

Universidade Federal do Paraná

Programa de Pós-Graduação em Física

Descrição Clássica para a Interação de dois Átomos de Rydberg

Helga Pollnow

Dissertação apresentada à Universidade Federal do Paraná como parte da exigência para a obtenção do título de mestre em Física.

Curitiba-PR
2011

Universidade Federal do Paraná

Programa de Pós-Graduação em Física

Descrição Clássica para a Interação de dois Átomos de Rydberg

Helga Pollnow

Orientador: Prof. Dr. Marcus Werner Beims

Dissertação apresentada à Universidade Federal do Paraná como parte da exigência para a obtenção do título de mestre em Física.

Curitiba-PR
2011

Sumário

1	Introdução	1
2	Átomos de Rydberg e Pacotes de Ondas	4
2.1	Átomos de Rydberg	4
2.2	Pacotes de Ondas	5
2.2.1	Geração de Pacotes de Ondas de Rydberg	7
3	Sistemas Dinâmicos	10
3.1	Sistemas Hamiltonianos	12
3.1.1	Sistemas Integráveis	13
3.2	O Teorema KAM	15
3.2.1	Os toros ressonantes e caos microscópico	17
3.3	Seções de Poincaré	20
4	Resultados	22
4.1	A Hamiltoniana escalonada	22
4.2	Comportamento dos Parâmetros e do Potencial de Interação	26
4.3	Dinâmica Eletrônica na Interação entre os Átomos de Rydberg	29
4.3.1	Dinâmica Eletrônica Regular	30
4.3.2	Dinâmica Eletrônica Quase Regular	35
4.3.3	Dinâmica Eletrônica Caótica e Ionização	40
5	Conclusões	44

Lista de Figuras

2.1	Pacotes de ondas de Rydberg radiais como função de r (em unidades de raio de Bohr a_0). A figura à esquerda apresenta o pacote de onda para tempos $t - t_a = \frac{1}{9}T_{E_n}, \frac{2}{9}T_{E_n}, \frac{3}{9}T_{E_n}$. Para o gráfico da direita o pacote de onda é mostrado para os tempos $t - t_a = \frac{2}{9}T_{E_n}$ e $t - t_a = (1 + 2/9)T_{E_n}$. Figura extraída da referência [18].	8
3.1	Representação de trajetórias no espaço de fase.	11
3.2	Representação de trajetória na secção de um toro racional (na figura de esquerda) e em um toro irracional (figura da direita).	14
3.3	Zonas não destruídas de comprimento $K/s^{5/2}$ (em preto) para a razão de frequência racional r/s com $K = 0, 2$. Imagem extraída da referência [22].	17
3.4	As vizinhanças de um toro racional ressonante.	18
3.5	Resultado da destruição de um toro ressonante: surge uma corrente de pontos elípticos e hiperbólicos onde os movimentos quase periódico e caótico dominam. Somente alguns poucos de todos os desdobramentos oscilantes são mostrados. . .	18
3.6	Pontos elípticos e hiperbólicos.	19
3.7	Esquema representativo das trajetórias atravessando uma seção de Poincaré. . .	20
4.1	Esquema do sistema analisado. Os núcleos dos átomos de Rydberg estão separados por uma distância R , enquanto que os elétrons se encontram à distância x e y do centro do sistema, considerado aqui como posição 0.	22
4.2	Gráfico dos parâmetros em função de \tilde{R}	26
4.3	Comparação dos parâmetros de intensidade semelhante.	27
4.4	Comportamento do potencial de interação para valores de \tilde{R}	28
4.5	Exemplos de seções de Poincaré para região de dinâmica eletrônica regular. . . .	30
4.6	(a) Ampliação da seção de Poincaré da figura 4.5(a). (b) Espaço de fase obtido considerando $\tilde{R} = 2,70$ para a condição inicial $p_\eta = 0,001$, $\eta = 0,080$ e $\xi = 0$. . .	31
4.7	Evolução das trajetórias no espaço de fase para $\tilde{R} = 2,70$ com um tempo variando de 0,025 a 4,5.	32
4.8	(a)Ampliação da seção de Poincaré da figura 4.5(b). Em (b) temos o espaço de fase obtido considerando $\tilde{R} = 1,95$, para a condição inicial $p_\eta = -0,005$, $\eta = 0,290$ e $\xi = 0$	32
4.9	(a) Ampliação da seção de Poincaré da figura 4.5(c). Em (b) temos o espaço de fase obtido para $\tilde{R} = 1,94$ com condição inicial $p_\eta = -0,003$, $\eta = -0,481$ e $\xi = 0$. . .	33
4.10	Evolução das trajetórias no espaço de fase para $\tilde{R} = 1,94$ com tempo variando de 0,025 a 4,5.	34
4.11	Exemplos de seções de Poincaré na região de dinâmica eletrônica quase regular. . .	35

4.12	(a)Ampliação da seção de Poincaré da figura 4.11(a). Em (b) temos o espaço de fase para $\tilde{R} = 1,80$ com condição inicial em $p_\eta = -0,712$, $\eta = 0,099$ e $\xi = 0$. . .	36
4.13	Evolução das trajetórias do espaço de fase para $\tilde{R} = 1,80$ com tempo t variando de $t = 0,01$ a $t = 16,0$	37
4.14	(a)Ampliação da seção de Poincaré da figura 4.11(b). Em (b) temos o espaço de fase para $\tilde{R} = 1,79$ com condição inicial em $p_\eta = -0,003$, $\eta = -0,045$ e $\xi = 0$. .	37
4.15	Evolução das trajetórias no espaço de fase para $\tilde{R} = 1,79$ para o tempo variando de $t = 0,01$ a $t = 12,1$	38
4.16	Em (a) temos a Ampliação da seção de Poincaré da figura 4.11(c). Em (b) temos o espaço de fase para $\tilde{R} = 1,78$ com condição inicial em $p_\eta = 0,006$, $\eta = 0,027$ e $\xi = 0$	39
4.17	Evolução das trajetórias no espaço de fase para $\tilde{R} = 1,78$ para tempo de $t = 0,01$ a $t = 39,0$	40
4.18	Exemplos de seções de Poincaré na região de dinâmica eletrônica caótica. . . .	41
4.19	Em (a) temos a ampliação da seção de Poincaré da figura 4.18(a). Em (b) temos o espaço de fase para $\tilde{R} = 1,75$ com condição inicial em $p_\eta = -0,443$, $\eta = 0,130$ e $\xi = 0$	42
4.20	Evolução do espaço de fase para $\tilde{R} = 1,72$ para condição iniciada em $p_\eta = -0,316$, $\eta = 0,130$ e $\xi = 0$	43

Resumo

Átomo de Rydberg é uma denominação genérica para átomos nos quais o elétron é excitado para um nível de energia com alto valor do número quântico principal n . O interesse no estudo destes átomos deve-se principalmente ao grande tamanho do raio atômico e a elevados tempos de vida que estes apresentam. Neste trabalho, nós utilizamos um modelo unidimensional para a interação entre dois átomos de Rydberg e em seguida realizamos uma aproximação harmônica para entender a dinâmica eletrônica proveniente da interação. Esta descrição é possível apenas quando pacotes de ondas eletrônicas localizados nas coordenadas angular e radial são assumidos em ambos os átomos. O modelo é caracterizado por considerar dois átomos hidrogenóides sobre uma linha, na qual os núcleos estão separados pela distância R . Para evitar a singularidade do potencial de Coulomb no caso unidimensional, nós utilizamos o modelo *soft core*, com parâmetro a . Após isto, usamos coordenadas escalonadas ($\tilde{x} = x/n^2$) e uma renormalização no tempo ($d\tau/dt = \sqrt{Z}/n^3$) de forma que a energia escalonada é então fixa ($\tilde{E} = -1$). Para a interação eletrônica aproximada obtivemos um potencial do tipo Hénon-Heiles com um termo adicional linear. Com isto, caracterizamos o comportamento do sistema dinâmico usando seções de Poincaré e diagramas de espaço de fase. A dinâmica eletrônica é discutida qualitativamente e quantitativamente como função da distância internuclear escalonada \tilde{R} .

Abstract

Rydberg atom is a generic expression for atoms which have its electrons excited to an energy level with very large principal quantum number n . The interest in the study of these atoms is mainly due to large dimension and high lifetimes that they present. In this work, we used one-dimensional Rydberg atoms interaction model and then we made an harmonic approximation to understand the electronic dynamic of two colliding Rydberg atoms. Such description is only possible when electronic localized wave packets in the radial and angular coordinates are assumed in both atoms. The model is characterized by considering two hydrogen like atoms on a line, which the nuclei are separated by a distance R . To avoid the Coulomb potential singularity in the one-dimensional case, we used the *soft core* model, with parameter a . Besides this, we used scaled coordinates ($\tilde{x} = x/n^2$) and a time renormalization ($d\tau/dt = \sqrt{Z}/n^3$) so that the scaled energy is fixed ($\tilde{E} = -1$). For the approximated electronic interaction, we obtained a Hénon-Heiles like potential with an additional linear term. With this, we characterized the behavior of the dynamical system using Poincaré sections and Phase space diagrams. The electronic dynamic is discussed qualitatively and quantitatively, as a function of the scaled intranuclear distance \tilde{R} .

Capítulo 1

Introdução

O estudo de processos colisionais entre átomos é bastante recorrente em física, pois possibilitam a prescrição de possíveis comportamentos macroscópicos em algum sistema físico. Um dos exemplos mais simples ocorre quando queremos analisar propriedades macroscópicas de gases monoatômicos. As colisões entre os átomos constituintes do gás, quando considerados como partículas pontuais, e também destes com as paredes do recipiente no qual este gás está confinado, faz com que possamos calcular propriedades físicas gerais do sistema, tais como pressão, temperatura, energia livre, caminho médio [1, 2]. Porém, dependendo do refinamento adotado, quando considerados diferentes *ensembles* e/ou propriedades quânticas dos átomos constituintes, tratar um gás, mesmo que hidrogenóide, pode tornar-se extremamente difícil, tanto analiticamente quanto computacionalmente. Além disso, para gases reais, ainda existe a possibilidade de que com a interação sejam gerados processos de ionização e também estados ligados, os quais contribuem, por exemplo, para a geração de discrepâncias entre um cálculo obtido a partir de um modelo simples e resultados experimentais. Por isso, é interessante um estudo prévio de um sistema simples, envolvendo poucos átomos interagentes, para os quais são definidos alguns parâmetros de controle e atribuído a estes um potencial de interação de longo alcance. A partir desse modelo simples, otimizando os parâmetros de controle envolvidos, é possível, a princípio, generalizar alguns resultados para o caso de um sistema composto por uma quantidade maior de átomos interagentes.

Os efeitos quânticos em gases monoatômicos têm sido extensivamente estudados, principalmente após 1995. Nesse ano, Eric Cornell e Carl Wieman na Universidade do Colorado obtiveram, de forma satisfatória, um condensado de Bose-Einstein [3] usando um gás de átomos de Rubídio resfriados a 170 nKelvin. Posteriormente, em 1998 Dale G. Fried e colaboradores obtiveram o condensado para o átomo de hidrogênio [4]. O condensado de Bose-Einstein requer que todos os átomos do gás estejam ocupando seu nível de energia fundamental. Segundo os estudos de Satyendra Nath Bose e, posteriormente, de Albert Einstein, esse fenômeno do condensado faz com que as propriedades quânticas do gás sejam observadas em escalas macroscópicas [1, 2].

Ao contrário do que ocorre no condensado, no qual todos os átomos precisam ocupar seus níveis de energia fundamental, existe uma classe de átomos, conhecida como átomos de Rydberg, na qual os átomos se encontram altamente excitados. Estes átomos possuem esta denominação em homenagem ao físico sueco Johannes Robert Rydberg, o qual a partir da série de Balmer, observou que as posições das linhas espectrais para cada elemento químico apresentavam cada uma um valor constante. Estes valores diferiam das posições das linhas espectrais do átomo de Hidrogênio. Pois, nestes resultados, foi considerada a massa reduzida do átomo [5]. Para estes átomos, os níveis de energia estão extremamente próximos do contínuo, o que acarreta uma diferença muito pequena entre os níveis adjacentes ΔE_n . Devido a este fato, pode ser esperado para o elétron uma dinâmica clássica.

Estes átomos altamente excitados são encontrados no espaço interestelar, pois este meio está constantemente sujeito à radiações ultravioleta das estrelas, ventos estelares, raios cósmicos originados de explosões de supernovas, etc. Além disso, por este meio ser praticamente vazio, isto o torna favorável para átomos em altos estados de Rydberg sobreviverem até irradiarem [6]. Estas irradiações constituem um mecanismo para caracterizar o ambiente físico no qual os átomos são excitados. Isto ocorre mediante a análise dos níveis nos quais os átomos irradiam.

Em laboratório, geralmente são produzidos átomos no estado de Rydberg a partir de átomos de Hidrogênio ou alcalinos (hidrogenóides) tais como Rb, Na ou Li, mediante o confinamento em armadilhas magneto-ópticas (AMO). Estas armadilhas são constituídas por um par de bobinas atuando na configuração anti-Helmholtz com o objetivo de confinar os átomos no centro da armadilha, onde o campo magnético resultante é nulo. Além disso, três pares de lasers contra-propagantes nas direções x , y e z com polarização circular, são responsáveis por resfriar os átomos mantendo estes também o maior tempo possível no centro da armadilha. Com isso são obtidos os conhecidos átomos frios, cujas temperaturas são da ordem de 1 mK (ou em alguns casos ultrafrios, com temperaturas da ordem de $1\text{ }\mu\text{K}$), que chegam a velocidades da ordem de cm/s no interior da armadilha [7]. Os elétrons podem então ser promovidos para os estados de Rydberg por meio de um laser de corante sintonizável, pois estes lasers possibilitam excitar o átomo a um nível de energia específico.

O interesse no estudo de átomos em estados de Rydberg provém do fato que estes possuem características peculiares que os diferem de átomos no estado fundamental e átomos fracamente excitados. Por exemplo, o raio atômico está relacionado com o nível de excitação, sendo proporcional ao quadrado do número quântico principal n . Como consequência, as seções de choque geométricas obtidas experimentalmente para átomos de Rydberg são muito superiores àquelas regularmente obtidas para esses mesmos átomos no nível fundamental, o que torna os processos de colisão importantes [7, 8]. Outra característica importante reside no fato de que estes átomos possuem um elevado momento de dipolo, o que gera um grande interesse em estudos de interação da radiação com a matéria [8]. Além disso, o tempo para o decaimento radioativo

em átomos de Rydberg é extremamente grande, chegando a ordem de milésimos de segundo, enquanto que transições radioativas para átomos fracamente excitados são da ordem de nano e até picosegundos.

Apesar do estudo de elétrons em um átomo ser caracterizado puramente utilizando mecânica quântica [5, 9], devido ao fato dos átomos no estado de Rydberg possuírem seu elétron de valência a maior parte do tempo longe do núcleo, pode ser esperado um comportamento clássico. Com isso, é possível atribuir à esse átomo o modelo orbital de Kepler [10] ou modelo planetário. E dessa forma, descrever a dinâmica desse elétron sobre o núcleo de forma semiclássica. O período T_k dos estados de Rydberg é proporcional a n^3 , o que segue diretamente da terceira lei de Kepler $T_k^2/a^3 = constante$, com o semieixo maior a da elipse proporcional a n^2 [7]. Torna-se interessante notar que, como podemos esperar uma trajetória para o elétron orbitando o núcleo, os átomos de Rydberg são um caminho encontrado por vários autores para estudar o princípio da correspondência entre física clássica e quântica [11].

Outros estudos envolvendo estes átomos estão relacionados à produção de pacotes de onda não dispersivos, os quais podem ser bem localizados no espaço e tempo. Em um átomo de Rydberg, os pacotes de onda correspondem a uma sobreposição coerente de vários estados n elevados e estes são obtidos na presença de um campo de radiação externo oscilante. A importância em se obter um pacote de onda não dispersivo (coerente) deve-se ao fato de que no caso quase clássico, o centro do pacote de onda move-se ao longo de um caminho clássico como uma partícula [12, 13]. Ao mesmo tempo, propriedades de mecânica quântica podem ser observadas, tais como: espalhamento (e restauração) do pacote de onda e fenômenos de interferência [13]. Indícios experimentais da existência de caos quântico também foram observados a partir da análise da possibilidade de ionização de átomos de Rydberg. Como a transição entre regimes caótico e regular está diretamente relacionada com a amplitude do campo de radiação externo aplicado e de sua frequência de oscilação, os quais são parâmetros ajustáveis no sistema [12], átomos de Rydberg constituem uma boa forma de teste para evidenciar este fenômeno quântico [14].

O objetivo deste trabalho é analisar a dinâmica clássica em uma dimensão envolvendo dois átomos de Rydberg interagentes sujeitos ao potencial de Coulomb. Optamos por iniciar os estudos utilizando o caso unidimensional principalmente devido à simplicidade que este possui. Para isso, apresentamos inicialmente uma revisão teórica nos capítulos 2 e 3. No capítulo 2, são apresentadas algumas propriedades de átomos de Rydberg e pacotes de onda localizados de Rydberg, bem como a forma de obtenção de pacotes de onda localizados radialmente e angularmente. Em seguida, no capítulo 3, são apresentados conceitos de sistemas dinâmicos que são de fundamental importância para o entendimento do capítulo de resultados. No capítulo 4, apresentamos o modelo adotado na descrição do problema e a análise dos resultados relativos à dinâmica eletrônica. Por fim, no capítulo 5, são apresentadas as conclusões deste trabalho.

Capítulo 2

Átomos de Rydberg e Pacotes de Ondas

2.1 Átomos de Rydberg

Átomo de Rydberg é uma expressão genérica para indicar qualquer átomo no qual o elétron é excitado para um nível de energia com número quântico principal n elevado. Em geral, a maioria dos estudos utiliza átomos de Hidrogênio ou metais alcalinos para a obtenção de estados de Rydberg. Em um metal alcalino, o elétron mais externo passará a maior parte do tempo muito afastado do núcleo e dos demais elétrons. Este elétron excitado é assim atraído pelo que chamamos de caroço iônico. O caroço iônico é composto pelo núcleo de carga $+Z$ e pelos elétrons mais próximos ao núcleo de carga $-(Z-1)$. Conseqüentemente, devido ao efeito de blindagem dos elétrons mais próximos ao núcleo, o elétron excitado fica sujeito a atração do caroço iônico de carga resultante $+1$. Isto faz com que o potencial ao qual o elétron está sujeito, e conseqüentemente os níveis de energia do átomo, se assemelhem muito aos de um átomo de hidrogênio. Lembramos aqui que os níveis de energia para o átomo de hidrogênio são dados por $E_n = -R/n^2$, em que R é uma constante de valor $13,6 \text{ eV}$. Para um átomo de Rydberg alcalino, os níveis de energia dependem do número quântico principal n e do número quântico azimutal l :

$$E_{nl} = -\frac{R'}{(n - \delta_l)^2} = -\frac{R'}{n^{*2}}. \quad (2.1)$$

Essa equação difere da equação para o hidrogênio em dois aspectos: a constante R' leva em consideração a massa reduzida do elétron e n^* corresponde ao número quântico efetivo $n^* = n - \delta_l$. O termo δ_l é conhecido como defeito quântico e seu surgimento está relacionado ao fato de que quando o elétron passa próximo ao núcleo, este sente a interação com os demais elétrons e com o núcleo. Isso acarreta uma mudança de fase δ_l na função de onda do átomo de Rydberg em relação à função de onda do átomo de hidrogênio. Normalmente o defeito quântico somente

é significativo para estados com $l \sim 0$, pois estudos mostram que o valor do defeito quântico diminui significativamente quando l aumenta [15].

De forma geral, os átomos de Rydberg possuem características bastante incomuns. Uma delas é em relação ao seu tamanho. O raio atômico médio de um átomo de hidrogênio é dado aproximadamente por [5]:

$$\bar{r} = n^2 a_0, \quad (2.2)$$

em que $a_0 \simeq 0,52 \times 10^{-10} \text{ m}$ é o raio de Bohr. Então, por exemplo, para $n = 100$, o átomo terá uma dimensão em torno de $1 \mu\text{m}$, ou seja, o átomo é da ordem de 10 mil vezes maior que o mesmo átomo no estado fundamental. Além disso, outra característica que distingue os átomos no estado de Rydberg dos demais são seus grandes tempos de vida radioativos. Para baixos valores de l , o tempo de vida radioativo é proporcional a n^3 , enquanto que para altos valores de l este valor é proporcional a n^5 [16].

