV, 2004), o aprisionamento da função de onda num bilhar aberto (SADREEV et al., 2006) e a fenômeno de “canalização” (*channeling*) (MEKIS et al., 1996).

De modo geral, pode-se concluir com base nos resultados obtidos para os três bilhares, que:

- a variação da largura da guia de onda de acoplamento age no sentido de selecionar os autoestados que participam da formação da função de onda dos sistemas acoplados. Isto é comumente observado na transmissão através de bilhares abertos (AKIS et al., 2002; SADREEV, 2004; SADREEV et al., 2005), porém, até onde sabemos esta é a primeira vez que este fenômeno é observado em bilhares fechados;
- foi obtido através da análise dos elementos da matriz  $T$  um método simples e eficiente de acompanhar as mudanças nos autoestados e autoenergias de bilhares fechados quando sua geometria varia;
- permite uma análise visual dos problemas, o que não ocorre quando se usam outros métodos, apresentando informações, tais como a exata forma como a função de onda se redistribui espacialmente na sua interação com as guias de onda, tanto no caso dos dois sistemas fechados, quando no aberto;
- foi analisada a dependência da transmissão em um bilhar aberto com função da posição de acoplamento da guia de onda. Além disso, foi visto como esta variação influencia no processo de formação da função de onda mediadora da transmissão.

Ainda é importante salientar que a intenção deste capítulo não foi fazer um estudo exaustivo de cada um dos problemas abordados, mas sim mostrar a gama de possibilidades que o MCP pode fornecer na análise de cada um deles. Neste espírito, foram apresentadas algumas das aplicações mais interessantes dentro de cada tema.

## 7 Conclusão

Neste trabalho, o método de contorno de paredes foi utilizado na solução de vários problemas de condição de contorno que admitem ser resolvidos por técnicas de espalhamento quântico bidimensional, com a finalidade geral de demonstrar seu grande potencial e flexibilidade no que tange suas possíveis formas de aplicação.

Inicialmente, o método foi desenvolvido para o tratamento de espalhamento de elétrons por barreiras de formato e condições de contorno gerais, porém, pela generalidade de sua formulação, pode ser utilizado de forma muito mais abrangente. Além dos problemas mais tradicionalmente tratados por este tipo método, como sistemas de bilhares, o MCP foi aplicado na investigação de estruturas conhecidas da fotônica.

No decurso de uma formulação teórica detalhada, foi visto que umas das maiores vantagens do MCP é que através de uma única equação o problema de espalhamento é resolvido para todo o espaço. Isto torna-se especialmente interessante no caso do espalhador ser formado por curvas fechadas, onde a solução por outros métodos tem de ser obtida através de mais de um cálculo.

A partir de aplicação matriz  $T$  na solução de curvas fechadas foram analisados em detalhe vários de seus aspectos matemáticos, como por exemplo, o mecanismo de filtro, que nos leva aos resultados corretos das soluções interna e externa. No caso da solução externa foi mostrado como obter a matriz  $S$  usual, a partir de  $T$ , o que pode ser de grande auxílio em problemas mais complexos. Foi investigado também de uma forma mais simples e intuitiva do que geralmente encontrado na literatura, o importante problema da dualidade dentro-fora para bilhares. A matriz  $T$  ainda foi resolvida analiticamente para o caso de um espalhador circular que, apesar de simples, nos forneceu importantes informações a respeito da relação de  $T$  com a construção dos autoestados dos bilhares e, como ela pode ser um instrumento útil na determinação dos espectros destas estruturas. Estes resultados foram recentemente aceitos para publicação na revista *Annals of Physics* (ZANETTI et al., fevereiro/2007).

A versão numérica do MCP, obtida de forma simples e que mostra grande eficiência, foi

aplicada a quatro problemas que mostram seu potencial e versatilidade. Como no final de cada capítulo foi feita uma conclusão parcial, serão apresentados aqui apenas alguns comentários mais gerais sobre os pontos mais importantes observados em cada diferente abordagem.

### **Cristais fotônicos**

Foram obtidos com êxito os autoestados da transmissão ressonante em redes que possuem guias de onda conhecidas e ainda proposta e analisada um novo tipo de guia que tem a ação de um interferômetro. Em redes possuindo cavidades foram obtidos os modos ressonantes da estrutura. Foram estudadas redes formadas por espalhadores rígidos e permeáveis, sendo que para o segundo caso, mais comumente abordado, foi obtida boa concordância entre resultados obtidos com aqueles encontrados na literatura. Este trabalho foi submetido para publicação na revista *Journal of Physics B* (ZANETTI et al., 2007).