2.2 Pacotes de Ondas

Em mecânica quântica, um pacote de ondas pode ser entendido como uma superposição linear de ondas planas. Uma das características de pacotes de ondas está relacionada ao fato de que estes podem ser bem localizados no espaço em um intervalo de tempo pequeno.

Considere um pacote de ondas localizado no instante $t = 0$. Este pode ser escrito como combinação linear de $|\phi_n\rangle$ estados,

$$|\psi(t=0)\rangle = \sum_n c_n |\phi_n\rangle \quad (2.3)$$

com os coeficientes c_n dados por

$$c_n = \langle \phi_n | \psi(t=0) \rangle. \quad (2.4)$$

Podemos desenvolver os $|\phi_n\rangle$ como autoestados não perturbados do Hamiltoniano do sistema

$$H |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle, \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.5)$$

e determinar $|\psi(t)\rangle$ para um instante t qualquer, empregando o operador evolução temporal $U(t) = e^{-iHt/\hbar}$. Com isso obtém-se:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n \exp\left(-i\frac{E_n t}{\hbar}\right) |\phi_n\rangle. \quad (2.6)$$

Este estado não pode ser estacionário, exceto para o caso em que

$$|\psi(t=0)\rangle = |\phi_j\rangle \quad (2.7)$$

para algum j adequado ou para uma combinação linear de estados degenerados do sistema. Para sistemas físicos em geral, com exceção do oscilador harmônico, que possui níveis de energia igualmente espaçados, os pacotes de onda dispersam com o tempo, pois os autoestados $|\phi_j\rangle$ são tipicamente não localizados sobre uma grande parte do espaço de fase (ou espaço de configuração, quando considerada a representação de posição) [12]. Na realidade, para o caso do oscilador harmônico, os pacotes de onda se deformam com a evolução temporal. Porém, após um período, os pacotes retornam ao seu formato inicial, ou seja, estes não dispersam com o tempo.

Os pacotes de ondas refletem a evolução temporal de uma sobreposição coerente (localizada) de uma dada partícula e, por isso, representam uma forma de relacionar mecânica quântica com o conceito clássico de trajetória (ou órbita) de uma partícula. Isso ocorre, pois no caso quase clássico, o centro do pacote de ondas move-se no espaço ao longo de um caminho clássico de uma partícula [17].

Para a construção de pacotes de onda não dispersivos, é necessário um sistema quântico sujeito a uma excitação externa periódica com dinâmica clássica não linear. Esta excitação externa pode ser um campo eletromagnético monocromático, estável e sintonizável. Além disso, é necessário minimizar os processos incoerentes presentes no sistema, pois estes destroem a coerência de fase das funções de onda. Isso é possível quando as escalas de tempo características dos processos incoerentes são muito maiores que o período do campo aplicado [12]. Um sistema que atende a estas condições é formado pelos elétrons atômicos, pois em adequadas condições experimentais, os átomos podem ser considerados como sistemas praticamente isolados e o único processo incoerente presente é a emissão espontânea de fótons. Com isso, átomos no estado de Rydberg tornam-se bons candidatos para a produção de pacotes de onda não dispersivos, pois a emissão espontânea para estados altamente excitados é um mecanismo muito lento [12].

Para elétrons no estado de Rydberg, os pacotes de onda correspondem a uma sobreposição coerente de n estados. A excitação destes elétrons é realizada com um laser de pulso curto, de duração τ , o qual excita simultaneamente um conjunto de estados de Rydberg em torno de algum número quântico principal médio \bar{n} :

$$\frac{\hbar}{\tau} \gg \frac{1}{2\pi} \frac{dE_n}{dn} \Big|_{n=\bar{n}} = \frac{\hbar}{T_{E_{\bar{n}}}}, \quad (2.8)$$

com E_n as energias de Rydberg e $T_{E_{\bar{n}}}$ o tempo de órbita clássica correspondente a energia excitada média $E_{\bar{n}}$ [18]. De acordo com a equação 2.8, os pacotes de onda são excitados quando a duração do pulso é pequena comparada ao tempo de órbita clássica.

2.2.1 Geração de Pacotes de Ondas de Rydberg

A geração de pacotes de onda de Rydberg radiais pode ser descrita quando consideramos inicialmente um átomo com um único elétron de valência. Este elétron é então excitado de um estado inicial $|i\rangle$ com energia E_i para uma superposição coerente de estados de Rydberg, por intermédio de um pulso de laser com duração τ_a e frequência média ω_a . O centro do pulso alcança o átomo em um tempo t_a . Então, o campo elétrico sobre esse átomo, na posição $x = 0$, pode ser escrito como

$$\mathbf{E}(x = 0, t) = \mathcal{E}_a(t)\boldsymbol{\epsilon}_a e^{-i\omega_a t} + c.c. \quad (2.9)$$

(em que c.c. é a abreviação para complexo conjugado). O termo $e^{-i\omega_a t}$ é o responsável pela absorção, enquanto o termo $e^{+i\omega_a t}$ é o responsável pela emissão estimulada [19]. Temos ainda que $\boldsymbol{\epsilon}_a$ corresponde ao vetor de polarização e $\mathcal{E}_a(t)$ é a amplitude do campo, a qual pode ser tratada como tendo forma gaussiana

$$\mathcal{E}_a(t) = \mathcal{E}_a(0) \exp[-4(\ln 2)(1 + i\varphi_a)(t - t_a)^2/\tau_a^2], \quad (2.10)$$

com φ_a descrevendo a mudança de fase durante o pulso e τ_a a medida da largura a meia altura da duração do pulso do campo elétrico. Torna-se mais prático obter o espectro de potências para a equação 2.10, o que pode ser realizado pela transformação de Fourier de $\mathcal{E}_a(t)$

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{E}}(\Delta\omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} dt \mathcal{E}_a(t) e^{i\Delta\omega(t-t_a)} \\ &= \mathcal{E}_a(0) \left[\frac{\pi\tau_a^2}{4(\ln 2)(1 + i\varphi_a)} \right]^{1/2} \exp \left[-\frac{(1 - i\varphi_a)(\Delta\omega)^2\tau_a^2}{16(\ln 2)(1 + \varphi_a^2)} \right]. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Para campos fracos e baixas potências, podemos escrever a função de onda para o elétron da seguinte forma

$$|\psi(t)\rangle = |i\rangle e^{-iE_i t/\hbar} + |\psi_i^{(a)}(t)\rangle, \quad (2.12)$$

com

$$\begin{aligned} |\psi_i^{(a)}(t)\rangle &= \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' e^{-iH_A(t-t')/\hbar} \boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_a \mathcal{E}_a(t') |i\rangle e^{-i(E_i + \hbar\omega_a)t'/\hbar} \\ &= \sum_{n=n_0, l, m_l} |nlm_l\rangle e^{-iE_{nl}t/\hbar} a_{nlm_l \leftarrow i}^{(a)}(t). \end{aligned} \quad (2.13)$$

Para esta descrição foi utilizada teoria de perturbação em primeira ordem [9, 19] e aproximação RWA (*rotating-wave approximation*), a qual é responsável por eliminar os termos de oscilação rápida [20]. Na equação 2.13, H_A representa o hamiltoniano atômico, $|nlm_l\rangle$ são os estados de Rydberg com energia E_{nl} , l e m_l são os números quânticos angulares, $a_{nlm_l \leftarrow i}^{(a)}(t)$ são as

amplitudes de Rydberg, $\boldsymbol{\mu}$ é o operador de dipolo e neste caso a estrutura fina do átomo está sendo desconsiderada. Para tempos $t \geq t_a + \tau_a$, após o pulso de laser interagir com o átomo, as amplitudes de Rydberg são dadas por

$$a_{nlm_l \leftarrow i}^{(a)}(\infty) = \frac{i}{\hbar} \langle nlm_l | \boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{\epsilon}_a | i \rangle \tilde{\mathcal{E}}_a(\delta_{in}^{(a)}) e^{i\delta_{in}^{(a)} t_a}, \quad (2.14)$$

com $\tilde{\mathcal{E}}_a(\delta_{in}^{(a)})$ representando a densidade espectral (equação 2.11), calculada no ponto de desintonia $\delta_{in}^{(a)} = (E_{nl} - E_i - \hbar\omega_a)/\hbar$. Dessa forma, a função de onda do elétron pode ser descrita como uma sobreposição de estados de Rydberg $|nlm_l\rangle$, conforme equação 2.13. Se o pulso de laser é de pequena duração, esta função de onda descreve um pacote de ondas correspondente para uma sobreposição coerente de estados de Rydberg. Neste caso, o centro do pacote de onda segue a trajetória clássica de uma partícula se movendo em um potencial $V(r)$ [18]. O tempo de órbita correspondente para uma órbita ligada com energia E é dada por [17]

$$T_E = \pi \frac{\hbar}{R} (-E/R)^{-3/2}, \quad (2.15)$$

em que R é a constante de Rydberg.

A figura 2.1, extraída da referência [18], apresenta o movimento de um pacote de ondas radial quando o pulso de laser gaussiano com $\tau_a = 8 \text{ psec}$ ($\varphi_a = 0$) excita um pacote de ondas de Rydberg com $\bar{n} = 85$ e tempo de órbita clássica $T_{E_{\bar{n}}} = 94 \text{ psec}$, em que $E_{\bar{n}}$ corresponde à energia do estado \bar{n} . No gráfico à esquerda é apresentado o pacote de ondas para tempos

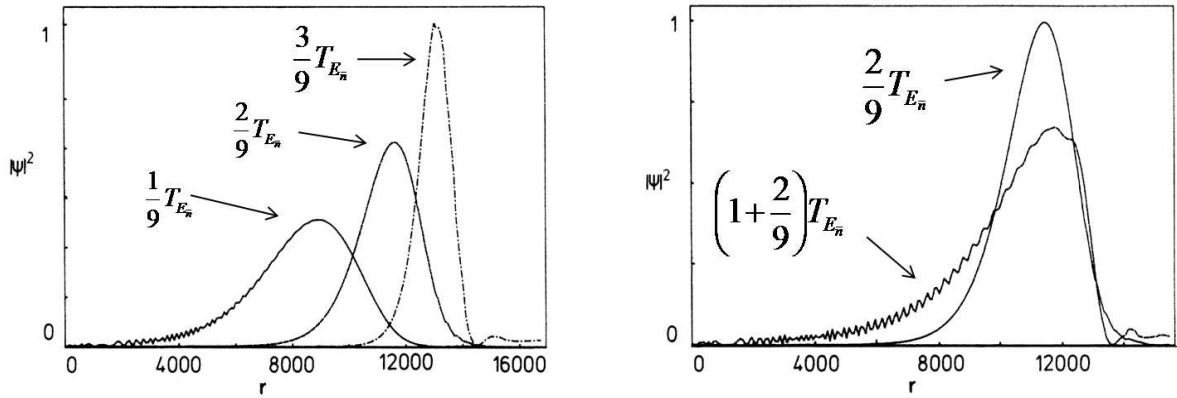


Figura 2.1: Pacotes de ondas de Rydberg radiais como função de r (em unidades de raio de Bohr a_0). A figura à esquerda apresenta o pacote de onda para tempos $t - t_a = \frac{1}{9}T_{E_{\bar{n}}}, \frac{2}{9}T_{E_{\bar{n}}}, \frac{3}{9}T_{E_{\bar{n}}}$. Para o gráfico da direita o pacote de onda é mostrado para os tempos $t - t_a = \frac{2}{9}T_{E_{\bar{n}}}$ e $t - t_a = (1 + \frac{2}{9})T_{E_{\bar{n}}}$. Figura extraída da referência [18].

$t - t_a \equiv \Delta t = \frac{1}{9}T_{E_{\bar{n}}}, \frac{2}{9}T_{E_{\bar{n}}}, \frac{3}{9}T_{E_{\bar{n}}}$. A contração do pacote de onda observada é consequência da diminuição do movimento do elétron próximo ao ponto de retorno clássico mais externo. Já para o gráfico à direita, é apresentada a comparação do pacote de onda no tempo $\Delta t = \frac{2}{9}T_{E_{\bar{n}}}$ e

$(1 + 2/9)T_{E\bar{n}}$, ou seja, para um tempo de órbita clássica posterior, mostrando que o pacote de ondas espalha com o aumento do tempo. Mesmo sendo observada a dispersão nestes pacotes de ondas, ainda assim estes são considerados como bons resultados na obtenção de pacotes de ondas radiais.

A discussão realizada até o momento refere-se à obtenção de pacotes de onda localizados apenas na parte radial. Porém, podemos também obter um movimento estável na variável angular, ou seja, obter um pacote de onda localizado inclusive na parte angular. Isto é possível pela adição de um campo elétrico estático. A adição deste campo elétrico estático permite o controle sobre a trajetória traçada pelo centro do pacote de onda [12].

Capítulo 3

Sistemas Dinâmicos

Um sistema dinâmico pode ser definido como uma prescrição matemática determinística da evolução do estado de um sistema, cuja dinâmica varia com o decorrer do tempo t . Neste caso, o tempo pode ser uma variável discreta ou contínua [21]. Um exemplo de sistema dinâmico no qual o tempo é uma variável contínua é um conjunto de N equações diferenciais ordinárias de primeira ordem,

$$\begin{aligned}\frac{dx_1}{dt} &= F_1(x_1, x_2, \dots, x_N), \\ \frac{dx_2}{dt} &= F_2(x_1, x_2, \dots, x_N), \\ &\vdots \\ \frac{dx_N}{dt} &= F_N(x_1, x_2, \dots, x_N),\end{aligned}\tag{3.1}$$

as quais também podem ser escritas na forma vetorial como

$$\frac{d\vec{x}(t)}{dt} = \vec{F}[\vec{x}(t)],\tag{3.2}$$

sendo \vec{x} um vetor N -dimensional e $\vec{F}[\vec{x}(t)]$ o conjunto de funções F_1, F_2, \dots, F_N nas variáveis x_1, x_2, \dots, x_N . Este é um sistema dinâmico, pois conhecido algum estado inicial $t = t_0$, é possível, a princípio, resolver as equações a fim de obter seus estados futuros para todo t . Quando um sistema dinâmico é descrito pelo conjunto de equações 3.1, o mesmo é conhecido como fluxo, devido à grande semelhança entre as trajetórias geradas pelo conjunto de todas as condições iniciais no espaço de fase, com os caminhos seguidos por partículas imersas em um fluido em movimento. Este sistema é denominado autônomo, pois não depende explicitamente do tempo. Caso contrário, o sistema é chamado não autônomo.

Consideremos agora um sistema dinâmico contínuo não linear com o fluxo Φ_t a ele associado. Esse fluxo pode dar origem a um sistema dinâmico denominado mapa, no qual o tempo é uma

variável discreta. Um mapa pode ser representado na forma vetorial como,

$$\vec{x}_{i+1} = \vec{F}_\mu(\vec{x}_i), \quad (3.3)$$

com \vec{x}_i sendo um vetor N-dimensional, \vec{F}_μ uma função que pode depender de diversos parâmetros de controle μ , e i representa os passos temporais fixos e discretos. A partir deste momento será dada uma ênfase maior aos sistemas dinâmicos contínuos, pois a parte relativa a mapas foge ao escopo geral deste trabalho.

Em geral, obter soluções analíticas para um conjunto de equações diferenciais só é possível em casos especiais e, mesmo assim, muitas vezes a solução obtida é muito complicada para uma caracterização direta e completa das propriedades do sistema. Em contrapartida, o cálculo numérico das mesmas só é válido para a situação calculada, requerendo um novo cálculo a cada mudança de condições iniciais ou de parâmetros. Entretanto, é possível identificar as principais características das soluções e compreender de forma qualitativa o comportamento do sistema físico utilizando um diagrama de fase, também conhecido por retrato de fase, espaço de estados ou espaço de fase. Em um espaço de fase, cada par de coordenadas $(dx_N/dt, x_N)$ representa um estado do sistema e mostra como esse estado evoluiu com o decorrer do tempo. Considerando um dado sistema com N graus de liberdade, é atribuído a esse sistema um espaço de fase com $2N$ dimensões. As curvas no espaço de fase são denominadas trajetórias de fase ou simplesmente linhas de fluxo, e o conjunto de todas essas curvas dá origem ao espaço de fase do sistema. A figura 3.1 é um exemplo de espaço de fase para um sistema dinâmico mostrando três condições iniciais evoluindo de um dado instante t_1 para um instante final t_2 .

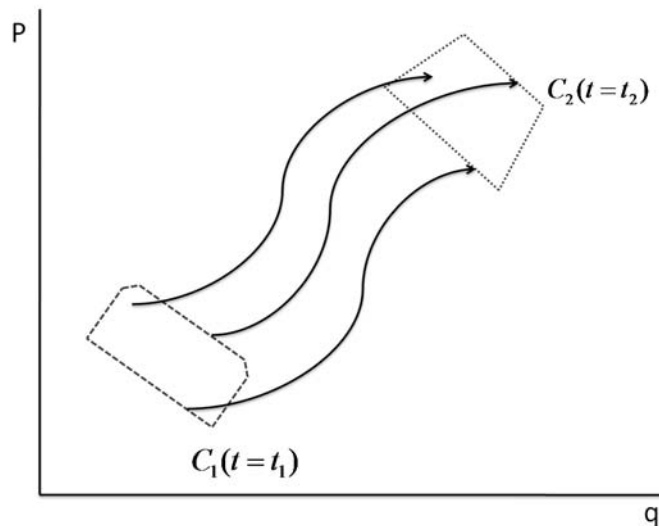


Figura 3.1: Representação de trajetórias no espaço de fase.

3.1 Sistemas Hamiltonianos

Uma classe particular a ser destacada dentre os sistemas dinâmicos são os chamados sistemas Hamiltonianos. Estes possuem sua dinâmica totalmente especificada pela função Hamiltoniana, $H(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t)$, com \mathbf{p} e \mathbf{q} sendo as coordenadas generalizadas de momento e posição. Exemplos de dinâmica Hamiltoniana incluem, desde sistemas mecânicos sem a presença de atrito, até misturas de fluidos e caminhos seguidos pelas linhas de campo magnético no interior de um plasma [21]. A evolução temporal de sistemas Hamiltonianos com N graus de liberdade é governada pelas equações de movimento de Hamilton:

$$\begin{aligned}\frac{d\mathbf{p}}{dt} &= -\frac{\partial H(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t)}{\partial \mathbf{q}}, \\ \frac{d\mathbf{q}}{dt} &= \frac{\partial H(\mathbf{p}, \mathbf{q}, t)}{\partial \mathbf{p}}.\end{aligned}\tag{3.4}$$

Quando a função Hamiltoniana é autônoma, ou seja, a mesma não possui uma dependência temporal explícita, o sistema em questão é dito conservativo. Sistemas conservativos são aqueles em que ocorre a preservação do volume no espaço de fase durante a evolução temporal, de acordo com o Teorema de Liouville [10, 23]. Isto significa dizer que, considerado um volume de condições iniciais no espaço de fase, com o passar do tempo, o mesmo se move de maneira que em um dado instante posterior, o volume ocupado por estas condições iniciais permanece inalterado. Além disso, o espaço de fase desses sistemas Hamiltonianos conservativos apresenta algumas características, tais como: (i) as trajetórias no espaço de fase não se interceptam em algum dado instante de tempo e (ii) considerando novamente a figura 3.1 para o caso onde $p = mv$, com m sendo a massa do sistema, uma fronteira no espaço de fase C_1 , a qual delimita um conjunto de condições iniciais no instante t_1 , irá transformar-se em uma fronteira C_2 no instante t_2 , a qual delimita o mesmo conjunto de condições iniciais.

Quando consideramos uma função Hamiltoniana autônoma, temos que a energia do sistema é conservada ao longo da trajetória, isto é, a energia é uma constante de movimento, $E = H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = (\text{constante})$ [24], pois,

$$\frac{dH}{dt} = \frac{d\mathbf{q}}{dt} \cdot \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} + \frac{d\mathbf{p}}{dt} \cdot \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \cdot \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} - \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \cdot \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} = 0.\tag{3.5}$$

As constantes de movimento são consequência direta de simetrias presentes no sistema. Por exemplo, em sistemas com simetria de translação ocorre a conservação do momento linear e em sistemas com simetria de rotação é o momento angular esta constante.

3.1.1 Sistemas Integráveis

De maneira geral, uma função $f(\mathbf{p}(t), \mathbf{q}(t))$ é uma constante de movimento se ela satisfaz a condição que seu parêntese de Poisson [10] com a função Hamiltoniana independente do tempo seja nulo,

$$[f, H] = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{q}} - \frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = 0. \quad (3.6)$$

As possibilidades da dinâmica de uma trajetória $(\mathbf{p}(t), \mathbf{q}(t))$ são restringidas pela existência de uma constante de movimento, pois esta deve seguir a superfície $f(\mathbf{p}(t), \mathbf{q}(t)) = \text{constante}$. O movimento será tanto mais limitado quanto mais constantes de movimento existirem. No caso em que um sistema Hamiltoniano autônomo possua N constantes de movimento independentes f_j , este é conhecido como um sistema integrável [24], ou seja, quando,

$$f_j(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = c_j = \text{constante}, \quad j = 1 \dots N, \quad (3.7)$$

em que uma das contantes f_j corresponde a própria função Hamiltoniana. Devido ao fato das constantes de movimento serem independentes, segue que

$$[f_j, f_k] = 0. \quad (3.8)$$

As condições 3.7 e 3.8 delimitam a dinâmica do sistema para uma superfície no espaço de fase, que possui topologia toroidal N -dimensional. Dado um sistema integrável, é possível realizar uma mudança de variáveis canônicas $(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \rightarrow (\bar{\mathbf{p}}, \bar{\mathbf{q}})$ tal que a nova Hamiltoniana \bar{H} dependa apenas da variável $\bar{\mathbf{p}}$. Um caminho para isso é tomar as próprias constantes de movimento como as N componentes de $\bar{\mathbf{p}}$, $\bar{p}_j = f_j(\mathbf{p}, \mathbf{q})$. Essa escolha é possível, pois como f_j são constantes, $d\bar{\mathbf{p}}/dt = \partial \bar{H} / \partial \bar{\mathbf{q}} = 0$ e portanto \bar{H} depende apenas de $\bar{\mathbf{p}}$. Outras escolhas são possíveis, e dentre elas uma especialmente conveniente são as variáveis ação-ângulo [10], denotadas por

$$(\bar{\mathbf{p}}, \bar{\mathbf{q}}) = (\mathbf{I}, \boldsymbol{\theta}), \quad (3.9)$$

em que \mathbf{I} é definido pela integral

$$I_i = \frac{1}{2\pi} \oint_{\gamma_i} \mathbf{p} \cdot d\mathbf{q} \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (3.10)$$

com γ_i correspondendo aos N caminhos diferentes topologicamente sobre o N -toro, cada um dos quais envolve-se ao redor do toro nas N direções angulares [21].

A nova Hamiltoniana em coordenadas ação-ângulo é então independente de $\boldsymbol{\theta}$ e, com isso,

as equações de Hamilton se reduzem a

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{I}}{dt} &= 0, \\ \frac{d\boldsymbol{\theta}}{dt} &= \frac{\partial \bar{H}(\mathbf{I})}{\partial \mathbf{I}} \equiv \boldsymbol{\omega}(\mathbf{I}), \end{aligned} \tag{3.11}$$

cujas soluções são

$$\begin{aligned} \mathbf{I}(t) &= \text{constante}, \\ \boldsymbol{\theta}(t) &= \boldsymbol{\theta}(0) + \boldsymbol{\omega}(\mathbf{I})t. \end{aligned} \tag{3.12}$$

Podemos interpretar $\boldsymbol{\omega}(\mathbf{I})$ como um vetor velocidade angular especificando trajetórias sobre o N -toro. Tomando o caso onde $N = 2$, no espaço de fase temos um toro definido pelas velocidades angulares ω_1 e ω_2 . Estas velocidades angulares são direções definidas pelas simetrias do toro e obtidas a partir das condições iniciais do sistema. O movimento do toro é uma combinação dos dois tipos de movimento periódico das diferentes frequências. A razão entre elas, $\nu \equiv \omega_1/\omega_2$ é conhecida como razão de frequências ou *winding number* e possui o mesmo valor sobre toda a superfície do toro, onde estamos considerando $\omega_1 < \omega_2$.

O movimento sobre um toro é fundamentalmente diferente quando consideramos razões de frequências racionais e irracionais. No caso racional, ou seja, quando podemos escrever $\nu = p/q$ (onde p e q são números naturais), o movimento sobre o toro descreve uma órbita, a qual irá retornar para o mesmo ponto inicial e uma órbita idêntica é traçada novamente, conforme nos mostra a figura 3.2 à esquerda. Essas órbitas são conhecidas por órbitas periódicas. Trajetórias começando em diferentes pontos sobre o toro irão realizar o mesmo movimento periódico e é preciso a união de todas as curvas para moldar a curva do mapa. Para uma relação de frequências

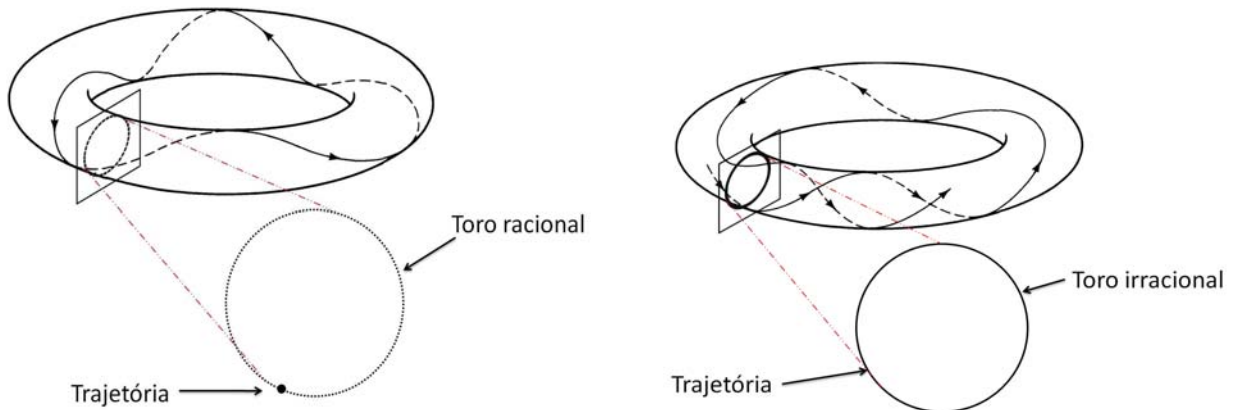


Figura 3.2: Representação de trajetória na seção de um toro racional (na figura de esquerda) e em um toro irracional (figura da direita).

irracional, o movimento não é periódico, e ele nunca retorna exatamente para a sua posição

inicial. Esse tipo de movimento é chamado de quase periódico. Uma única trajetória é suficiente para traçar a curva total do toro no mapa, conforme mostra a figura 3.2 à direita. Contudo, ainda assim existem retornos aproximados e que após uma média de $1/\nu$ iterações, a trajetória irá retornar para uma vizinhança próxima da sua posição inicial, por isso são chamados quase periódicos. Para um N-toro, as trajetórias são N frequências quase periódicas, a não ser que exista um vetor de números inteiros $\mathbf{m} = (m_1, m_2, m_3 \dots, m_N)$ tal que,

$$\mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\omega} = 0. \quad (3.13)$$

A caracterização dos toros irracionais ou quase periódicos depende de quão irracionais são suas razões de frequência. Usando teoria de números [25, 26], podemos determinar a irracionalidade de um número por meio do uso de frações contínuas. Para um número R qualquer temos

$$R = \frac{1}{a_1 + \frac{1}{a_2 + \frac{1}{a_3 + \dots}}}, \quad (3.14)$$

com os a_s sendo números naturais. Essa expansão é única e representa como poderemos encontrar um número irracional a partir de números racionais. Os números ditos mais irracionais são aqueles que possuem a convergência mais lenta em 3.14. Como curiosidade, o número que converge mais devagar utilizando frações parciais corresponde ao número de ouro e o seu valor é $\alpha = \frac{\sqrt{5}-1}{2}$ [24].

3.2 O Teorema KAM

Na seção anterior foi mostrado que para sistemas integráveis [22] o espaço de fase é completamente preenchido por toros invariantes e que, devido às condições iniciais, alguma trajetória irá permanecer sobre um toro particular [22, 24]. O surgimento de cada um desses toros, conforme foi visto, é baseado na existência de N integrais de movimento independentes entre si, sendo que cada toro é resultado de uma condição inicial diferente. Entretanto, quando ocorre o acréscimo de uma pequena perturbação ϵH_1 na Hamiltoniana do sistema integrável H_0 ,

$$H(\bar{q}, \bar{p}) = H_0(\bar{q}, \bar{p}) + \epsilon H_1(\bar{q}, \bar{p}) \quad (3.15)$$

é esperado que os toros do sistema integrável sejam destruídos. No entanto, não é isso que ocorre. O que realmente acontece foi elucidado pelo teorema KAM (Kolmogorov-Arnold-Moser), primeiramente conjecturado por Andrey Kolmogorov (1954) e provado sob diferentes restrições por Vladimir Arnold (1963) e Jürgen Moser (1962). O teorema KAM afirma que, mesmo para sistemas que sofreram pequenas perturbações relativas às suas formas integráveis (equação

(3.15)), ainda assim, superfícies invariantes, as quais não são necessariamente as constantes de movimento, continuam a existir para a maioria das condições iniciais. Entretanto, as respostas geradas por toros racionais e irracionais em meio a efeitos perturbativos diferem fundamentalmente [22]. Mais especificamente, esse teorema afirma que os toros racionais são os primeiros a serem destruídos, seguidos pelos toros irracionais, sendo que os toros mais irracionais são os últimos a serem destruídos.

É esperado que ocorra um maior acoplamento entre a perturbação e todos os toros racionais e também nas vizinhanças dos toros irracionais. Devido a isso ocorre à destruição primeiramente dos toros racionais, e por este fato tais toros também são conhecidos por toros ressonantes. Nenhuma curva invariante similar à original permanece nas vizinhanças dos toros destruídos, e o movimento já não pode ser quase periódico em todo lugar. Essas são as regiões nas quais o caos aparece.

Podemos definir caos como um movimento irregular (não periódico) devido a natureza não linear do sistema. Ou seja, em um sistema com comportamento caótico, a solução de condições iniciais próximas divergem exponencialmente [24]. Logo, a resposta do sistema é extremamente não linear. Então, a estabilidade de um toro contra a perturbação depende se a dinâmica sobre ele é suficientemente aperiódica, isto é, se o toro é suficientemente irracional.

As condições necessárias para a validade do teorema KAM, podem ser resumidas em [10, 23]:

1. as frequências devem ser incomensuráveis, ou seja, deve ser válida a independência linear das frequências, $\mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\omega} \neq 0$;
2. a perturbação deve ser suave, ou seja, deve existir um número suficiente de derivadas contínuas de H_1 ;
3. as condições iniciais devem ser suficientemente afastadas da ressonância, na qual $\mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\omega} = 0$, de modo a satisfazer $|\mathbf{m} \cdot \boldsymbol{\omega}| \geq \gamma |\mathbf{m}|^{-\tau}$,

para todos os valores de \mathbf{m} . A variável τ depende do número de graus de liberdade do sistema e da suavidade de H_1 , e γ é dependente da perturbação ϵ .

Da condição 3, considerando agora o caso bidimensional ($N = 2$) temos que os toros que não são destruídos pela perturbação são aqueles que satisfazem a seguinte inequação [22, 24]:

$$\left| \nu - \frac{r}{s} \right| > \frac{K(\epsilon)}{s^{\frac{5}{2}}}, \quad (3.16)$$

com ν representando a razão de duas frequências diferentes ω_1 e ω_2 e sendo conhecido como razão de frequências ou *winding number* e a razão r/s corresponde a uma aproximação racional qualquer próxima de ν . A constante K depende somente da intensidade da perturbação ' ϵ ' e tende a zero no limite quando $\epsilon \rightarrow 0$. Os toros racionais e os irracionais, em que a razão de frequências pode ser aproximada por números racionais, não sobrevivem. Sobrevivem apenas

os mais irracionais, nos quais a razão de frequências pode ser aproximada por números mais irracionais possíveis (ver seção 3.1.1). Os toros remanescentes são frequentemente chamados de toros KAM [22]. De acordo com a condição (3.16), no intervalo de razão de frequências $(0, 1]$ existe uma banda de largura $2K(\epsilon)s^{-5/2}$ nas vizinhanças de todo número racional r/s , em que as perturbações geralmente destroem todos os toros. A figura (3.3) nos ajuda a visualizar para quais razões de frequências os toros são primeiramente destruídos e os que sobrevivem à perturbação para um sistema satisfazendo a segunda condição dada pelo teorema KAM. Os segmentos claros nesta figura correspondem às razões nas quais os toros são destruídos, sendo que os primeiros toros racionais destruídos correspondem a segmentos maiores na figura representativa. De maneira similar, os segmentos em preto representam as razões de frequências mais irracionais, que estão relacionadas aos últimos toros destruídos, ou seja, os toros irracionais. Apesar de termos vários valores possíveis para o denominador s ($r = 1, 2, \dots, s$), para os quais uma infinidade de toros e suas vizinhanças são destruídos, vemos por essa figura que ainda assim, a maioria dos toros sobrevive para pequenos valores de ϵ , neste caso com $K = 0, 2$. A figura ilustra bem as zonas destruídas para as mais importantes ressonâncias r/s , isto é, aquelas para pequenos denominadores ($s = 2, \dots, 7$).

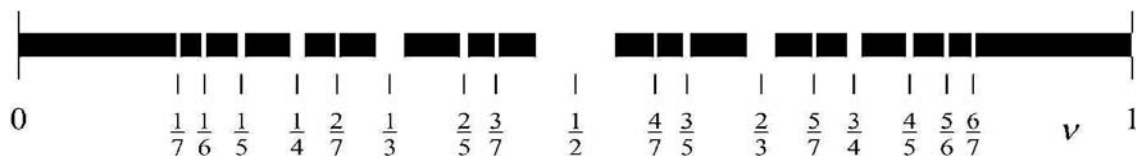


Figura 3.3: Zonas não destruídas de comprimento $K/s^{5/2}$ (em preto) para a razão de frequência racional r/s com $K = 0, 2$. Imagem extraída da referência [22].

Este comportamento da razão entre as frequências reflete fielmente o que acontece no espaço de fase. Os toros sobreviventes preenchem uma larga porção do espaço de fase total. Para pequenos valores de ϵ , o volume do espaço de fase dos toros destruídos é pequeno, mas não nulo, o que implica dizer que o caos pode aparecer devido a uma arbitrária e fraca perturbação externa sobre o sistema originariamente não caótico.

3.2.1 Os toros ressonantes e caos microscópico

Consideramos agora um toro racional em que a relação entre as frequências possua a forma $\nu = r/s$. Cada ponto do toro é um ponto fixo do mapa 's' vezes iterado com relação ao mapa não perturbado. Em geral a relação entre as frequências muda continuamente e portanto, no lado mais exterior de toros racionais, existem toros com razão de frequências maiores que ν (ver a inequação 3.16). Selecionamos então um toro fortemente irracional nas imediações dos toros racionais conforme indicado na figura 3.4. A figura 3.4 (a) corresponde a um sistema integrável. A curva no meio corresponde a um toro racional com relação entre frequências

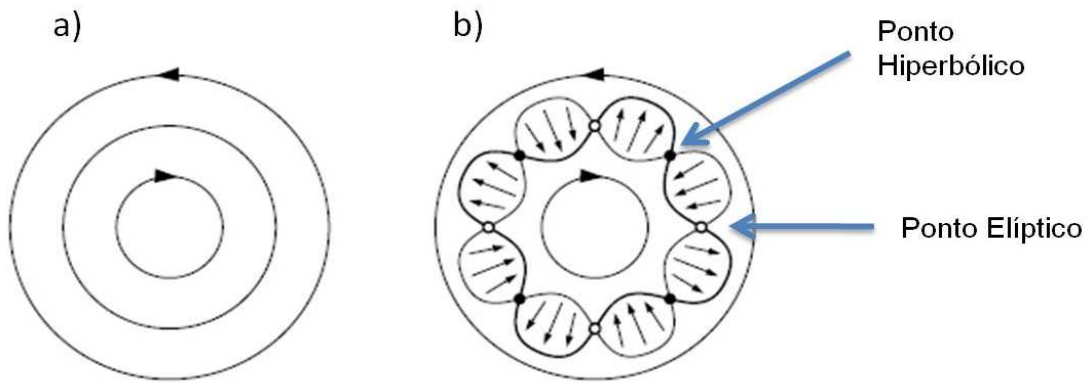


Figura 3.4: As vizinhanças de um toro racional ressonante.

$\nu = r/s$. As curvas interna e externa representadas com setas são toros irracionais. As setas marcam a direção de deslocamento sobre o mapa 's' vezes iterado. Em (b) apresentamos um sistema perturbado. A fina linha interna representa uma curva que move-se sobre o mapa perturbado somente na direção radial, como marcado pelas setas. A linha mais escura é a imagem desta linha fina e os pontos de intersecção das duas curvas são pontos fixos. As curvas mais internas e mais externas representam os toros irracionais sobreviventes, ou seja, os toros KAM. Verificamos assim que, no mapa 's' vezes iterado os pontos exteriores do toro irracional movem-se no sentido anti-horário, como indicado na figura 3.4. Pelo teorema KAM sabemos que para pequenas perturbações, os toros irracionais permanecem como curvas invariantes (e tornam-se suavemente deformadas), porque suas direções de voo não mudam. O toro racional é destruído e não gera uma curva invariante. Por continuidade, nas vizinhanças da localização original do toro devem existir pontos nos quais não há rotações, inclusive na presença de uma perturbação. Esses pontos podem somente se mover radialmente sobre a ação do mapa 's' vezes iterado. A união de todos esses pontos (uma curva não invariante) é marcada por uma linha fina sólida na figura 3.4(b). Devido a preservação da área, a imagem desta curva deve ser uma

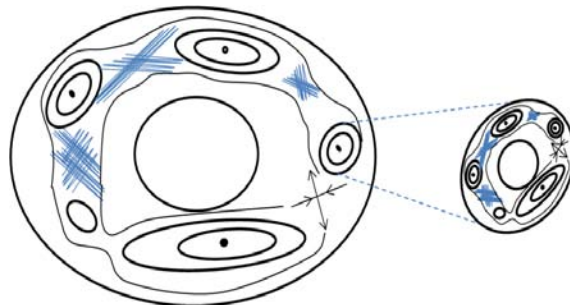


Figura 3.5: Resultado da destruição de um toro ressonante: surge uma corrente de pontos elípticos e hiperbólicos onde os movimentos quase periódico e caótico dominam. Somente alguns poucos de todos os desdobramentos oscilantes são mostrados.

curva que intercepta a curva original. Os pontos de intersecção são os pontos fixos do mapa perturbado 's' vezes iterado. A estabilidade dos pontos fixos pode ser lida dos deslocamentos da setas nos arredores dos pontos de intersecção e a direção do movimento ao longo dos toros preservada. O que permanece de um toro racional destruído é um conjunto de pontos elípticos e hiperbólicos alternados seguindo um ao outro conforme mostra a figura 3.5. Este fato é conhecido por Teorema de Poincaré-Birkhoff [23].

Na figura 3.6 apresentamos pontos fixos elípticos e hiperbólicos. As trajetórias próximas para estes pontos denominados como elípticos, pontos com $\nu \neq r/s$ tendem a circular o ponto fixo, enquanto que pontos denominados hiperbólicos, após sucessivas iterações tendem a divergir a trajetória relativamente ao ponto fixo.

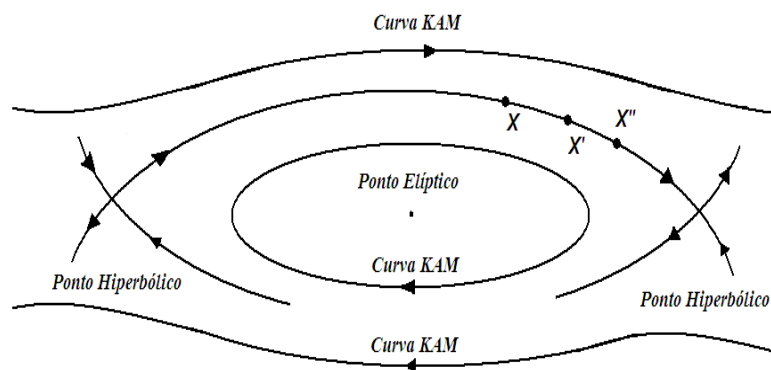


Figura 3.6: Pontos elípticos e hiperbólicos.