### **Otimização de cavidades de dispositivo coletor de fótons**

Em conjunto com os grupos DINE e LabNANO, ambos também pertencentes ao Departamento de Física da UFPR, foi estudado um dispositivo fotodetector que, através da inserção de um tipo de máscara de alumínio fino furado sobre a fotoativa, tem a ação de aprisionar parte dos fótons incidentes, aumentando assim sua absorção. Através do modelamento teórico e simulações da cavidade do dispositivo foram obtidos parâmetros otimizados para sua geometria, que se confirmaram como a melhor escolha quando utilizados na sua fabricação. Estes resultados foram submetidos para publicação na revista *Journal of Applied Physics* (GERNISKI et al., 2007).

### **Espalhador quântico aberto formado por três discos**

No problema de espalhamento pelo bilhar quântico aberto formado por três discos rígidos foram obtidos os quase-estados de longa vida do sistema pela observação direta dos autoestados ou através da análise da integral da parte espalhada de  $\psi$ , método que assemelha-se e reproduz qualitativamente resultados advindos de teorias estabelecidas como a da seção de choque (GASPARD; RICE, 1989a). Através da análise da matriz  $T$  pode-se obter informações sobre a formação do estado quase-ressonante.

Foi abordado em seguida o sistema formado por discos permeáveis, problema dificilmente encontrado na literatura, e que através do MCP é tratado de forma natural. Neste caso, foi analisado o comportamento dos estados quase-ressonantes do bilhar quando a permeabi-

lidade dos espalhadores é variada de diferentes formas, onde observou-se o um fenômeno de “migração” do valor dos  $k$ 's quase-ressonantes a medida que a permeabilidade aumenta. Estes resultados foram ainda comparados com aqueles obtidos devido à variação do raio do espalhadores, onde certa relação qualitativa pôde ser inferida.

### **Bilhares acoplados por uma guia de onda**

Foram estudados três casos de acoplamento de bilhares, onde o enfoque se deu sobre o comportamento das soluções como função da variação dos parâmetros associados à guia de onda de ligação. Nos dois primeiros casos, onde foram tratados bilhares fechados (dois quadrados acoplados e um quadrado acoplado a um quarto de disco), foi observado como a variação da largura da guia tem a ação de selecionar as simetrias que irão formar a função de onda acoplada, ou desacoplada, do sistema. Através da análise da matriz  $T$  quando a energia e os parâmetros da guia variam, foi obtida uma forma de acompanhar a mudança tanto dos autoestados dos bilhares originais, quanto das soluções da estrutura acoplada.

Por último foi estudado um bilhar aberto com guias de onda que o acoplam ao meio contínuo. Neste caso, foi analisada a transmissão através da estrutura como função da largura e posição de acoplamento, das guias de entrada e saída. Foram observados fenômenos conhecidos da literatura como a transmissão ressonante, o efeito de canalização (*channeling*) e estados aprisionados no contínuo (*bound states in the continuum*), os quais puderam ser observados em uma análise direta da integral da função de onda espalhada.

Como pode ser visto pelo breve panorama do trabalho que foi traçado acima, cada um dos problemas analisados pôde ser abordado por um enfoque próprio, voltado para a obtenção de resultados específicos dentro de cada tema. Este fato, aliado à variedade e qualidade dos resultados, mostra uma grande característica do MCP, a sua versatilidade, característica esta que permite sua aplicação abranger desde a obtenção de resultados analíticos rigorosos acerca de problemas complexos através de uma visão mais física (como os referentes à dualidade dentro-fora), até o auxílio na modelagem e aplicações experimentais (como no caso do fotodetector).

## **7.1 Trabalhos futuros**

### **7.1.1 Bilhares isoespectrais**

A solução interna para curvas fechadas no  $\mathbb{R}^2$  é obtida através da resolução equação de Helmholtz,  $(\nabla^2 + E)\psi(\vec{r}) = 0$  submetida a condições de contorno de Dirichlet, ou seja, uma

partícula fechada dentro de uma barreira intransponível, problema este que se assemelha ao de uma membrana vibrante com as bordas presas.