Os pontos elípticos [23] nos permitem investigar sistematicamente regiões sucessivamente menores do movimento regular no espaço de fase. Além disso, a análise detalhada de uma órbita elíptica nas vizinhanças do ponto fixo revela um grupo de ressonâncias de ordens maiores ou pontos fixos, os quais tem seus próprios movimentos similares para aqueles analisados em uma escala maior. Se a perturbação original para um sistema integrável é pequena, a maioria do espaço é preenchida com curvas KAM que são topologicamente similares para as curvas integráveis. No espaço remanescente das regiões topologicamente modificadas nas redondezas dos pontos fixos elípticos, novas curvas KAM existem, e essas preenchem uma porção igualmente larga do espaço remanescente.

É na vizinhança dos pontos fixos hiperbólicos que a dinâmica caótica pode ser observada primeiramente. Com o aumento da perturbação ϵ , as zonas destruídas crescem, e as áreas preenchidas com orbitas caóticas no espaço de fase aumentam. O mar caótico é, inicialmente, ainda envolvido por toros invariantes intactos. Com o acréscimo de ϵ um número crescente de toros invariantes é destruído, dependendo da irracionalidade da razão de frequências. Os últimos toros invariantes são, na maioria dos casos, os chamados toros nobres, nos quais a razão de frequências é, em algum senso, a mais irracional possível. Para grandes perturbações

são encontradas largas e extensas regiões caóticas. Somente pequenas ilhas rodeadas por curvas invariantes permanecem, as quais são encaixadas em um mar caótico. Algumas vezes, essas ilhas, por fim, desaparecem e o sistema torna-se ergódico, ou seja, quase todas as trajetórias vão arbitrariamente próximas para algum ponto sobre a superfície de energia.

3.3 Seções de Poincaré

De maneira geral a análise de um espaço de fase pode se tornar extremamente complicada devido a dimensionalidade do sistema e nem sempre as propriedades físicas são facilmente reconhecidas usando tal descrição. Uma das maneiras para facilitar essa análise é atribuída ao matemático Henri Poincaré, o qual demonstrou de uma forma elegante como extrair as informações da dinâmica de um sistema a partir de uma visão estroboscópica das trajetórias no espaço de fase conhecido por Seções de Poincaré [21, 23, 24]. Esse método é largamente utilizado para o estudo de fluxos Hamiltonianos, pois além de facilitar na interpretação da dinâmica do sistema, simplifica um fluxo para um mapa discreto, reduz a dimensionalidade do sistema de N para $N-1$ toros e, para sistemas de baixa dimensionalidade, a integração numérica das equações diferenciais do problema expõem em uma forma simples a dinâmica global do sistema.

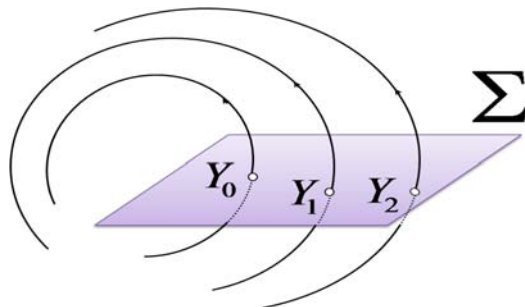


Figura 3.7: Esquema representativo das trajetórias atravessando uma seção de Poincaré.

Esse método consiste em gerar uma superfície no espaço de fase conforme mostra a figura 3.7 e, ao invés de utilizar todo o espaço de fase do sistema dinâmico, utiliza-se somente os pontos da trajetória os quais estão contidos nesse plano. Dessa maneira, estudando somente os pontos de intersecção da trajetória com o plano, obtemos as informações referentes a formação de pontos fixos, a possível formação de caos sobre os sistemas perturbados e como varia essa dinâmica com relação aos parâmetros de controle do sistema dinâmico. Para um sistema que possui dois graus de liberdade, como por exemplo para uma Hamiltoniana $H(p_x, p_y, x, y)$, podemos usar uma superfície de Poincaré, no espaço de fase com $y = 0$, e realizarmos uma análise para um dado ponto inicial (p_x, x) da trajetória. O valor de p_y é determinado unicamente pelas coordenadas iniciais $H(p_x, p_y, x, y)$ por meio da relação $p_y = \pm 2m(E - p_x^2 - V(x, 0))^{1/2}$. Portanto, definindo

uma iteração no mapa de Poincaré como

$$S_s = (p_{x_s}, x_s) \rightarrow (p_{x_{s+1}}, x_{s+1}) = S_{s+1}, \quad (3.17)$$

com s sendo a iteração com a superfície, podemos definir o conjunto de todos os pontos de intersecção com a superfície de forma

$$T^n(p_{x_0}, x_0) = T \circ T \circ \dots \circ T(p_{x_0}, x_0). \quad (3.18)$$

Em que n denota o número de vezes que a trajetória intercepta o plano.

Órbitas para as quais é válido que $T^k(p_{x_0}, x_0) = (p_{x_0}, x_0)$, são denominadas k -periódicas e estas aparecem como um conjunto de k pontos discretos no mapa. As trajetórias irracionais ou órbitas quase periódicas aparecem como curvas fechadas, as quais representam a intersecção de um toro invariante e a seção de Poincaré [24]. No caso de um sistema integrável em uma energia fixa E , a superfície de secção é preenchida por uma família de curvas invariantes, ou seja, curvas invariantes sobre um gráfico de Poincaré. Um contável número dessas curvas invariantes é preenchido por órbitas, as quais são periódicas na seção de Poincaré. Também, quando tratamos um sistema Hamiltoniano perturbado, quando a intensidade de ϵ aumenta, surge no mapa de Poincaré um mar caótico o qual é representado por uma densidade elevada de pontos não localizados, ou seja, sem a presença de um padrão .

Capítulo 4

Resultados

4.1 A Hamiltoniana escalonada

Para analisar a dinâmica proveniente da interação coulombiana entre dois átomos de Rydberg, utilizamos um modelo clássico unidimensional, que considera dois átomos hidrogenóides no estado de Rydberg, com seus núcleos separados por uma distância R . Tal descrição é válida somente quando são assumidos, em cada um dos átomos, pacotes de onda eletrônicos localizados nas coordenadas radiais e angulares. Uma representação esquemática do sistema a ser analisado é apresentada na figura 4.1, onde podemos também observar que as variáveis x e y correspondem às distâncias entre a origem do sistema (que está a meia distância entre os núcleos) e cada um dos elétrons.

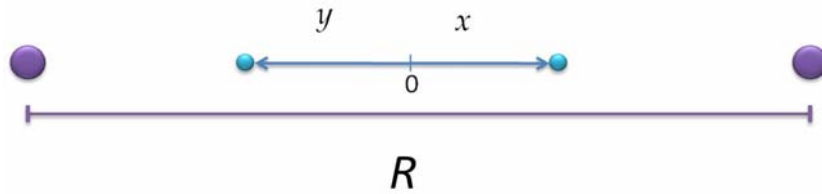


Figura 4.1: Esquema do sistema analisado. Os núcleos dos átomos de Rydberg estão separados por uma distância R , enquanto que os elétrons se encontram à distância x e y do centro do sistema, considerado aqui como posição 0.

A função Hamiltoniana para esse sistema, considerando unidades atômicas ($m \equiv e \equiv \hbar \equiv 1$), é dada por:

$$H = \frac{p_x^2}{2} + \frac{p_y^2}{2} - \frac{Z}{|x - \frac{R}{2}|} - \frac{Z}{|y + \frac{R}{2}|} + \frac{1}{|x - y|} - \frac{Z}{|x + \frac{R}{2}|} - \frac{Z}{|y - \frac{R}{2}|}, \quad (4.1)$$

em que os dois primeiros termos à direita da igualdade correspondem à energia cinética, os dois seguintes representam o potencial atrativo de interação coulombiana de cada elétron com

o seu respectivo núcleo, o termo seguinte é referente a interação de repulsão coulombiana entre os dois elétrons, e os dois últimos termos caracterizam a interação de atração de cada elétron com o núcleo do outro átomo. Essa Hamiltoniana corresponde a interação clássica entre os dois átomos.

Por outro lado, como estamos empregando um modelo unidimensional, precisamos evitar a singularidade do potencial de Coulomb na origem. Para tal, utilizamos o modelo conhecido na literatura como *soft core model* [27]-[30], que pode ser escrito de maneira genérica no caso unidimensional como

$$V(a; x) = -\frac{1}{(a^2 + x^2)^{1/2}}, \quad (4.2)$$

no qual o parâmetro a é introduzido de forma a remover a singularidade na origem. Uma importante propriedade desse potencial deve-se ao fato que para valores grandes de x , o mesmo tende para $1/x$, e conseqüentemente os níveis de energia correspondem aos níveis de Rydberg, em contraste a potenciais de curto alcance que suportam apenas um número finito de estados [28]. Este modelo tem sido aplicado em estudos envolvendo sistemas de dois elétrons em campos de radiação intensos [27] e principalmente no estudo numérico de processos de ionização por multifótons [31, 32]. A desvantagem em se empregar este modelo reside no fato que a introdução do parâmetro a corresponde à um desvio no valor do potencial no problema original. Maiores detalhes das propriedades do potencial e sua análise matemática podem ser encontrados nas referências [28] e [29].

No nosso sistema, suprimimos o parâmetro a do termo de interação entre os elétrons com o intuito de evitar mais uma fonte de erro a ser considerada no problema. Assim, temos que a Hamiltoniana da equação 4.1 pode ser escrita como

$$H = \frac{p_x^2}{2} + \frac{p_y^2}{2} - \frac{Z}{\sqrt{(x - \frac{R}{2})^2 + a^2}} - \frac{Z}{\sqrt{(y + \frac{R}{2})^2 + a^2}} + \frac{1}{\sqrt{(x - y)^2}} - \frac{Z}{\sqrt{(x + \frac{R}{2})^2 + a^2}} - \frac{Z}{\sqrt{(y - \frac{R}{2})^2 + a^2}}. \quad (4.3)$$

Uma vez escrita a Hamiltoniana conforme 4.3, inserimos a dependência desta com relação ao número quântico principal n , por meio de coordenadas escalonadas,

$$\begin{aligned} \tilde{x} &= \frac{x}{n^2} \\ \tilde{y} &= \frac{y}{n^2} \\ \tilde{R} &= \frac{R}{n^2} \\ a &= n^2. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Com isso, a Hamiltoniana de 4.3 torna-se:

$$H = n^2 \left(\frac{p_{\tilde{x}}^2}{2} + \frac{p_{\tilde{y}}^2}{2} \right) + \frac{Z}{n^2} \left[-\frac{1}{\sqrt{(\tilde{x} - \frac{\tilde{R}}{2})^2 + 1}} - \frac{1}{\sqrt{(\tilde{y} + \frac{\tilde{R}}{2})^2 + 1}} + \frac{1/Z}{\sqrt{(\tilde{x} - \tilde{y})^2}} - \frac{1}{\sqrt{(\tilde{x} + \frac{\tilde{R}}{2})^2 + 1}} - \frac{1}{\sqrt{(\tilde{y} - \frac{\tilde{R}}{2})^2 + 1}} \right]. \quad (4.5)$$

Definimos então uma nova Hamiltoniana como

$$\tilde{H} = \frac{n^2}{Z} H \quad (4.6)$$

e realizamos uma renormalização temporal de forma a eliminar a dependência de n nos termos relativos a energia cinética (na Hamiltoniana escalonada)

$$\frac{d\zeta}{dt} = \frac{\sqrt{Z}}{n^3}, \quad (4.7)$$

obtendo assim a Hamiltoniana escalonada para o sistema:

$$\tilde{H} = \frac{p_{\tilde{x}}^2}{2} + \frac{p_{\tilde{y}}^2}{2} - \frac{1}{\sqrt{(\tilde{x} - \frac{\tilde{R}}{2})^2 + 1}} - \frac{1}{\sqrt{(\tilde{y} + \frac{\tilde{R}}{2})^2 + 1}} + \frac{1/Z}{\sqrt{(\tilde{x} - \tilde{y})^2}} - \frac{1}{\sqrt{(\tilde{x} + \frac{\tilde{R}}{2})^2 + 1}} - \frac{1}{\sqrt{(\tilde{y} - \frac{\tilde{R}}{2})^2 + 1}}, \quad (4.8)$$

a qual pode ser reescrita como a soma do termo relativo à energia cinética com o termo referente à energia potencial,

$$\tilde{H} = K + V(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{R}; Z). \quad (4.9)$$

Analisando a equação 4.8, percebemos que o resultado obtido, mediante o escalonamento, independe explicitamente do número quântico principal do átomo considerado.

Por outro lado, sabemos que a energia de um átomo hidrogenóide, em unidades atômicas, é dada aproximadamente por $E = -Z/2n^2$. Dessa forma, para dois átomos a energia pode ser escrita como:

$$E = H = 2 \times \left(-\frac{Z}{2n^2} \right) = -\frac{Z}{n^2}. \quad (4.10)$$

Com isso, a Hamiltoniana escalonada de 4.9 pode ser reescrita com a ajuda da equação 4.6 como segue

$$\tilde{H} = K + V(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{R}; Z) \equiv -1. \quad (4.11)$$

Como passo seguinte, realizamos uma aproximação harmônica do potencial $V(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{R}; Z)$

em torno dos pontos $\tilde{x} = \tilde{x}_0 = \tilde{R}/2$ e $\tilde{y} = \tilde{y}_0 = -\tilde{R}/2$, na qual desconsideramos termos de ordem superior a 3.

$$\begin{aligned}
V(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{R}; Z) &\sim V_0 \left[\left. + \frac{\partial V}{\partial \tilde{x}} \right|_{\tilde{x}=\tilde{x}_0} (\tilde{x} - \tilde{x}_0) + \left. \frac{\partial V}{\partial \tilde{y}} \right|_{\tilde{y}=\tilde{y}_0} (\tilde{y} - \tilde{y}_0) \right. \\
&+ \frac{1}{2!} \left[\left. \frac{\partial^2 V}{\partial \tilde{x}^2} \right|_{\tilde{x}=\tilde{x}_0} (\tilde{x} - \tilde{x}_0)^2 + 2 \left. \frac{\partial^2 V}{\partial \tilde{x} \partial \tilde{y}} \right|_{\tilde{x}=\tilde{x}_0} (\tilde{x} - \tilde{x}_0)(\tilde{y} - \tilde{y}_0) + \left. \frac{\partial^2 V}{\partial \tilde{y}^2} \right|_{\tilde{y}=\tilde{y}_0} (\tilde{y} - \tilde{y}_0)^2 \right] \\
&\left. + \frac{1}{3!} \left[\left. \frac{\partial^3 V}{\partial \tilde{x}^3} \right|_{\tilde{x}=\tilde{x}_0} (\tilde{x} - \tilde{x}_0)^3 + \left. \frac{\partial^3 V}{\partial \tilde{x}^2 \partial \tilde{y}} \right|_{\tilde{x}=\tilde{x}_0} (\tilde{x} - \tilde{x}_0)^2 (\tilde{y} - \tilde{y}_0) + \dots \right] \quad (4.12)
\end{aligned}$$

Devido a isto, o potencial perde sua simetria inicial, tornando-se agora assimétrico. Em seguida, escrevemos o resultado nas coordenadas de centro de massa $\xi = (\tilde{x} + \tilde{y})/2$ e relativa $\eta = (\tilde{x} - \tilde{y})/2$ do sistema. Fazendo isso, obtemos para a interação eletrônica aproximada um potencial do tipo Hénon-Heiles [33], porém com um termo linear adicional, $C\eta$:

$$V(\xi, \eta; \tilde{R}, Z) \approx V_0 + A\xi^2 + B\eta^2 + C\eta + D\xi^2\eta + F\eta^3. \quad (4.13)$$

Os termos proporcionais a A e B são relacionados ao movimento harmônico nas coordenadas do centro de massa ξ e relativa η , o que corresponde a descrição aproximada de dois pêndulos acoplados à pequenos ângulos. O termo proporcional a D é responsável pelo acoplamento entre os dois pêndulos. E juntamente com o termo proporcional a F , o aparecimento de movimento caótico pode ser entendido. Entretanto, diferentemente do potencial de Hénon-Heiles, no qual os parâmetros possuem valores constantes, no potencial obtido os parâmetros possuem dependência com o número atômico Z , e com a distância escalonada entre os núcleos, \tilde{R} , dependência esta que é dada em cada caso por

$$V_0(\tilde{R}, Z) = -\frac{2}{\sqrt{\tilde{R}^2 + 1}} + \frac{1}{Z\tilde{R}} - 2, \quad (4.14)$$

$$A(\tilde{R}) = \frac{-2\tilde{R}^2 + 1}{\sqrt{(\tilde{R}^2 + 1)^5}} + 1, \quad (4.15)$$

$$B(\tilde{R}, Z) = \frac{-2\tilde{R}^2 + 1}{\sqrt{(\tilde{R}^2 + 1)^5}} + \frac{4}{Z\tilde{R}^3} + 1, \quad (4.16)$$

$$C(\tilde{R}, Z) = -2 \left(\frac{-\tilde{R}}{\sqrt{(\tilde{R}^2 + 1)^3}} + \frac{1}{Z\tilde{R}^2} \right), \quad (4.17)$$

$$D(\tilde{R}, Z) = - \left[\frac{-2\tilde{R}^3 + 3\tilde{R}}{\sqrt{(\tilde{R}^2 + 1)^7}} + \frac{8}{Z(\tilde{R}^2 + 1)} \left(\tilde{R}^2 + 3 + \frac{3}{\tilde{R}^2} + \frac{1}{\tilde{R}^4} \right) \right], \quad (4.18)$$

$$F(\tilde{R}) = \frac{3\tilde{R}(2\tilde{R}^2 - 3)}{\sqrt{(\tilde{R}^2 + 1)^7}}. \quad (4.19)$$

4.2 Comportamento dos Parâmetros e do Potencial de Interação

Para toda a análise realizada estamos considerando átomos de Hidrogênio, ou seja, $Z = 1$. Primeiramente plotamos a dependência de cada um dos parâmetros ($A - F$) com \tilde{R} no intervalo $[0, 9; 3, 0]$, conforme figura 4.2.