É sabido que nesse tipo de problema a solução para as autoenergias tem grande dependência na forma da barreira (SRIDHAR; KUDROLLI, 1994). Neste contexto M. Kac fez a seguinte pergunta em 1966: *Podemos ouvir a forma de um tambor?* (KAC, 1966). Pode-se interpretar tal pergunta como: podemos distinguir a forma de uma membrana a partir do espectro sonoro que ela emite, ou, na analogia dos bilhares, dois bilhares podem ser distinguidos pelo seu espectro de energia?

Na década de 90 foi provado que, no caso de bilhares, a pergunta de Kac tem resposta negativa. A primeira prova veio analiticamente (GORDON et al., 1992) em 1992 pela construção de um contra-exemplo. A partir daí várias provas experimentais (STÖCKMANN; STEIN, 1990; DHAR et al., 2003) e numéricas (WU et al., 1995; DRISCOLL, 1997; DRISCOLL; GOTTLIEB, 2003) têm sido efetuadas para vários pares de bilhares. Destes estudos surgiram as classes de *bilhares isoespectrais*, ou seja, sistemas planares fechados de formas diferentes, mas que possuem espectros de energia idênticos.

Para bilhares quânticos, a densidade de níveis de energia depende diretamente da área, perímetro e outras características geométricas da barreira (OTT, 1993; STÖCKMANN, 1999). Como visto na equação (2.19) a matriz  $T$  depende apenas da função de Green da partícula livre sobre a barreira espalhadora, isto é, depende da energia da onda incidente e da geometria do espalhador. Uma análise mais detalhada do comportamento da matriz  $T$  na solução de um par de bilhares isoespectrais, pode trazer informações interessantes a respeito da forma como ocorre a isoespectralidade no sistema.

Nas referências (DHAR et al., 2003) e (WU et al., 1995) são obtidas transformações analíticas que conectam as soluções dos dois bilhares. Um trabalho interessante que pode ser desenvolvido é verificar a ação destas transformações sobre a matriz  $T$ .

### 7.1.2 Cristais fotônicos com desordem estrutural

Cristais fotônicos bidimensionais formados por arranjos de cilindros como os discutidos no capítulo 3, são de relativamente fácil produção. São várias as técnicas de fabricação pelas quais podem ser obtidos, mesmo para escalas submicrométricas (KWAN et al., 2003). Porém, mesmo com a facilidade de produção certas imperfeições provenientes da fabricação são inevitáveis (HUGHES et al., 2005). Para estruturas como as das figuras (3.1) e (3.4) os tipos de imperfeições mais comuns são desvios na posição e/ou no valor do raio do cilindros



(FREI; JOHNSON, 2004). Esse tipo de desordem, dependendo de sua magnitude, pode diminuir consideravelmente a banda de energia proibida do dispositivo (JOANNOPOULOS et al., 1997b) e ainda em guias de onda pode causar atenuação do campo no seu interior, devido a espalhamento na direção contrária a propagação da onda (*back scattering*), que causam interferência destrutiva.

A maioria dos estudos anteriores sobre desordem em cristais fotônicos tem como objetivo avaliar as mudanças no *gap* de energia em uma estrutura infinita submetida a ondas incidindo de todas as direções (FREI; JOHNSON, 2004), porém, uma abordagem mais realista do ponto de vista experimental seria observar a intensidade do campo interno à guia de onda devido a uma onda incidente possuindo vetor de onda  $\vec{k}$  e frequência  $\omega$  fixos, em cristal fotônico de estrutura finita.

Pelas facilidade de variação da forma e condições de contorno do espalhador no MCP, podem ser exploradas várias maneiras de inserir a desordem espacial e na constante dielétrica das estruturas utilizando, por exemplo, diferentes geradores de variáveis randômicas (distribuição gaussiana, distribuição exponencial, etc. (PRESS et al., 1992)) na procura de maior adequação com os tipos de desvios encontrados na realidade da fabricação dos cristais fotônicos.

### 7.1.3 Localização em redes desordenadas

No fim da década de 50, P.W. Anderson (ANDERSON, 1958) estabeleceu teoricamente que o comportamento de uma onda eletrônica em um meio desordenado é completamente distinto daquele apresentado no ordenado. Nestes meios, os modos de Bloch perdem coerência ao serem espalhados pelas imperfeições. Após uma determinada distância, a perda de coerência causa o aparecimento de interferências destrutivas na onda, provocando ausência de difusão. As funções de onda eletrônicas, que antes se estendiam por toda a estrutura, agora desenvolvem um envelope exponencial que caracteriza a natureza intrinsecamente localizada destes estados. Este fenômeno é conhecido como *localização de Anderson* (CUSACK, 1990). Para uma determinada rede com uma “quantidade” fixa de desordem, os autoestados podem ter uma natureza propagante ou localizada dependendo de sua energia. A região do espectro onde ocorre esta transição metal/isolante é conhecida como *mobility edge*, e pode variar muito dependendo do tipo de imperfeição que a rede apresenta (LEE; RAMAKRISHNAN, 1985).

Tendo como base que o fenômeno da localização é fundamentalmente gerado pelo espalhamento da onda propagante pelos defeitos de uma rede, é extremamente natural que ele possa ser investigado através de técnicas de espalhamento. Visto a facilidade de variação tanto da forma das redes, quando das condições de contorno, tal problema pode ser modelado natu-

almente pelo MCP, fato corroborado por sua aplicação no estudo redes de cristais fotônicos.

## Referências Bibliográficas

- AKIS, R. et al. Eigenstate selection in open quantum dot systems: using the landauer formalist as a spectroscopic probe. *Microeletronic Engineering*, v. 63, p. 241, 2002.
- ALT, H. et al. Coupled microwave billiards as a model for symmetry breaking. *Phys. Rev. Lett.*, v. 81, p. 4847, 1998.
- AMINI, S.; KIRKUP, S. M. Solution of helmholtz equation in the exterior domain by elementary boundary integral methods. *J. Comput. Phys.*, v. 118, p. 208, 1995.
- ANDERSON, P. W. Absence of diffusion in certain random lattices. *Phys. Rev.*, v. 109, p. 1492, 1958.
- ARFKEN, G. *Mathematical Methods for Physicists*. [S.l.]: Academic, 1970.
- ARRIAGA, J. et al. Modeling the propagation of light in photonic crystal fibers. *Physica D*, v. 189, p. 100, 2004.
- ASHCROFT, N. W.; MERMIN, N. D. *Fundamentals of Solid State Physics*. [S.l.]: HRW international editions, 1981.
- BARRAS, F.; GASPARD, P. Scattering in periodic systems: from resonances to band structure. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 32, p. 3357, 1999.
- BERGMANN, G. Conductance of a perfect thin film with diffuse surface scattering. *Phys. Rev. Lett.*, v. 94, p. 106801, 2005.
- BERRY, M. V. Quantizing a classically ergodic system: Sinai's billiard and the kkr method. *Ann. Phys.*, v. 131, p. 163, 1981.
- BERRY, M. V. Evanescent and real waves in quantum billiards and gaussian beams. *J. Phys. A*, v. 27, n. 11, p. L391, 1994.
- BERRY, M. V. Statistics of nodal lines and points in chaotic quantum billiards: perimeter corrections, fluctuations, curvature. *J. Phys. A*, v. 3025, p. 35, 2002.
- BORN, M. Zur quantenmechanik der stossvorgänge. *Zeitschrift fur Physik. (Traduzido para o Inglês por J. A. Wheeler and W. H. Zurek and re-impresso em Quantum Theory and Measurement , J. A. Wheeler and W. H. Zurek, Princeton Univeristy Press)*, v. 37, p. 363, 1926.
- BOTTEN, L. C. et al. Bloch mode scattering matrix methods for modeling extended photonic crystal structures. i. theory. *Phys. Rev. E*, v. 70, p. 056606, 2004.
- BOTTEN, L. C. et al. Bloch mode scattering matrix methods for modeling extended photonic crystal structures. ii. applications. *Phys. Rev. E*, v. 70, p. 056607, 2004.