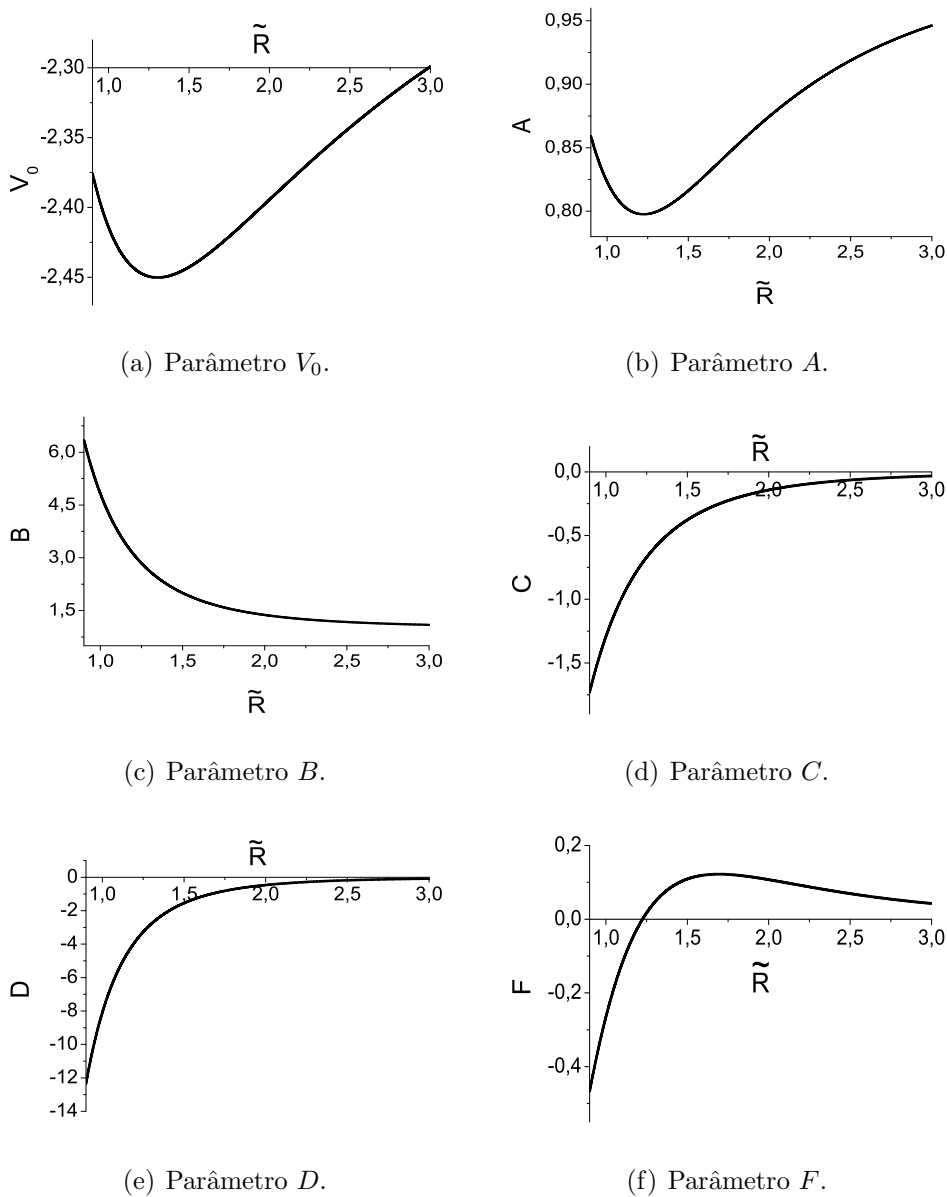
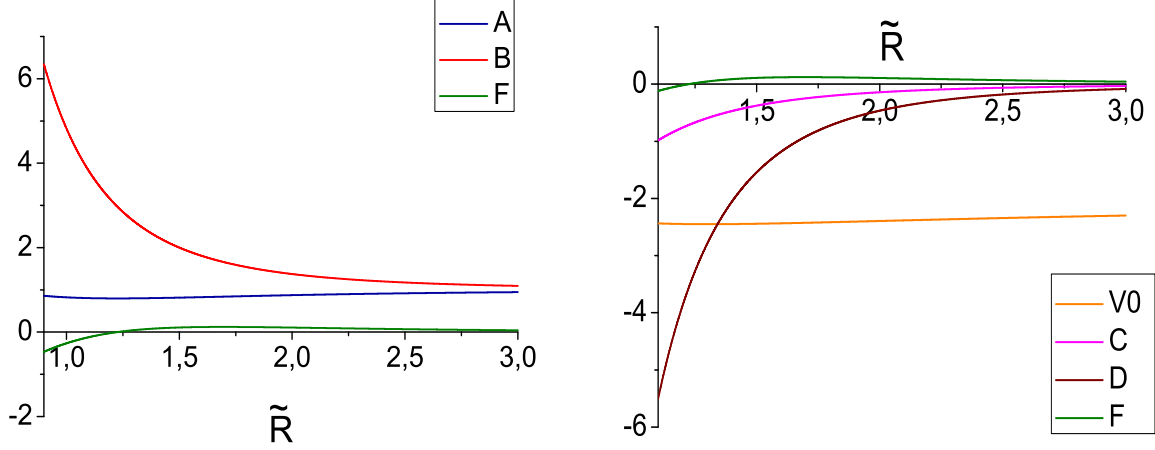


Figura 4.2: Gráfico dos parâmetros em função de \tilde{R} .

Em seguida, plotamos os parâmetros com intensidades similares no mesmo gráfico, figura 4.3, no qual percebemos que para valores em torno de $\tilde{R} > 2,5$ o movimento no sistema torna-se predominantemente harmônico, pois os termos que representam a perturbação na Hamiltoniana tendem a zero, enquanto que os valores de A e B convergem para 1. Em outras palavras, o sistema dos dois átomos interagindo aproxima-se para uma Hamiltoniana com dinâmica regular quando \tilde{R} grande.



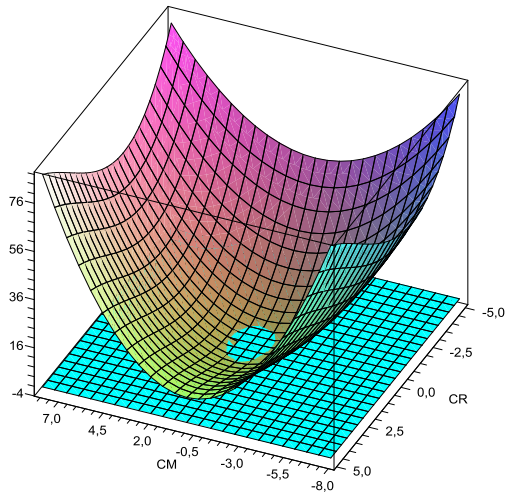
(a) Parâmetros A , B e F .

(b) Parâmetros V_0 , C , D e F .

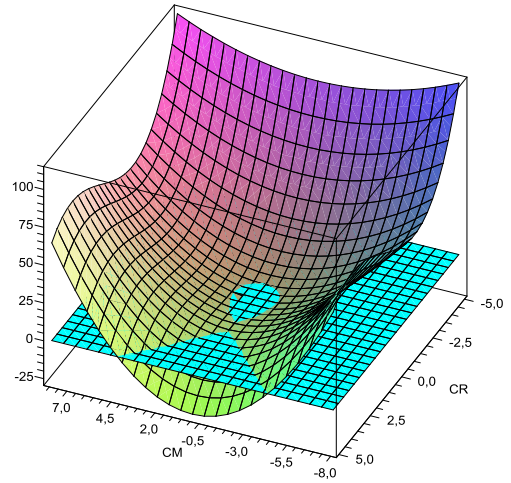
Figura 4.3: Comparação dos parâmetros de intensidade semelhante.

Uma vez obtido o comportamento dos parâmetros em função de \tilde{R} , podemos agora fixar o valor da distância \tilde{R} e então observar o comportamento do potencial (equação 4.13) em função das coordenadas relativa η (indicada nos gráficos da figura 4.4 por CR) e de centro de massa ξ (indicada nos gráficos da figura 4.4 por CM). Juntamente a isto investigamos a possível formação de estados ligados no sistema. Uma vez que a energia total do sistema possui valor $E = -1$, conforme equação 4.11, procuramos a formação de estados ligados para valores do potencial $V(\xi, \eta; \tilde{R}, Z = 1) \leq -1$. Por isso, além da superfície do potencial de interação, plotamos no mesmo gráfico uma superfície para um potencial constante e igual a -1 (representada pelo plano azul claro), que corresponde a superfície na qual a energia cinética é nula, ou seja, esta superfície representa o valor máximo do potencial a ser analisado para que ocorram estados ligados no sistema, quando a energia é constante em -1 .

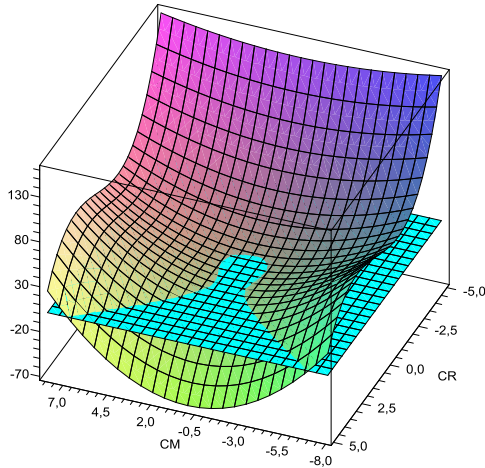
Assim sendo, apresentamos na figura 4.4 o comportamento do potencial de interação para quatro valores de \tilde{R} distintos, os quais representam de maneira geral os possíveis formatos do potencial no intervalo de \tilde{R} considerado na análise de parâmetros. Conforme observado anteriormente na análise dos parâmetros, temos que para valores em torno de $\tilde{R} > 2,50$ o potencial é praticamente harmônico, o que também é facilmente identificado na figura 4.4(a), em que apresentamos o comportamento do potencial para $\tilde{R} = 2,70$. Quando os dois átomos se aproxi-



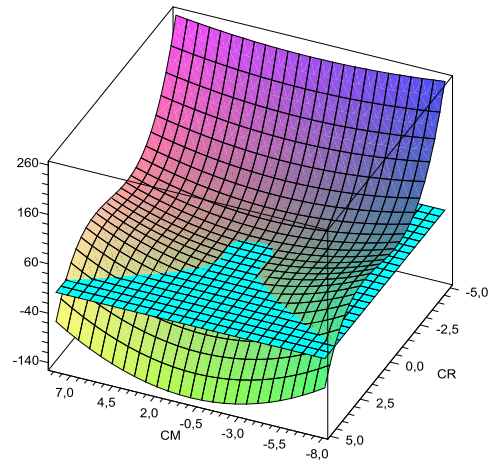
(a) Potencial para $\tilde{R} = 2, 70$.



(b) Potencial para $\tilde{R} = 2, 00$.



(c) Potencial para $\tilde{R} = 1, 73$.



(d) Potencial para $\tilde{R} = 1, 50$.

Figura 4.4: Comportamento do potencial de interação para valores de \tilde{R} .

mam, ou seja, diminuindo \tilde{R} , observamos que os valores dos parâmetros de perturbação (C , D e F) começam a ficar mais significativos e conseqüentemente o formato da superfície potencial começa a deformar. Com a influência destes parâmetros de perturbação, o que observamos é um potencial do tipo sela, o qual apresenta equilíbrio estável na coordenada de centro de massa (ξ), enquanto que na coordenada relativa (η) o potencial possui equilíbrio instável, sendo esta uma rota de escape. Na figura 4.4(b) já é observado este potencial do tipo sela e a superfície em azul claro delimita a região que contém estados ligados da região de escape. Percebemos também que para valores cada vez menores de \tilde{R} , figuras 4.4 (c) e (d), o potencial de interação deforma-se e a região que contém estados ligados começa a diminuir até tornar-se praticamente

inexistente.

4.3 Dinâmica Eletrônica na Interação entre os Átomos de Rydberg

Realizado o estudo do comportamento dos parâmetros e do potencial de interação na seção anterior, iniciamos agora a análise da dinâmica eletrônica na interação dos dois átomos de Rydberg. Nesta seção, estudamos os possíveis comportamentos gerados da interação entre os átomos, conforme estes se aproximam, mediante análise de seções de Poincaré e espaço de fase. Estes foram obtidos numericamente mediante a resolução das equações de Hamilton pelo método de Runge-Kutta de quarta ordem.

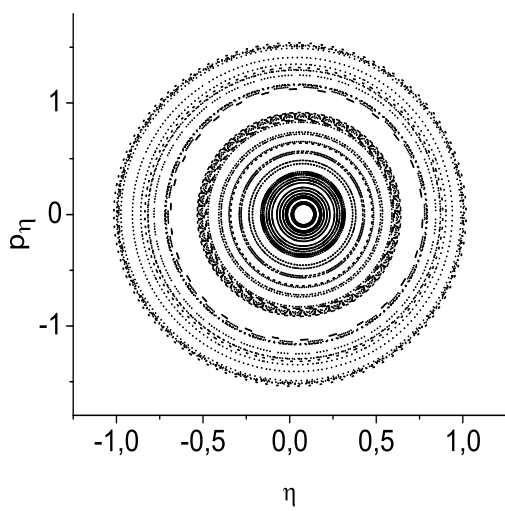
Inicialmente apresentamos a análise das seções de Poincaré para energia total do sistema constante e estudamos a dinâmica variando a distância escalonada \tilde{R} entre os núcleos. A principal vantagem em utilizar as seções de Poincaré para este sistema deve-se ao fato que podemos reduzir o problema inicial, composto por quatro equações de movimento, para um sistema de três equações, por meio do vínculo de que a energia total é uma constante de movimento. Dessa forma, a dinâmica permanece restrita a uma superfície de energia tridimensional. Consequentemente, nas seções de Poincaré geradas, as trajetórias são analisadas em um espaço bidimensional. Além disso, as seções de Poincaré nos mostram indícios gerais dos diversos aspectos presentes na dinâmica, para um dado conjunto de condições iniciais. Em seguida, para nos auxiliar na interpretação dos resultados obtidos pelas seções de Poincaré, retornamos então às variáveis escalonadas do problema original, \tilde{x} e \tilde{y} , as quais representam a distância do centro do pacote de onda eletrônico até a posição do ponto médio entre os dois núcleos e assim estudamos suas trajetórias evoluindo no espaço de fase. Essas análises mostram de forma completa o comportamento global das possíveis dinâmicas de interação descritas em nosso modelo.

A seção de Poincaré utilizada foi escolhida de forma a ajustar a dependência do potencial com relação a variável do centro de massa ξ para $\xi = 0$ e assim computamos os pontos de intersecção das trajetórias com a seção quando $p_\xi > 0$. As seções de Poincaré foram obtidas para um conjunto entre 50 e 200 condições iniciais aleatórias evoluindo temporalmente até um tempo $t = 1000$. Para todas as seções de Poincaré obtidas consideramos a energia total do sistema fixa em $E = -1$.

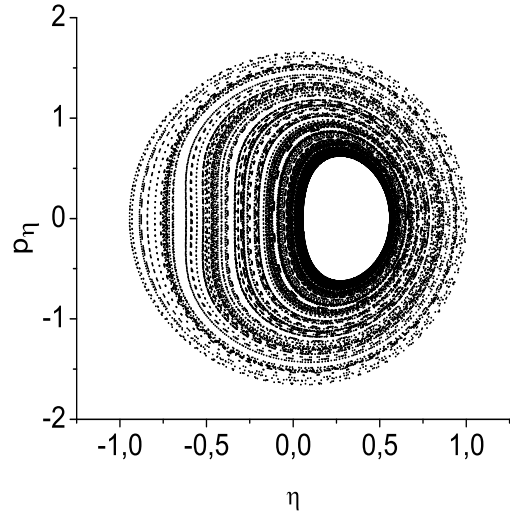
De maneira a facilitar a discussão dos resultados referentes à dinâmica eletrônica, os separamos em três subseções, as quais apresentam comportamentos distintos da dinâmica encontrada em diferentes regiões de \tilde{R} . Na primeira subseção concentramos os resultados obtidos para uma região de \tilde{R} com dinâmica regular. Em seguida, apresentamos a análise da região com dinâmica quase regular. Por fim, na última subseção, mostramos os resultados para a região de dinâmica caótica.

4.3.1 Dinâmica Eletrônica Regular

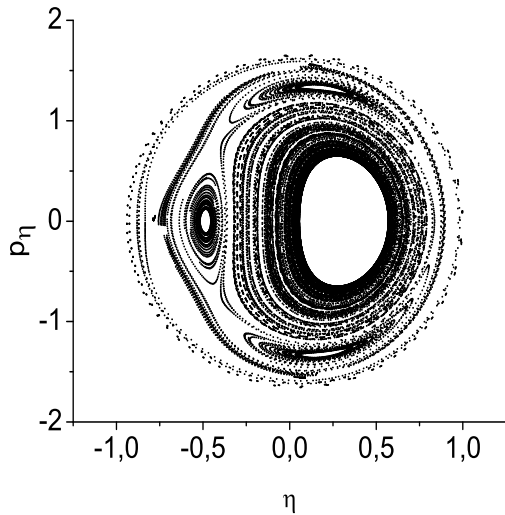
Vamos iniciar nossa análise do movimento eletrônico para valores de $\tilde{R} \geq 1,91$, pois observamos que esta se trata de uma região regular. Na figura 4.5 mostramos quatro seções de Poincaré para diferentes valores de \tilde{R} , apresentados em ordem decrescente.



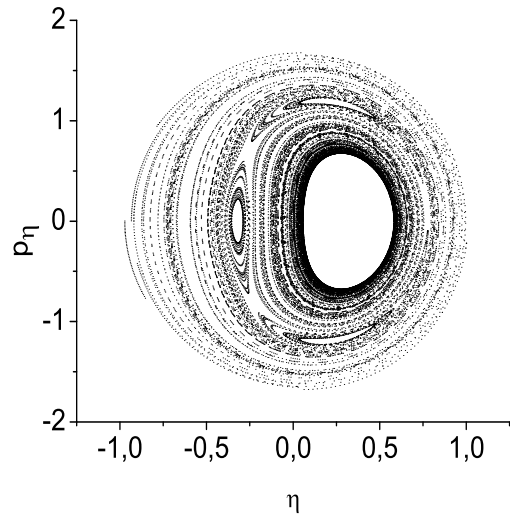
(a) $\tilde{R} = 2,70$ e 50 condições iniciais.



(b) $\tilde{R} = 1,95$ e 200 condições iniciais.



(c) $\tilde{R} = 1,94$ e 200 condições iniciais.



(d) $\tilde{R} = 1,93$ e 200 condições iniciais.

Figura 4.5: Exemplos de seções de Poincaré para região de dinâmica eletrônica regular.

A partir da figura 4.5(a) observamos um mapa de trajetórias periódicas regulares, devido a um movimento praticamente harmônico nessa região, conforme discutido anteriormente na análise do comportamento dos parâmetros e no estudo do potencial de interação. Juntamente com as análises anteriores podemos dizer que para valores em torno de $\tilde{R} > 2,50$, as variáveis η e p_η descrevem círculos concêntricos, pois o movimento eletrônico torna-se cada vez mais

harmônico com o aumento da distância entre os núcleos. Podemos notar ainda na figura que o centro dos círculos está deslocado da origem, o que ocorre pelo fato de que estamos considerando apenas termos de até terceira ordem na aproximação harmônica do potencial, fato este que torna o potencial assimétrico.

Aproximando um pouco mais os átomos de Rydberg, figura 4.5(b), observamos uma certa deformação para essas trajetórias, obtendo um sistema que já apresenta órbitas regulares quase periódicas. Esse comportamento se mantém até um valor em torno de $\tilde{R} = 1,95$ quando começamos a observar o processo de formação de uma órbita regular de período 3 presente nas figuras 4.5(c) e (d), a qual permanece até o valor aproximado de $\tilde{R} = 1,91$. Os pontos fixos elípticos e hiperbólicos desta órbita regular estão indicados na figura 4.5(c).