- BRUNNER, R. et al. Draining the sea of chaos: Role of resonant transmission and reflection in an array of billiards. *Phys. Rev. Lett.*, v. 98, p. 204101–1, 2007.
- BUTKOV, E. *Física Matemática*. [S.l.]: Editora Guanabara Koogan S.A., 1988.
- BYRONA, F. W. et al. *Mathematics of Classical and Quantum Physics*. [S.l.]: Dover Publications, Inc., 1992.
- CANESTRARO, C. D. et al. Carbon nanotubes based nanocomposites for photocurrent improvement. *Appl. Surf. Sci.*, v. 252, p. 5575, 2006.
- CHICANNE, C. et al. Imaging the local density of states of optical corrals. *Phys. Rev. Lett.*, v. 88, p. 09740, 2002.
- CHRISTMAN, J. R. *Fundamentals of Solid State Physics*. [S.l.]: John Wiley and Sons, 1988.
- COHEN-TANNOUDJI, C. et al. *Quantum Mechanics*. [S.l.]: John Wiley and Sons, 1977.
- CUSACK, N. E. *The Physics of Structurally Disordered Matter: An Introduction*. [S.l.]: Adam Hilger, 1990.
- CVITANOVIĆ, P.; ECKHARDT, B. Periodic-orbit quantization of chaotic systems. *Phys. Rev. Lett.*, v. 63, p. 823, 1989.
- DHAR, A. et al. Isospectrality in chaotic billiards. *Phys. Rev. E*, v. 68, n. 1, p. 026208–1, 2003.
- DIETZ, B. et al. Inside-outside duality for planar billiards: A numerical study. *Phys. Rev. E*, v. 46, n. 11, p. 4222, 1995.
- DIETZ, B.; SMILANSKY, U. A scattering approach to the quantization of billiards - the inside-outside duality. *CHAOS*, v. 3, n. 4, p. 581, 1993.
- DORON, E.; SMILANSKY, U. Semiclassical quantization of chaotic billiards: a scattering theory approach. *Nonlinearity*, v. 5, p. 1055, 1992.
- DRISCOLL, T. A. Eigenmodes of isospectral drums. *Society for industrial and applied mathematics*, v. 39, n. 1, p. 1, 1997.
- DRISCOLL, T. A.; GOTTLIEB, P. W. Isospectral shapes with neumann and alternating boundary conditions. *Phys. Rev. E*, v. 68, n. 1, p. 016702–1, 2003.
- ECKMANN, J. P.; PILLET, C. A. Spectral duality for billiards. *Com. Math. Phys.*, v. 170, p. 283, 1995.
- ETCHEGOIN, P.; MAHER, R. C. Electromagnetic optimization of light-harvesting proteins. *Phys. Rev. E*, v. 67, p. 022902, 2003.
- FRAHM, K.; PICHARD, J.-L. Brownian motion ensembles and parametric correlations of transmission eigenvalues: Application to coupled quantum billiards and to disordered wires. *J. de Physique I*, v. 5, p. 877, 1995.
- FRANCS, G. C. des et al. Optical analogy to electronic quantum corrals. *Phys. Rev. Lett.*, v. 86, p. 4950, 2000.

- FREI, W. R.; JOHNSON, H. T. Finite-element analysis of disorder effects in photonic crystals. *Phys. Rev. B*, v. 70, p. 165116, 2004.
- GASPARD, P. *Chaos, Scattering and Statistical Mechanics*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1998.
- GASPARD, P. et al. Chaotic scattering on  $c_{4v}$  four-disk billiards: Semiclassical and exact quantum theories. *Phys. Rev. E*, v. 50, p. 2591, 1994.
- GASPARD, P.; RAMIREZ, D. A. Ruelle classical resonances and dynamical chaos: The three- and four-disk scatterers. *Phys. Rev. A*, v. 45, n. 12, p. 8383, 1992.
- GASPARD, P.; RICE, S. A. Exact quantization of the scattering from a classically chaotic repeller. *J. Chem. Phys.*, v. 90, p. 2255, 1989.
- GASPARD, P.; RICE, S. A. Scattering from a classically chaotic repeller. *J. Chem. Phys.*, v. 90, p. 2225, 1989.
- GASPARD, P.; RICE, S. A. Semiclassical quantization of the scattering from a classically chaotic repeller. *J. Chem. Phys.*, v. 90, p. 2242, 1989.
- GERNISKI, A. et al. Nano-indented metal mask layer for photons harvesting in organic photo detector device. Submetido ao J. Appl. Phys. 2007.
- GIPSON, G. S. *Boundary Element Fundamentals*. [S.l.]: Computational Mechanics, 1987.
- GOLDBERG, M. L.; WATSON, K. M. *Collision theory*. [S.l.]: Willey, New York, 1964.
- GOLOSKIE, R. et al. Boundary elements and surface plasmons. *Computers in Physics*, v. 10, p. 477, 1996.
- GORDON, C. et al. One cannot hear the shape of a drum. *Bulletin of the American Mathematical Society*, v. 27, n. 1, p. 134, 1992.
- GRADSTHEYN, I. S.; RYZHIK, I. M. *Table of integral, Series and products*. [S.l.]: Ed. Alan Jeffrey, 1994.
- HACKENBROICH, G. et al. Quantum perturbation theory for the level splitting in billiards. *Phys. Rev. E*, v. 57, p. R5, 1998.
- HARTMANN, F. *Introduction to boundary elements: Theory and applications*. [S.l.]: Springer, 1997.
- HELLER, E. *Chaos and Quantum Physics*. [S.l.]: eds. M.J. Giannoni, A. Voros, and J. Zinn-Justin (Elsevier Science Publishers), 1990.
- HELLER, E. J. Bound-state eigenfunctions of classically chaotic hamiltonian systems: Scars of periodic orbits. *Phys. Rev. Lett.*, v. 53, n. 16, p. 1515, 1984.
- HUGHES, S. et al. Extrinsic optical scattering loss in photonic crystal waveguides: Role of fabrication disorder and photon group velocity. *Phys. Rev. Lett.*, v. 94, p. 033903, 2005.

- ISHIO, H. et al. Wave function statistics for ballistic quantum transport through chaotic open billiards: Statistical crossover and coexistence of regular and chaotic waves. *Phys. Rev. E*, v. 64, p. 056208, 2001.
- JALABERT, R. A. et al. "conductance fluctuations in the ballistic regime: A probe of quantum chaos?". *Phys. Rev. Lett.*, v. 65, n. 19, p. 2442, 1990.
- JOANNOPOULOS, J. D. et al. Photonic crystal: Putting a new twist on light. *Nature*, v. 386, p. 143, 1997.
- JOANNOPOULOS, J. D. et al. Photonic crystals. *Solid State Communications*, v. 102, p. 165, 1997.
- JOHN, S. Strong localization of photons in certain disordered dielectric superlattices. *Phys. Rev. Lett.*, v. 58, p. 2486, 1987.
- JOHNSON, S. G.; JOANNOPOULOS, J. D. Designing synthetic optical media: photonic crystals. *Acta Materialia*, v. 51, p. 5823, 2003.
- KAC, M. Can one hear the shape of the drum? *Am. Math. Month.*, v. 73, p. 1, 1966.
- KATINE, J. A. et al. Point contact conductance of an open resonator. *Phys. Rev. Lett.*, v. 79, p. 4806, 1997.
- KIM, Y.-H. et al. Wave function scarring in open quantum dots: A microwave-billiard analog study. *Phys. Rev. B*, v. 65, p. 195301, 2001.
- KNIGHT, J. et al. Photonic crystal fibres: New solutions in fiber optics. *Optics and Photonics News*, p. 26, 2002.
- KORSCH, H. J.; JODL, H.-J. *Chaos - A program collection for PC*. 2. ed. [S.l.]: Springer, 1998.
- KOSZTIN, I.; SCHULTEN, K. Boundary wall method for stationary states of two-dimensional quantum systems. *J. Mod. Phys.*, C8, p. 293, 1997.
- KWAN, K.-C. et al. Effects due to disorder on photonic crystal-based waveguides. *Appl. Phys. Lett.*, v. 82, p. 4414, 2003.
- LEE, P. A.; RAMAKRISHNAN, T. V. Disordered electronic systems. *Rev. Mod. Phys.*, v. 57, p. 287, 1985.
- LEPIENSKI, C. M.; FOERSTER, C. E. *Nanomechanical properties by nanoindentation. in Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology, Vol. 7*. [S.l.]: Ed. H. S. Nalwa, 2004.
- LESSIE, D.; SPADARO, J. One-dimensional multiple scattering in quantum mechanics. *Am. J. Phys.*, v. 54, p. 909, 1986.
- LI, B.; ROBNIK, M. Boundary integral method in chaotic quantum billiards. *eprint-arXiv/Submitted to J. Phys. A; Math. Gen*, 1995.
- LI, B. et al. Relevance of chaos in numerical solutions of quantum billiards. *Phys. Rev. E*, v. 57, p. 4095, 1998.