As seções de Poincaré apresentam de forma global os aspectos da dinâmica do sistema. Entretanto, como estamos interessados em uma análise mais específica de determinadas regiões da figura 4.5, obtivemos a representação no espaço de fase das variáveis escalonadas do problema original, para algumas condições iniciais. Para estes espaços de fase consideramos uma evolução até $t = 1000$. Primeiramente obtivemos o espaço de fase para uma condição iniciada em $p_\eta = 0,001$, $\eta = 0,080$ e $\xi = 0$ na seção de Poincaré da figura 4.5(a), a qual representa uma trajetória periódica. Na figura 4.6(a) apresentamos uma ampliação desta seção de Poincaré e em (b) o

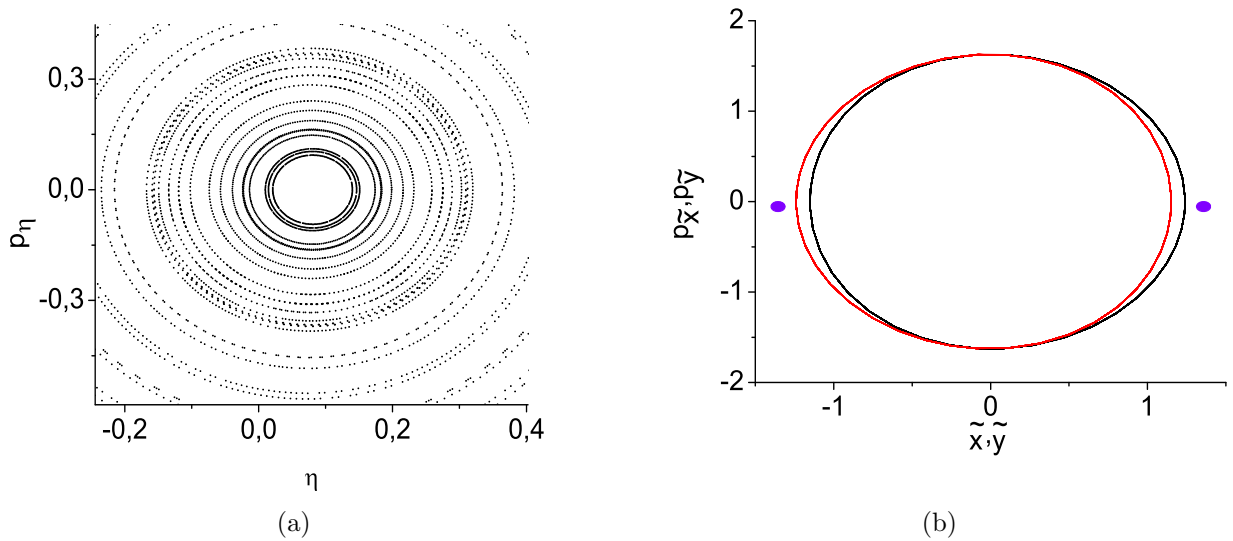


Figura 4.6: (a) Ampliação da seção de Poincaré da figura 4.5(a). (b) Espaço de fase obtido considerando $\tilde{R} = 2,70$ para a condição inicial $p_\eta = 0,001$, $\eta = 0,080$ e $\xi = 0$.

espaço de fase obtido, no qual a coordenada escalonada \tilde{y} está representada em vermelho, a coordenada escalonada \tilde{x} em preto e os pontos de coloração azul representam a posição dos núcleos. Este espaço de fase nos mostra que a trajetória de ambos elétrons permanece restrita na região entre os núcleos e que existe uma certa diferença de fase entre as trajetórias dos elétrons. Apresentamos também, na figura 4.7, a evolução das trajetórias no espaço de fase

para este valor de \tilde{R} , considerando um intervalo de tempo entre $t = 0,025$ e $t = 4,5$. Esta

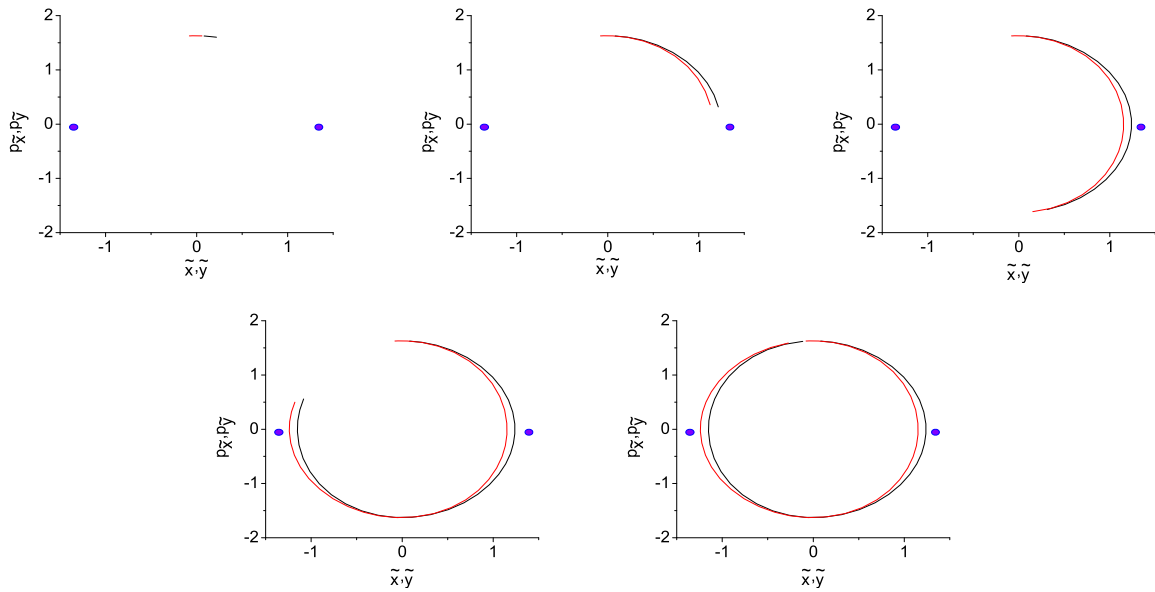


Figura 4.7: Evolução das trajetórias no espaço de fase para $\tilde{R} = 2,70$ com um tempo variando de $0,025$ a $4,5$.

evolução nos permite observar, de maneira geral, a posição e o momento referente à cada um dos elétrons para um mesmo instante de tempo. Pela análise dessa evolução podemos notar que os elétrons partem de pontos próximos e seguem um caminho entre os núcleos com posição e momento semelhantes. Verificamos também que para esta, e posteriores evoluções no espaço

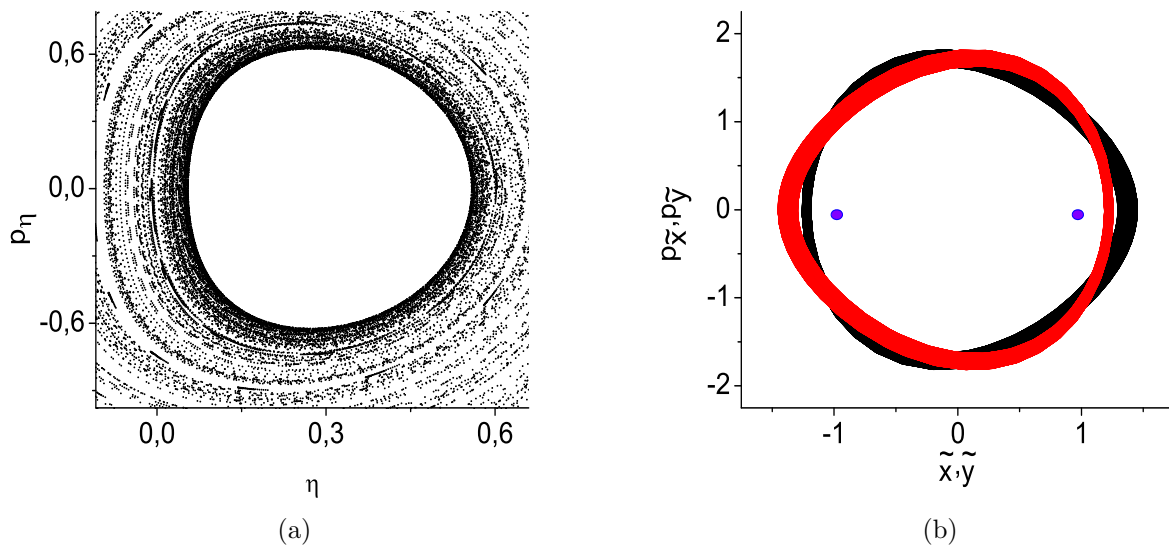


Figura 4.8: (a)Ampliação da seção de Poincaré da figura 4.5(b). Em (b) temos o espaço de fase obtido considerando $\tilde{R} = 1,95$, para a condição inicial $p_\eta = -0,005$, $\eta = 0,290$ e $\xi = 0$.

de fase, ocorre o cruzamento entre os elétrons. Isto pode ser explicado pelo fato de que quando utilizamos a aproximação harmônica, a divergência no termo de interação entre os elétrons é suavizada, mesmo sem a presença do parâmetro do modelo *soft core*.

Para a figura 4.5(b), analisamos a evolução de uma condição inicial em $p_\eta = -0,005$, $\eta = 0,290$ e $\xi = 0$, obtendo o espaço de fase da figura 4.8, na qual em (a) apresentamos uma ampliação da seção de Poincaré considerada e em (b) o espaço de fase. Comparando este espaço de fase com o obtido na figura 4.6(b), observamos de maneira geral grandes semelhanças, porém com um certo alargamento na espessura da linha, o que corresponde ao fato que os elétrons continuam descrevendo um movimento regular, porém agora quase periódico, para esta condição inicial. Para maiores valores de tempo esse comportamento no espaço de fase permanece inalterado. Continuando a descrição dos espaços de fase obtivemos para a seção de Poincaré da figura 4.5(c), para uma condição iniciada em $p_\eta = -0,003$, $\eta = -0,481$ e $\xi = 0$, a qual está ampliada na figura 4.9(a), o espaço de fase em 4.9(b). Apresentamos também a

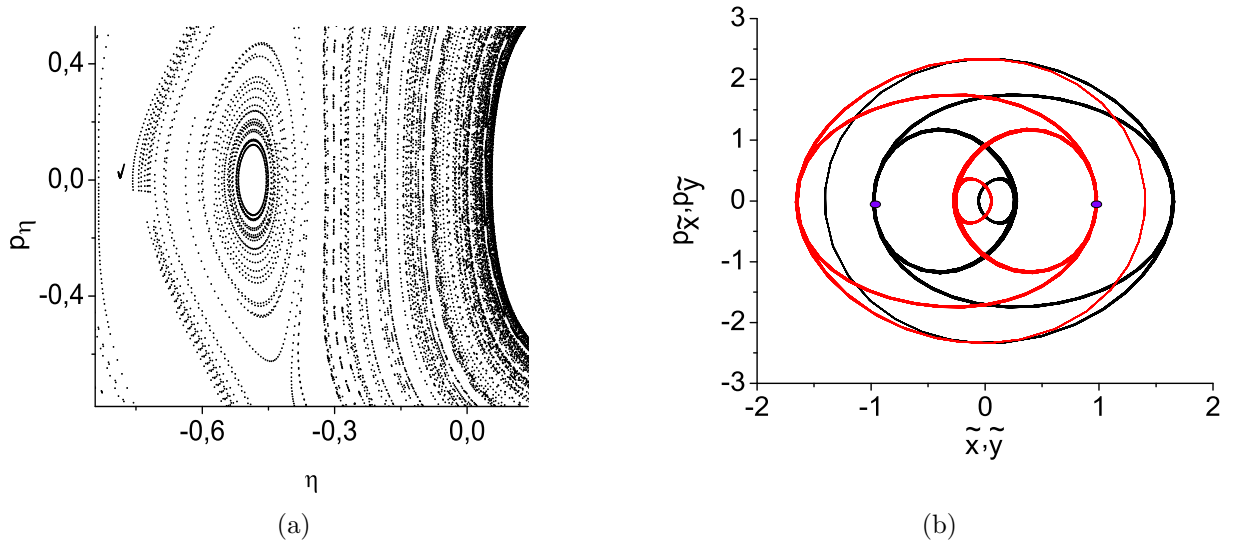


Figura 4.9: (a) Ampliação da seção de Poincaré da figura 4.5(c). Em (b) temos o espaço de fase obtido para $\tilde{R} = 1,94$ com condição inicial $p_\eta = -0,003$, $\eta = -0,481$ e $\xi = 0$.

evolução para este espaço de fase, considerando um tempo entre 0,025 a 4,5, na figura 4.10. Os resultados para os demais valores de \tilde{R} são semelhantes e, portanto, não serão apresentados aqui.

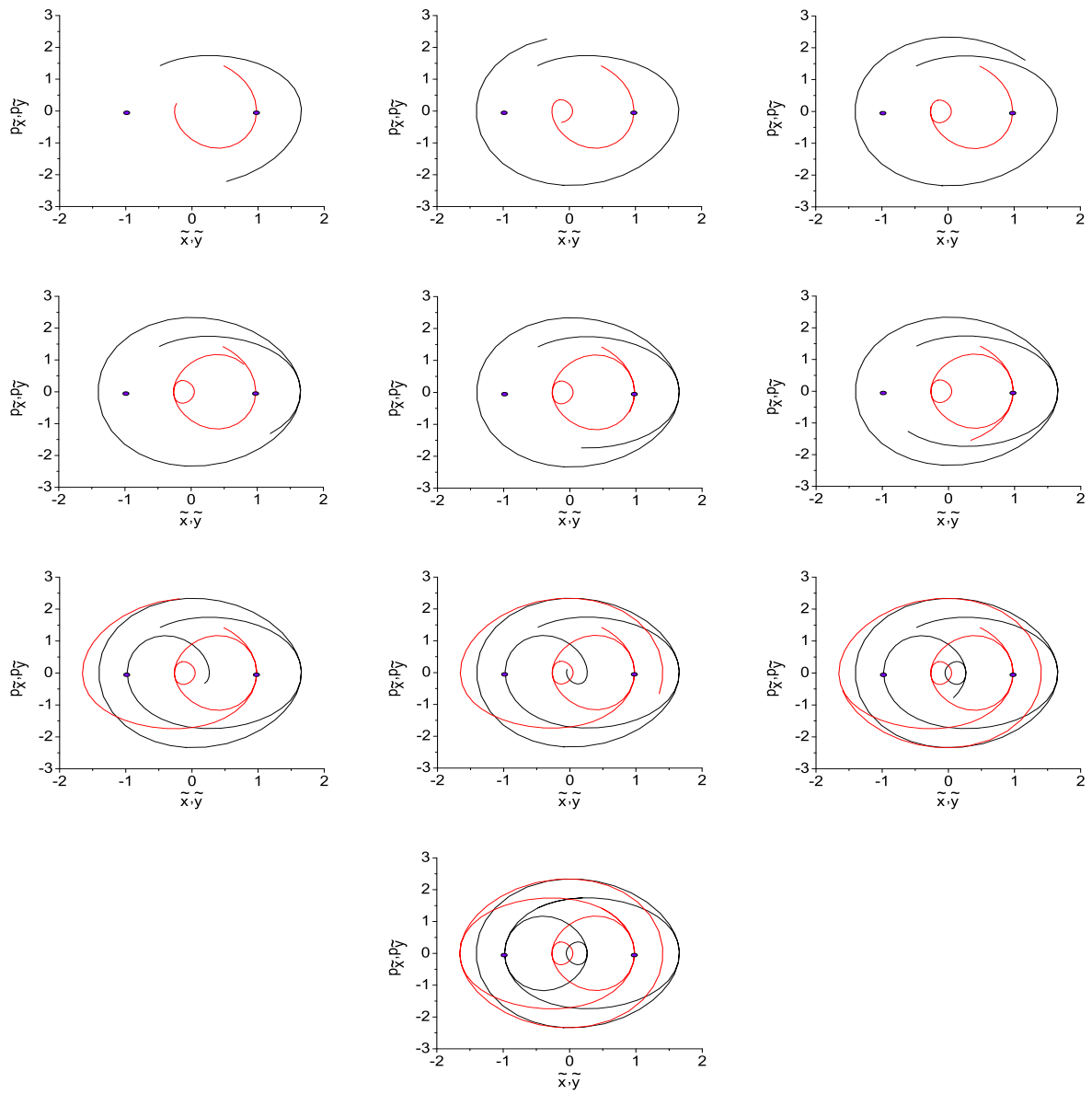
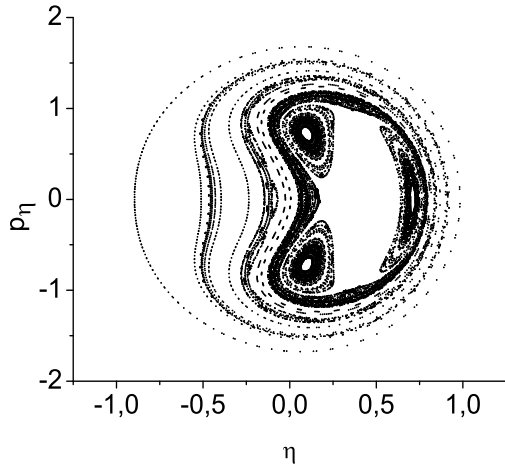


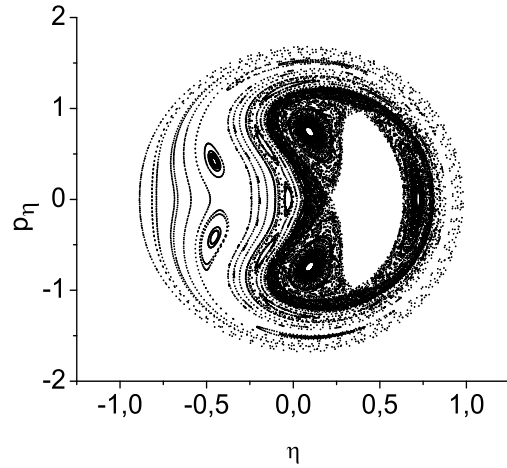
Figura 4.10: Evolução das trajetórias no espaço de fase para $\tilde{R} = 1,94$ com tempo variando de 0,025 a 4,5.

4.3.2 Dinâmica Eletrônica Quase Regular

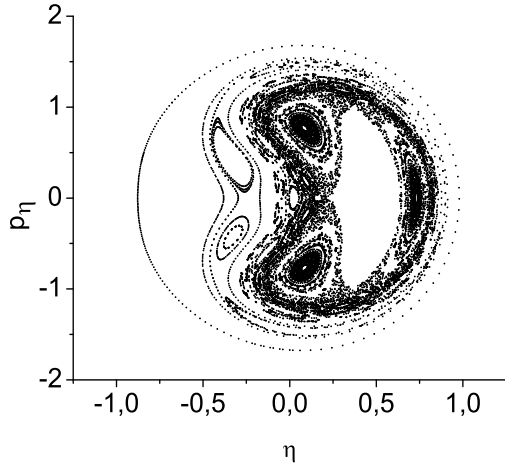
Iremos agora considerar um novo comportamento global da interação eletrônica, o qual consiste em uma região de dinâmica quase regular presente para \tilde{R} entre 1,93 e aproximadamente 1,76. Os primeiros resultados relativos à dinâmica nesta região encontram-se nas seções de Poincaré da figura 4.11. Observando o padrão de comportamento para estas seções de Poin-



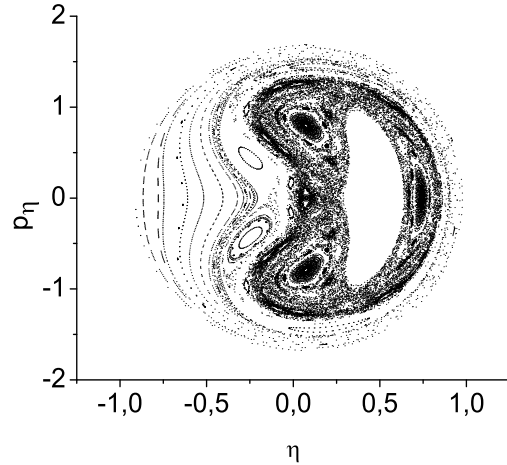
(a) $\tilde{R} = 1,80$ e 100 condições iniciais.



(b) $\tilde{R} = 1,79$ e 100 condições iniciais.



(c) $\tilde{R} = 1,78$ e 100 condições iniciais.



(d) $\tilde{R} = 1,77$ e 200 condições iniciais.

Figura 4.11: Exemplos de seções de Poincaré na região de dinâmica eletrônica quase regular.

caré, verifica-se que conforme os átomos se aproximam, a dinâmica deixa de ser regular, mostrando indícios do início de uma dinâmica de interação mais caótica. Como esta é uma região de transição entre os casos regulares e caóticos, a mesma ainda apresenta características periódicas do sistema regular. Entretanto, esta é uma região em que os termos de perturbação no potencial de interação já possuem valores significativos, o que nos mostra uma formação cada vez maior de ilhas de órbitas regulares imersas em regiões de dinâmica quase regular.

Apresentamos uma ampliação da seção de Poincaré obtida para $\tilde{R} = 1,80$, na figura 4.12(a) e em (b) o espaço de fase para uma condição iniciada em $p_\eta = -0,712$, $\eta = 0,099$ e $\xi = 0$. A

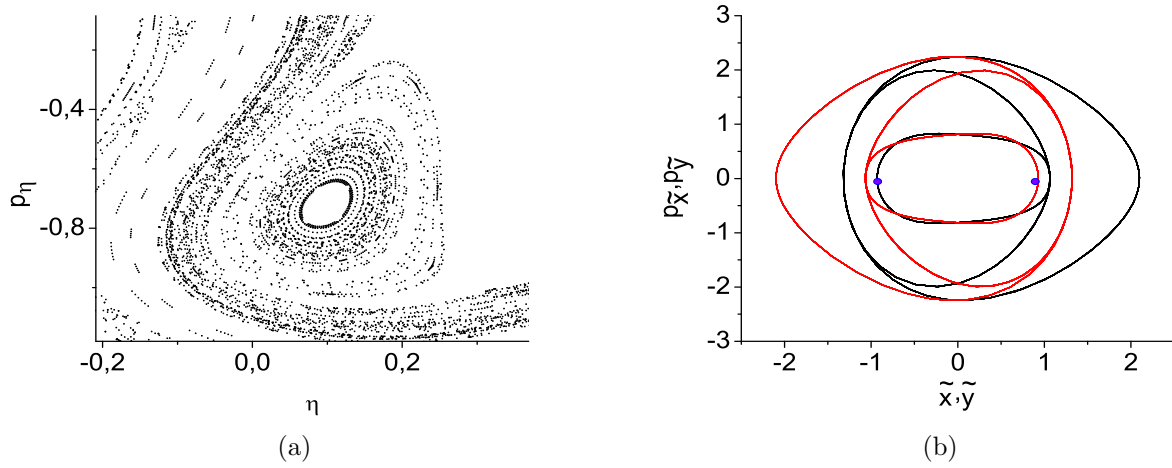
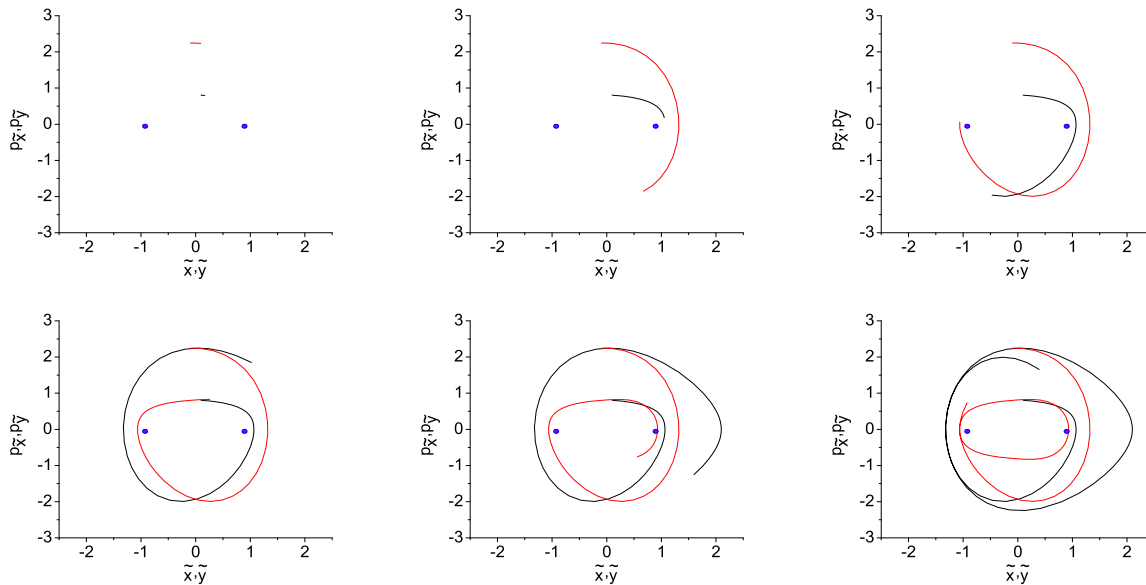


Figura 4.12: (a)Ampliação da seção de Poincaré da figura 4.11(a). Em (b) temos o espaço de fase para $\tilde{R} = 1,80$ com condição inicial em $p_\eta = -0,712$, $\eta = 0,099$ e $\xi = 0$.

condição inicial evoluída temporalmente está localizada na região central da ilha apresentada na ampliação (a) da figura 4.12. Conforme o espaço de fase mostrado em (b) os elétrons geram órbitas periódicas, para a condição inicial considerada.

Para uma melhor visualização da evolução temporal da dinâmica eletrônica apresentada na figura 4.12(b) mostramos na figura 4.13 um conjunto de espaços de fase obtidos para tempos entre 0,01 e 16,0.



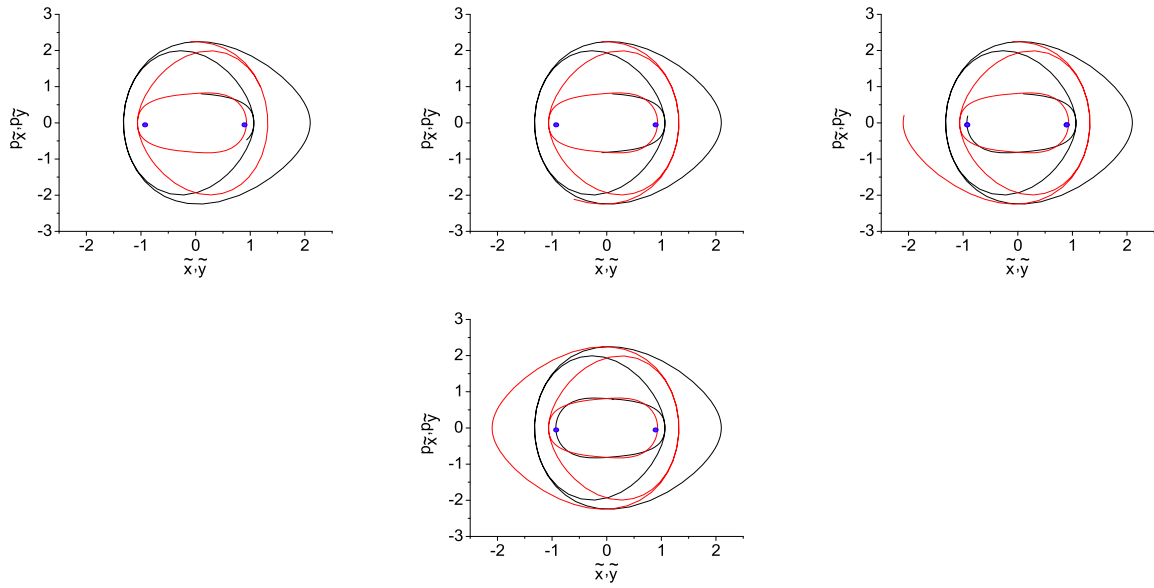


Figura 4.13: Evolução das trajetórias do espaço de fase para $\tilde{R} = 1,80$ com tempo t variando de $t = 0,01$ a $t = 16,0$.

Podemos observar que os elétrons alcançam posições muito mais afastadas dos seus respectivos núcleos, fato que pode ser explicado pela conservação da energia total do sistema devido a deformação do potencial como função de \tilde{R} .

As seções de Poincaré para $\tilde{R} = 1,79$ e $\tilde{R} = 1,78$ apresentadas na figura 4.11(b) e (c) nos mostram a existência de grande quantidade de ilhas periódicas. Para $\tilde{R} = 1,79$ ampliamos uma destas regiões com ilhas conforme figura 4.14(a). Mostramos também o espaço de fase para uma condição iniciada em $p_\eta = -0,003$, $\eta = -0,045$ e $\xi = 0$, na figura 4.14(b).

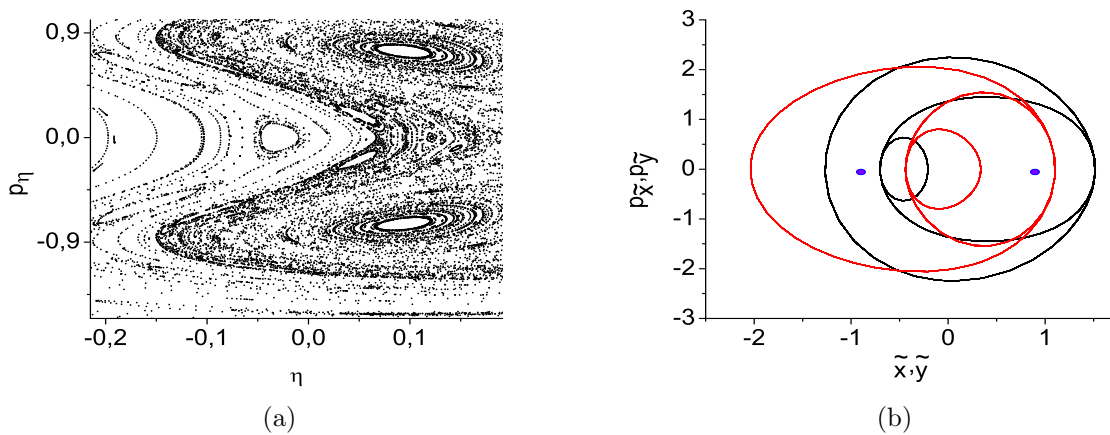


Figura 4.14: (a)Ampliação da seção de Poincaré da figura 4.11(b). Em (b) temos o espaço de fase para $\tilde{R} = 1,79$ com condição inicial em $p_\eta = -0,003$, $\eta = -0,045$ e $\xi = 0$.

Com o intuito de analisar estas trajetórias no espaço de fase mostramos a seguir, na figura 4.15, a evolução do espaço de fase com t entre 0,01 e 12,1.

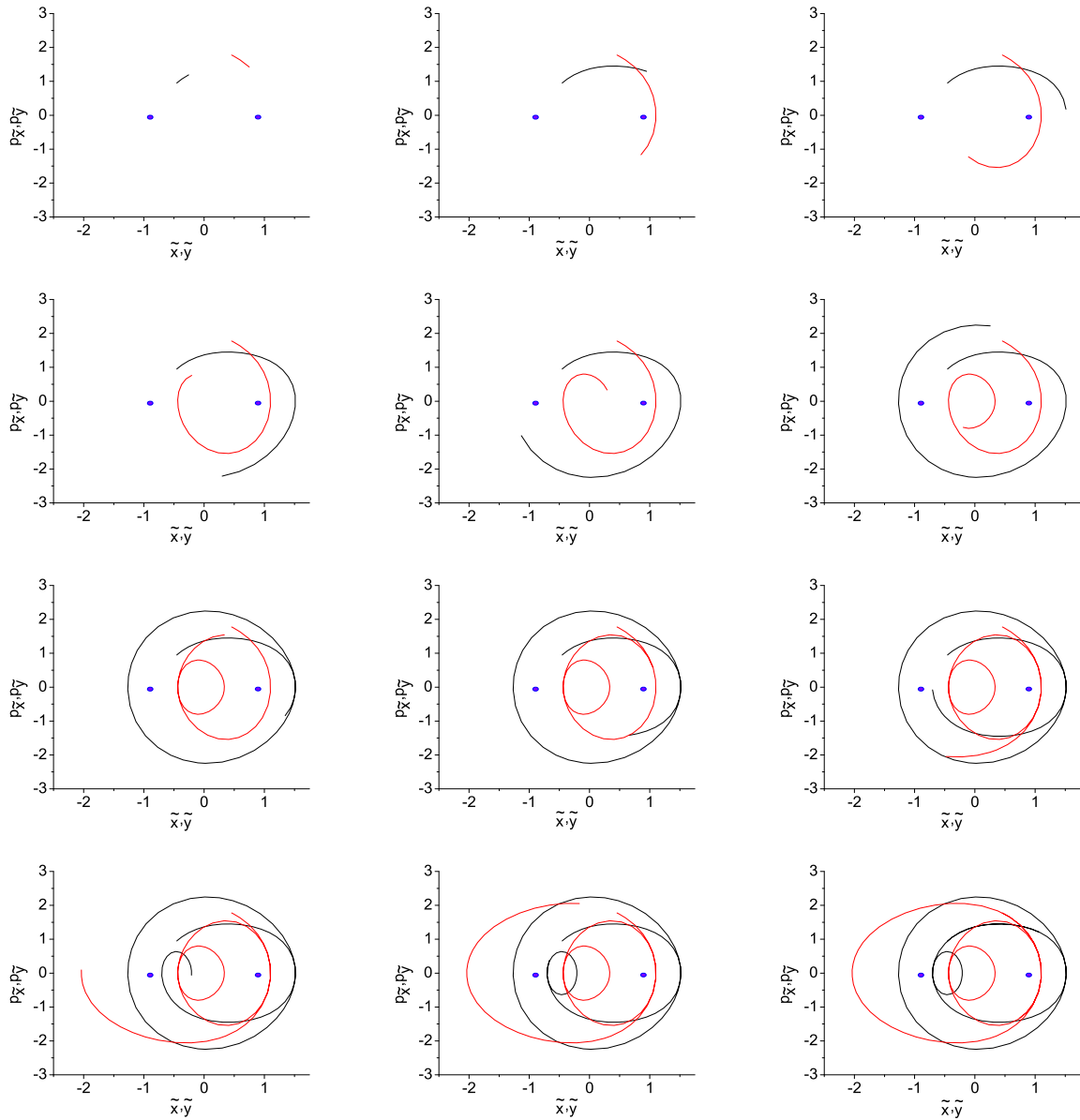


Figura 4.15: Evolução das trajetórias no espaço de fase para $\tilde{R} = 1,79$ para o tempo variando de $t = 0,01$ a $t = 12,1$.

Na figura 4.16(a) mostramos também uma região ampliada com grande quantidade de ilhas na seção de Poincaré para $\tilde{R} = 1,78$. Escolhendo como condição inicial os valores de $p_\eta = 0,006$, $\eta = 0,027$ e $\xi = 0$, obtivemos em (b) o respectivo espaço de fase.

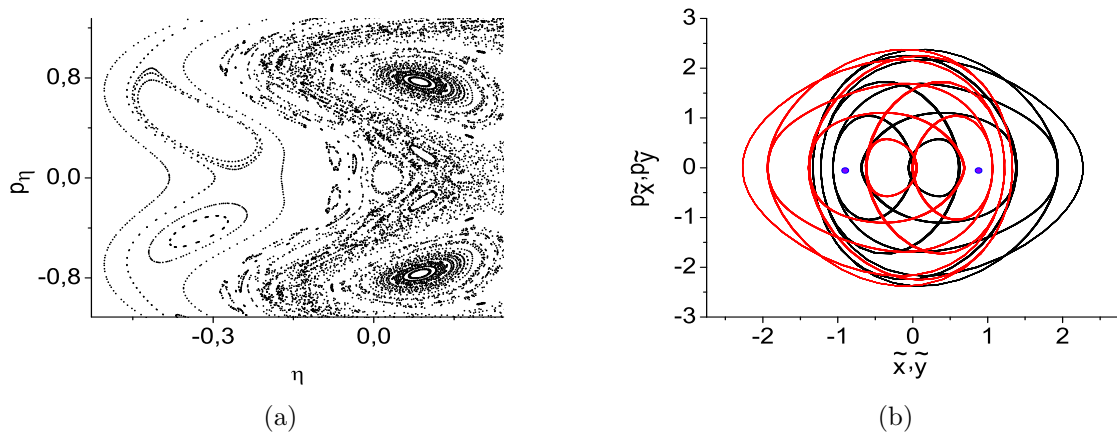
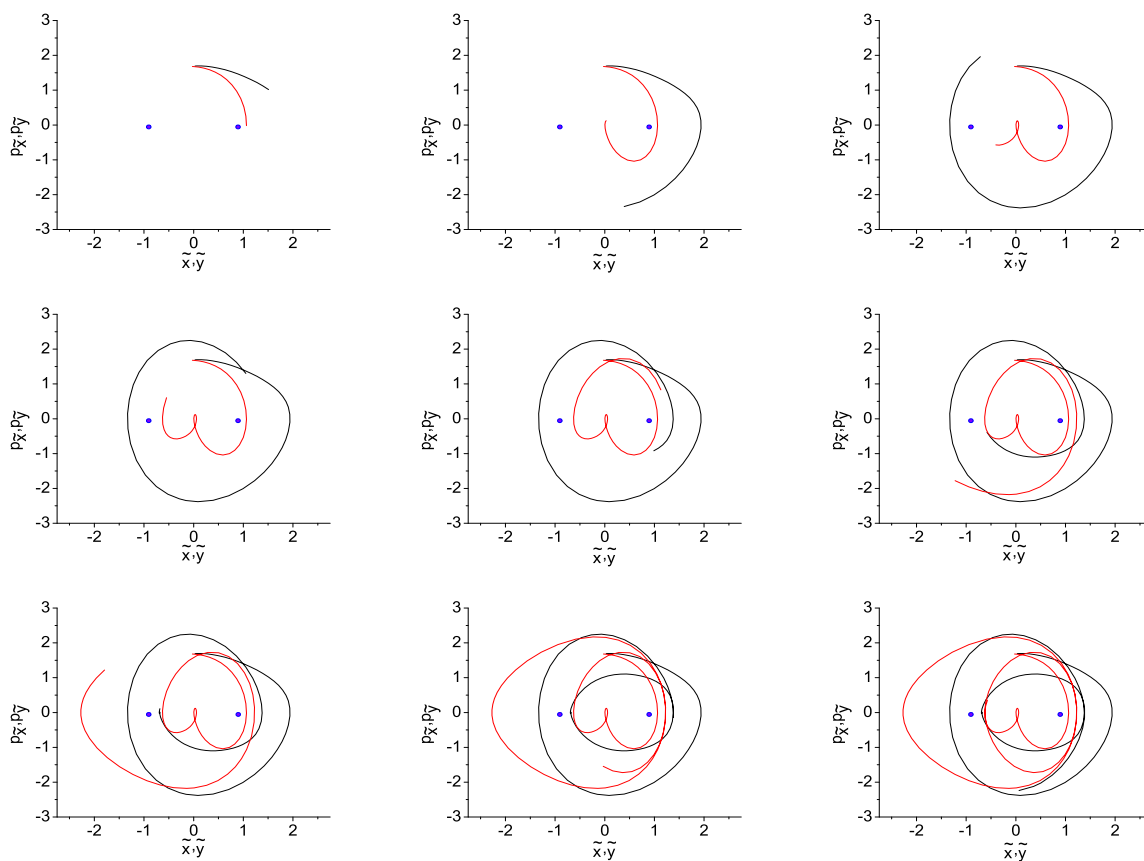


Figura 4.16: Em (a) temos a Ampliação da seção de Poincaré da figura 4.11(c). Em (b) temos o espaço de fase para $\tilde{R} = 1,78$ com condição inicial em $p_\eta = 0,006$, $\eta = 0,027$ e $\xi = 0$.

Para esta condição inicial mostramos a evolução no espaço de fase na figura 4.17.



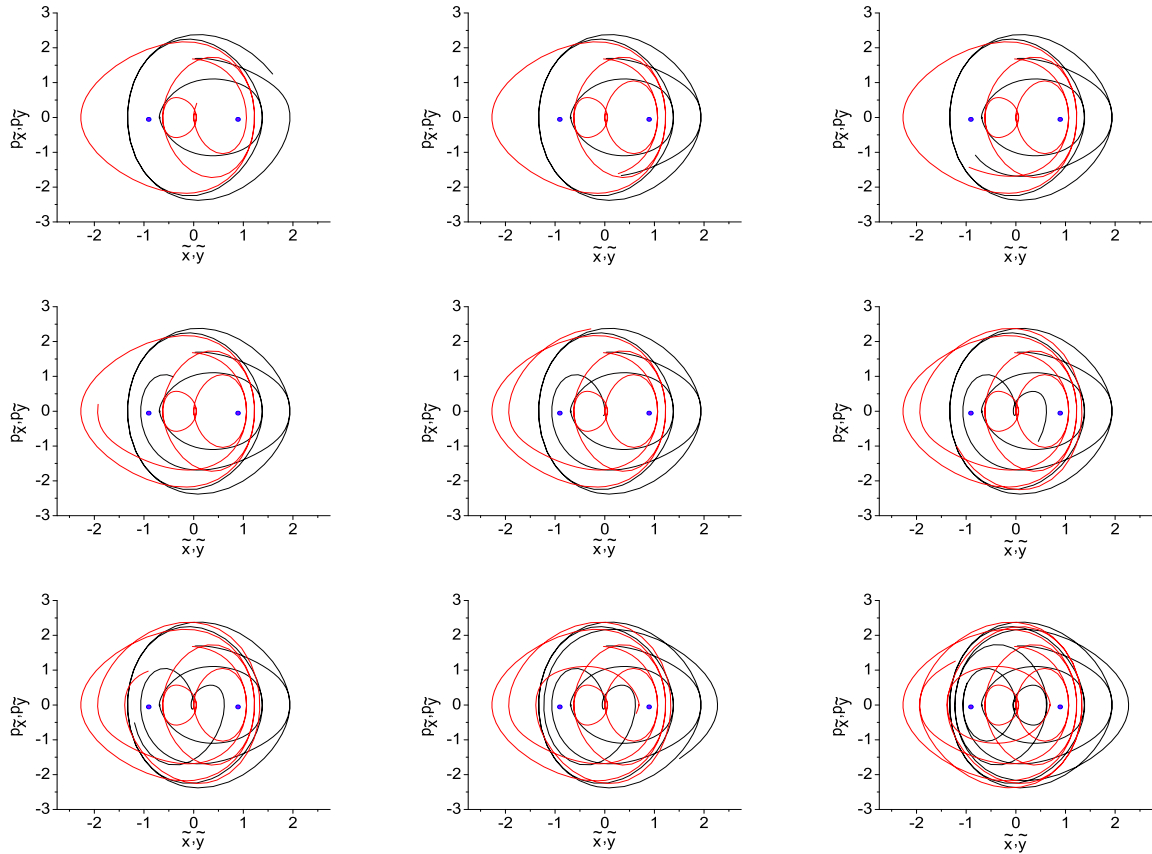
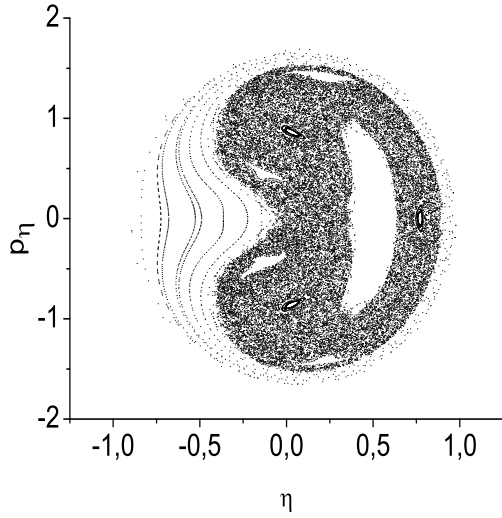


Figura 4.17: Evolução das trajetórias no espaço de fase para $\tilde{R} = 1,78$ para tempo de $t = 0,01$ a $t = 39,0$.