- LI, L.-M.; ZHANG, Z.-Q. Multiple-scattering approach to finite-sized photonic band-gap materials. *Phys. Rev. B*, v. 58, p. 9587, 1998–I.
- LIN, S. et al. Experimental demonstration of guiding and bending waves in a electromagnetic waves in a photonic crystal. *Science*, v. 282, p. 274, 1998.
- LINKE, H. et al. Chaos in quantum ratchets. *Phys. Script.*, T90, p. 54, 2001.
- LORRAIN, P. et al. *Campos and Ondas Eletromagnéticas*. [S.l.]: Fundação Calouste Gulbenkian, 2000.
- LU, W. et al. Quantum resonances and decay of a chaotic fractal repeller observed using microwaves. *Phys. Rev. Lett.*, v. 82, n. 26, p. 5233, 1999.
- LU, W. et al. Microwave study of quantum n-disk scattering. *Phys. Rev. E*, v. 61, n. 4, p. 3652, 2000.
- LU, W. T. et al. Quantum correlations and classical resonances in an open chaotic system. *Phys. Scr.*, T90, p. 238, 2001.
- LUZ, M. G. E. da et al. Quantum scattering from arbitrary boundaries. *Phys. Rev. E*, v. 56, n. 3, p. 2496, 1997.
- MAIN, J. et al. Classical, semiclassical, and quantum investigations of the four-sphere scattering system. *Phys. Rev. E*, v. 69, p. 056227, 2004.
- MEKIS, A. et al. High transmission through sharp bends in photonic crystal waveguides. *Phys. Rev. Lett.*, v. 77, p. 3787, 1996.
- MEKIS, J. et al. Bound states in photonic crystal waveguides and waveguide bends. *Phys. Rev. B*, v. 58, p. 4809, 1998.
- MELLO, P. A.; TOMSOVIC, S. Scattering approach to quantum electronic transport. *Phys. Rev. B*, v. 46, p. 15 963, 1992–II.
- MENDEZ-BERMUDEZ, J. A. et al. Chaotic waveguide-based resonators for microlasers. *Phys. Rev. B*, v. 67, p. 161104, 2003.
- MILNER, V. et al. Optical billiards for atoms. *Phys. Rev. Lett.*, v. 86, p. 1514, 2001.
- MINGALEEV, S.; KIVSHAR, Y. Nonlinear photonic crystals: Toward all-optical technologies. *Optics and Photonic News*, p. 48, 2002.
- MIROSHNICHENKO, A. E.; KIVSHAR, Y. S. Sharp bends in photonic crystal waveguides as nonlinear fano resonators. *Optics Express*, v. 13, p. 3969, 2005.
- MOLONEY, M. Quality factors and conductances in helmholtz resonators. *Am. J. Phys.*, v. 72, p. 1035, 2004.
- ORTIZ, J. S. E.; ALMEIDA, A. M. O. de. Bogolomy section for the stadium: I. quantum theory. *J. Phys. A*, v. 30, p. 7301, 1997.
- OTT, E. *Chaos in dynamical systems*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1993.

- PETTERSSON, L. A. A. et al. Modeling photocurrent action spectra of photovoltaic devices based on organic thin films. *J. Appl. Phys.*, v. 86, p. 487, 1999.
- PEUMANS, P. et al. Efficient photon harvesting at high optical intensities in ultrathin organic double-heterostructure photovoltaic diodes. *Appl. Phys. Lett.*, v. 76, p. 2650, 2000.
- PHOTONICS Dictionary. [S.l.]: Laurin Publishing Co., 2007.  
[Http://www.photonics.com/dictHome.aspx](http://www.photonics.com/dictHome.aspx).
- PRESS, W. et al. *Numerical Recipes in Fortran 77*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1992.
- RAHACHOU, A. I.; ZOZOULENKO, I. V. Light propagation in finite and infinite photonic crystals: The recursive green's function technique. *Phys. Rev. B*, v. 72, p. 155117, 2005.
- RAKHSHANI, A. E. et al. Electronic and optical properties of fluorine-doped tin oxide films. *J. Appl. Phys.*, v. 83, p. 1049–1057, 1998.
- REED, M.; SIMON, B. *Methods of modern mathematical physics III: Scattering Theory*. [S.l.]: Academy Press, 1979.
- ROJANSKI, V. *Electromagnetic Fields and Waves*. [S.l.]: Dover Publications, Inc., 1979.
- ROMAN, L. S. *Organic Photodiodes*. [S.l.]: Institute of Technology - Lipköpings Universitet, 2000.
- ROMANOV, S. G.; TORRES, C. M. S. Forward scattering of light in thin opal films. *Phys. Rev. E*, v. 69, p. 046611, 2004.
- ROSENQVISTY, P. et al. Small disks and semiclassical resonances. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 29, p. 5441, 1996.
- ROUNDRY, D.; JOANNOPOULOS, J. Photonic crystal structure with square symmetry within each layer and a three-dimensional band gap. *Appl. Phys. Lett.*, v. 82, p. 3835, 2003.
- ROWE, K. D.; SIEMENS, P. J. Unusual quantum effects in scattering wavefunctions of two-dimensional cage potentials. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 38, p. 8921, 2005.
- SADREEV, A. F. Current statistics for transport through rectangular and circular billiards. *Phys. Rev. E*, v. 70, p. 016208, 2004.
- SADREEV, A. F. et al. S-matrix formalism of transmission through two quantum billiards coupled by a waveguide. *J. Phys. A*, v. 38, p. 10647, 2005.
- SADREEV, A. F. et al. Bound states in the continuum in open quantum billiards with a variable shape. *Phys. Rev. B*, v. 73, p. 235342, 2006.
- SAICHEV, A. I. et al. Statistics of interior current distributions in two-dimensional open chaotic billiards. *J. Phys. A*, v. 35, p. 87, 2002.
- SAKURAI, J. J. *Modern Quantum Mechanics (Revised Edition)*. [S.l.]: Addison-Wesley Publishing Company, 1994.
- SRIDHAR, S.; KUDROLLI, A. Experiment on not 'hearing the shape' of drums. *Phys. Rev. Lett.*, v. 72, p. 2175, 1994.



- SRIDHAR, S.; LU, W. T. Sinai billiards, ruelle zeta-functions and ruelle resonances: Microwave experiments. *J. Stat. Phys.*, v. 108, p. 755, 2002.
- STÖCKMANN, H. J. *Quantum Chaos: An introduction*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1999.
- STÖCKMANN, H. J.; STEIN, J. Quantum chaos in billiards studied by microwave absorption. *Phys. Rev. Lett.*, v. 64, p. 2215, 1990.
- TANG, W. C. Two-layer organic photovoltaic cells. *Appl. Phys. Lett.*, v. 48, p. 183, 1985.
- TASAKI, S. et al. Interior dirichlet eigenvalue problem, exterior neumann scattering problem, and boundary element method for quantum billiards. *Phys. Rev. E*, v. 56, p. R13, 1997.
- VAISHNAV, J. Y. et al. Hall of mirrors scattering from an impurity in a quantum wire. *Phys. Rev. B*, v. 73, p. 115331, 2006.
- VAISHNAV, J. Y. et al. Matter wave scattering and guiding by atomic arrays. *Phys. Rev. E*, v. 76, p. 013620, 2007.
- VATTAY, G. et al. Periodic orbit theory of diffraction. *Phys. Rev. Lett.*, v. 73, p. 2304, 1994.
- VERGINI, E.; SARACENO, M. Calculation by scaling of highly excited states of billiards. *Phys. Rev. E*, v. 52, p. 2204, 1998.
- VILLENEUVE, P. R. et al. Microcavities in photonic crystals: Mode symmetry, tunability, and coupling efficiency. *Phys. Rev. B*, v. 55, p. 7837, 1996.
- VOLKOV, V. S.; BOZHEVOLNYI, S. I. Near-field characterization of low-loss photonic crystal waveguides. *Phys. Rev. B*, v. 72, p. 035118, 2005.
- WIRZBA, A. Quantum mechanics and semiclassics of hyperbolic n-disk scattering systems. *Phys. Rep.*, v. 309, p. 1, 1999.
- WU, H. et al. Numerical investigation of isospectral cavities built from triangles. *Phys. Rev. E*, v. 51, n. 1, p. 703, 1995.
- YABLONOVITCH, E. Inhibited spontaneous emission in solid-state physics and electronics. *Phys. Rev. Lett.*, v. 58, p. 2059, 1987.
- ZANETTI, F. M. *Método de Contorno de Paredes Aplicado à Bilhares Quânticos*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Federal do Paraná, 2004.
- ZANETTI, F. M. et al. Particle scattering in photonic crystal-like structures using the boundary wall method. Submetido ao J. Phys. B. 2007.
- ZANETTI, F. M. et al. Eigenstates and scattering solutions for billiards problems: a boundary wall approach. Aceito para publicação na revista Ann. Phys. fevereiro/2007.
- ÖZBAYA, E. et al. Defect structures in metallic photonic crystals. *Appl. Phys. Lett.*, v. 69, p. 3797, 1996.