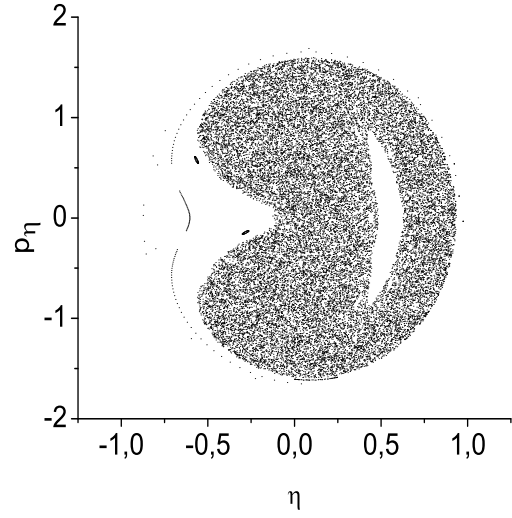
4.3.3 Dinâmica Eletrônica Caótica e Ionização

Nessa seção finalizamos a análise da transformação do regime de interação dinâmica entre átomos de Rydberg de periódico para caótico. Isso deve-se ao fato que com a diminuição da distância entre os núcleos, os processos de interação caótica começam a dominar a seção de Poincaré, fazendo com que as órbitas quase periódicas sejam aos poucos substituídas por um mar estocástico, conforme mostra a figura 4.18. O confinamento que havia entre os elétrons devido ao potencial (equação 4.13, figura 4.4) é reduzido, e conseqüentemente a trajetória pode escapar da região de estados ligados, podendo assim ocorrer a ionização do átomo.

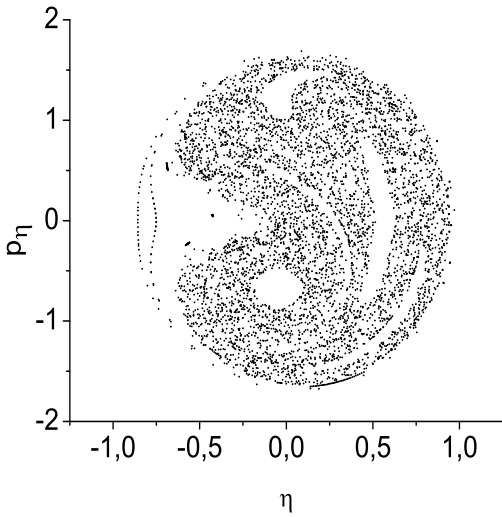
Na figura 4.18, temos algumas das seções de Poincaré obtidas para valores de \tilde{R} que são precursores de um mar de trajetórias caóticas. Valores esses que foram encontrados para $\tilde{R} \leq 1,76$. Podemos observar na figura 4.18(a) que as ilhas de periodicidade praticamente desaparecem e que o espaço da seção de Poincaré começa a ser preenchido por pontos. Mas, ainda assim existe uma região de periodicidade, mostrando que para alguma dada condição inicial dentro dessa região ainda podem ocorrer órbitas quase periódicas. Para a figura 4.18(b) continuamos vendo esse comportamento porém, são muito menos visíveis as ilhas periódicas. A região mais



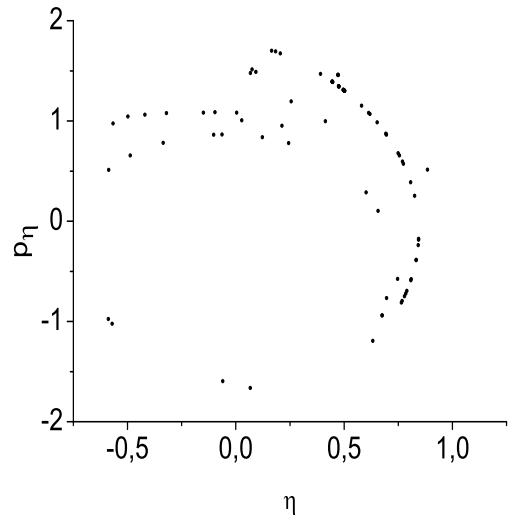
(a) $\tilde{R} = 1,75$ e 200 condições iniciais.



(b) $\tilde{R} = 1,73$ e 200 condições iniciais.



(c) $\tilde{R} = 1,72$ e 200 condições iniciais.



(d) $\tilde{R} = 1,50$ e 200 condições iniciais.

Figura 4.18: Exemplos de seções de Poincaré na região de dinâmica eletrônica caótica.

escura na seção de Poincaré corresponde a formação de trajetórias não periódicas. Para a figura 4.18(c), a qual mostra uma seção de Poincaré para $\tilde{R} = 1,72$, observamos que esta apresenta um formato e intensidade de pontos diferente das duas primeiras figuras dessa seção, mesmo sendo obtida pela mesma quantidade de condições iniciais. Por último, na figura 4.18(d), mostramos um exemplo do que acontece para trajetórias na região $\tilde{R} \leq 1,5$. Esse comportamento para $\tilde{R} \leq 1,5$ é explicado usando mais uma vez o formato do potencial de interação, que para valores pequenos de \tilde{R} não confina mais as trajetórias para um estado ligado. Com isso as trajetórias tendem a escapar deste potencial de interação.

Para $\tilde{R} = 1,75$ ampliamos a seção de Poincaré, conforme figura 4.19(a), e apresentamos em

(b) o espaço de fase para uma trajetória iniciada em $p_\eta = -0,443$, $\eta = 0,130$ e $\xi = 0$. Da observação da figura 4.19(a) vemos que existem algumas pequenas órbitas regulares imersas no mar caótico. A análise do espaço de fase da trajetória caótica, 4.19(b) torna-se mais complicada pois, ela tende a preencher todo o espaço disponível no gráfico.

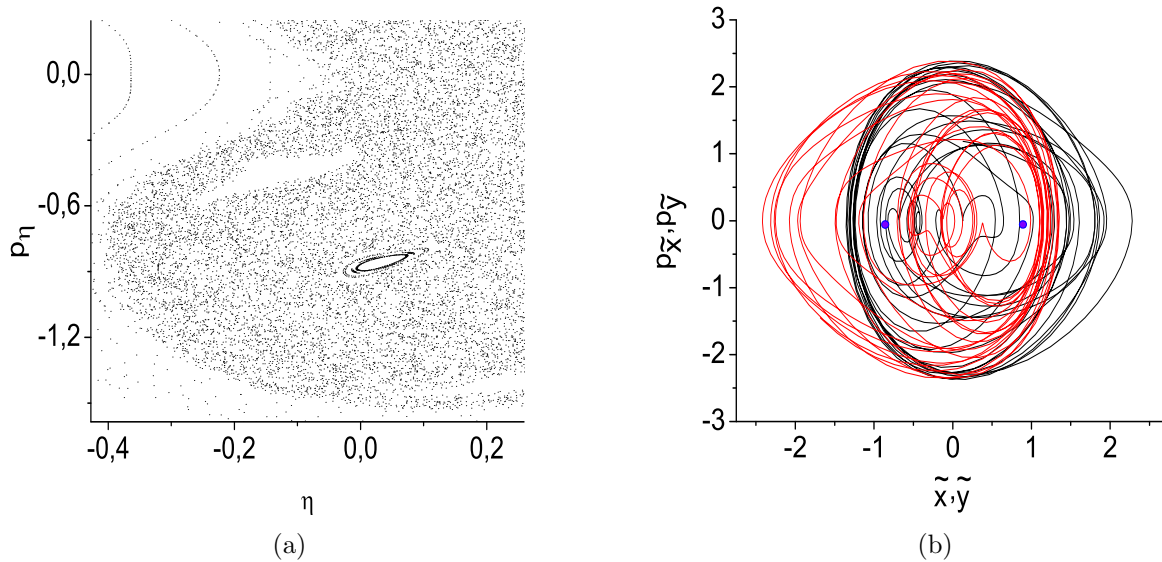
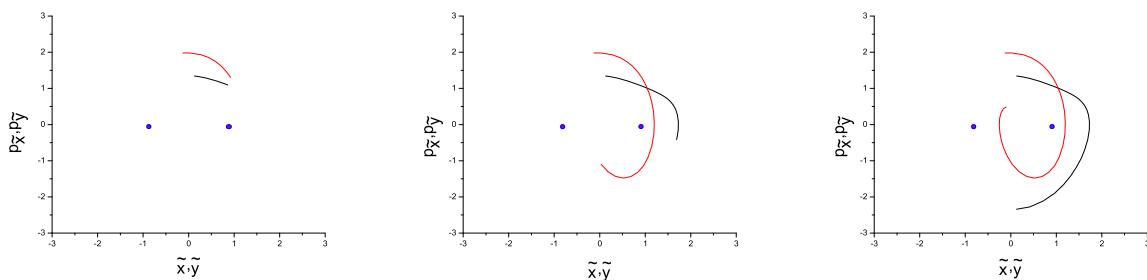


Figura 4.19: Em (a) temos a ampliação da seção de Poincaré da figura 4.18(a). Em (b) temos o espaço de fase para $\tilde{R} = 1,75$ com condição inicial em $p_\eta = -0,443$, $\eta = 0,130$ e $\xi = 0$.

Por fim apresentamos, na figura 4.20, a evolução no espaço de fase de uma trajetória caótica para o valor de $\tilde{R} = 1,72$, para uma condição iniciada em $p_\eta = -0,316$, $\eta = 0,130$ e $\xi = 0$. Observando esta evolução do espaço de fase, vemos que os elétrons interagem por um determinado período de tempo quando, após sucessivas interações ambos adquirem energia cinética suficiente para escapar desse estado ligado, ou seja, nesta caso ocorre dupla ionização. O fato de conseguirmos obter processos de ionização a partir do nosso modelo unidimensional nos evidencia que mesmo sendo um modelo simplificado e aproximado, este possui características



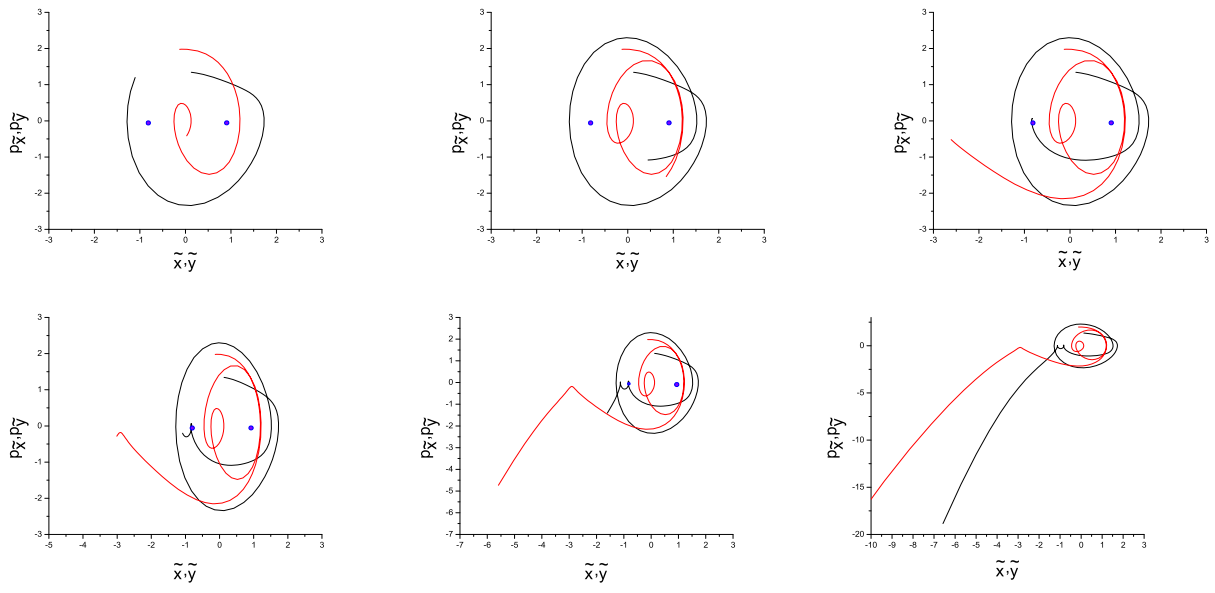


Figura 4.20: Evolução do espaço de fase para $\tilde{R} = 1,72$ para condição iniciada em $p_\eta = -0,316$, $\eta = 0,130$ e $\xi = 0$.

que poderão ser contrastadas com resultados experimentais para a ionização.

Capítulo 5

Conclusões

Para alcançar o objetivo inicial deste trabalho, que era discutir qualitativamente e quantitativamente a dinâmica eletrônica da interação entre dois átomos de Rydberg, foram apresentados no capítulo 2 propriedades de átomos de Rydberg e pacotes de ondas de Rydberg localizados e no capítulo 3 conceitos gerais de sistemas dinâmicos. Tal revisão teórica é importante para a análise dos resultados obtidos.

No início do capítulo de resultados foi apresentado o modelo clássico unidimensional que foi utilizado na descrição do problema considerado, bem como sua Hamiltoniana de interação. Esta descrição, assim como os resultados provenientes desta, não possuem semelhantes na literatura, sendo propostos pela primeira vez nesse trabalho. Utilizando o modelo *soft core* para evitar a singularidade deste potencial na origem e coordenadas escalonadas, conseguimos definir uma Hamiltoniana escalonada, a qual é independente explicitamente do número quântico principal do átomo.

Por introduzir as variáveis de centro de massa e relativa do sistema, e a partir de uma expansão harmônica, obtivemos um potencial tipo Hénon-Heiles para o sistema, o qual foi mostrado ser harmônico para uma distância em torno de $\tilde{R} > 2,0$ enquanto deforma-se para outros valores de $\tilde{R} < 2,0$. Esse comportamento do potencial é essencial para a observação da formação de estados ligados para um valor de energia $\tilde{E} = -1$ constante, a qual é a energia total do sistema de átomos.

Em seguida foi iniciada a discussão do comportamento da dinâmica eletrônica, por análise das seções de Poincaré obtidas para valores de \tilde{R} decrescentes. Foi possível separar o movimento dos átomos em função de regiões de \tilde{R} , obtendo três regimes distintos do comportamento do sistema no intervalo entre 2,50 e 1,50, que são:

Dinâmica eletrônica regular: para $\tilde{R} > 1,93$, as análises do espaço de fase para algumas condições iniciais nos mostraram apenas órbitas periódicas.

Dinâmica eletrônica quase regular: para $1,76 < \tilde{R} \leq 1,93$, na qual há a formação de muitas ilhas de periodicidade.

Dinâmica eletrônica caótica e ionização: para $\tilde{R} < 1,76$ devido a presença de um mar caótico nas seções de Poincaré, o qual preenche quase que por completo o espaço de fase.

Pela análise das evoluções das trajetórias no espaço de fase, conseguimos obter informações da posição e momento de cada um dos elétrons em um mesmo instante t . Com isso conseguimos observar os diferentes caminhos seguidos pelos elétrons no sistema para alguma dada condição inicial. Conforme \tilde{R} vai diminuindo notamos que cada vez menos trajetórias permanecem confinadas no estado ligado, podendo assim ocorrer a ionização dos átomos.

O próximo passo deste trabalho é realizar a análise para o caso clássico bidimensional, pois neste não é necessário inserir um desvio no potencial, inserindo termos não físicos, como ocorre no caso do modelo *soft core*. Devido a este fato, o caso bidimensional aproxima-se muito mais do caso real. Outro resultado interessante a ser explorado, é estudar como ocorre o processo de ionização na interação dos átomos de Rydberg e contrastar estes com possíveis resultados experimentais para curvas de ionização em função da distância internuclear.

Referências Bibliográficas

- [1] Huang, K. *Introduction to Statistical Physics*. New York: Taylor e Francis, 2001. 288p.
- [2] Huang, K. *Statistical Mechanics*. 2ed. New York: Wiley, 1987. 506p.
- [3] Anderson, M.H.; *et al.* *Science*, v.269, n.198, 1995.
- [4] Fried, D.G.; *et al.* *Phys.Rev.Lett*,v.81, n.18, 1998.
- [5] Eisberg, R.; Resnick, R. *Física Quântica*. Campus, 1986. 928p.
- [6] Oliveira, A. L. *Estudos em Átomos de Rydberg Frios*. 2001. Tese(Doutorado em Ciências) - UFSCAR, São Carlos.
- [7] Nascimento, V. A. *Dinâmica de Colisões entre Átomos de Rydberg Frios*. 2006. 151f. Tese(Doutorado em Ciências) - Instituto de Física de São Carlos da Universidade de São Paulo, São Carlos.
- [8] Eijnisman, R.; Nussenzveig, P. *RBEF*, v.19, n.1, 1997.
- [9] Cohen-Tannoudji, C. *Quantum Mechanics*. New York: Wiley, 1977, v.2.
- [10] Goldstein, H.; Poole, C.; Safko, J. *Classical Mechanics*. 3ed. New York: Addison-Wesley, 2001. 638p.
- [11] Yeazell, J. A.; *et al.* *Phys. Rev. A*, v.40, n.9, 1989.
- [12] Buchleitner, A.; Delande, D.; Zakrzewski, J. *Phys. Rep.*, v.368, p.409-547, 2002.
- [13] Henle, W. A.; Ritsch, H.; Zoller, P. *Phys. Rev. A*, v.36, n.2, 1987.
- [14] Casati, G.; Guarneri, I.; Shepelyansky, D. L. *IEEE J. Quantum Electron.*, v.24, n.7, 1988.
- [15] Seaton, M. J. *Rep. Prog. Phys.*, v.46, 1983.
- [16] Gallas, J. A. C.; *et al.* *Advances in Atomic and Molecular Physics*, Academic Press, v.20, 1985.

- [17] Landau, L. D.; Lifshitz, E. M. *Quantum Mechanics: Non-relativistic Theory*. New York: Pergamon, 1979.
- [18] Alber, G.; Ritsch, H.; Zoller, P. *Phys. Rev. A*, v.34, n.2, 1986.
- [19] Sakurai, J. J. *Modern Quantum Mechanics*. New York: Addison-Wesley Publishing Company, 1994. 513p.
- [20] Xu, Q. *Eur. Phys. J. D*, v.51, p.387-392, 2009.
- [21] Ott, E. *Chaos in dynamical systems*. New York: Cambridge University Press, 1993. 385p.
- [22] Tél, T.; Gruiz, M. *Chaotic Dynamics - An Introduction Based on Classical Mechanics*. New York: Cambridge University Press, 2006. 393p.
- [23] Lichtenberg, A.J.; Lieberman, M.A. *Regular and Chaotic Dynamics*. 2ed. New York: Springer, 1992. 692p.
- [24] Korsch, H.J.; Jodl, H.-J. *Chaos - A Program Collection for the PC*. 2ed. Berlin: Springer, 1998. 311p.
- [25] Corless, R. M.; Frank, G.W.; Monroe, J.G. *Physica D*. v.46, 1990.
- [26] Corless, R. M. *Am. Math. Mont.* v.99, 1992.
- [27] Grobe, R.; Eberly, J. H. *Phys. Rev. A*, v.48, n.6, 1993.
- [28] Su, Q.; Eberly, J. H. *Phys. Rev. A*, v.44, n.9, 1991.
- [29] Hall, R. L.; *et al.* *Phys. Rev. A*, v.80, n.32507, 2009.
- [30] Liu, W. C.; Clark, C. C. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, v.25, n.L517, 1992.
- [31] Javanainen, J.; Eberly, J. H.; Su, Q. *Phys. Rev. A*, v.38, n.7, 1988.
- [32] Su, Q.; Eberly, J. H.; Javanainen, J. *Phys. Rev. Lett.*, v.64, n.8, 1990.
- [33] Hénon, M.; Heiles, C. *Astron. J.*, v.69, n.73, 1964.