

FABIO MARCEL ZANETTI

**MÉTODO DO CONTORNO DE PAREDES APLICADO A  
BILHARES QUÂNTICOS**

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

Orientador: Prof. Dr. Marcos Gomes Eleutério da Luz

CURITIBA

2004

**MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO E DO DESPORTO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ  
SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS  
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

**PARECER**

Os abaixo-assinados, membros da banca examinadora de Defesa de Dissertação de Mestrado do estudante Fábio Marcel Zanetti são de parecer favorável e consideram aprovada a redação final da Defesa de Dissertação cujo título é **Método de Contorno de Paredes Aplicado a Bilhares Quânticos**.

Curitiba, 18 de fevereiro de 2004

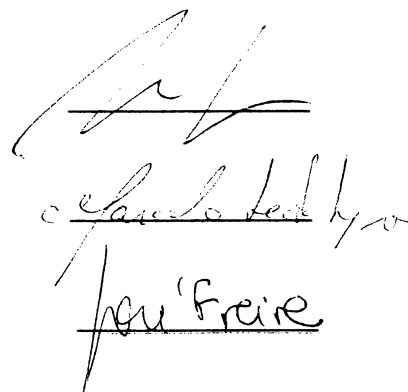
**Banca Examinadora**

**Assinatura**

**Prof. MARCOS GOMES ELEUTÉRIO DA LUZ**  
(Orientador/ Presidente) (UFPR)

**Prof. MARCELO LYRA**  
(UFAL)

**Prof. JOSÉ ARRUDA DE OLIVEIRA FREIRE**  
(UFPR)



The image shows three handwritten signatures in black ink, each written over a horizontal line. The first signature is the most stylized and appears to be 'M. G. Eleutério da Luz'. The second signature is more legible and appears to be 'Marcelo Lyra'. The third signature is also legible and appears to be 'José Arruda de Oliveira Freire'.

## Resumo

Neste trabalho fazemos tanto um desenvolvimento analítico quanto numérico do método do contorno de paredes (“boundary wall method”) para estudar de forma geral os chamados bilhares quânticos.

Neste método obtemos, a partir de uma equação integral, a matriz  $T$  do sistema, que fornece as soluções corretas de espalhamento fora do bilhar e, nas ressonâncias, os auto-estados do problema interno.

Como aplicações discutimos bilhares de várias formas, tanto de paredes impermeáveis quanto de paredes permeáveis. Também abordamos o problema de bilhares isospectrais e rede de espalhadores.

## Abstract

In this work we develop both analytical and numerically the “boundary wall method” to study the general problem of quantum billiards.

In this approach we need to obtain, by means of an integral equation, the system  $T$  matrix, which give us the correct scattering solutions outside and, at the ressonances, the eigenstates inside the billiard.

As aplications, we discuss billiards of various shapes, both of impermeable and permeable walls. We also analyse the problem of isospectral billiards and of scattering lattices.

*“If anybody says he can think about quantum problems without getting giddy, that only shows he has not understood the first thing about them.”*

Niels Henrik David Bohr

## **Agradecimentos**

- Ao meu orientador Prof. Marcos Gomes Eleutério da Luz.
- À minha família. Especialmente meus pais (Pedro e Marcia), irmã (Carina), avós (Giocondo e Jovina) e minha tia Célia que sempre me ajudaram.
- À minha filha, Ingrid.
- À minha namorada, Giovana
- Aos membros da banca examinadora da Qualificação, Professores Fernando Pablo Devecchi e Marlus Koeller.
- Aos membros da banca examinadora da Defesa, Professores José Arruda Freire e Marcelo Leite Lyra.
- Aos meus colegas e companheiros desde a graduação até a pós.
- Aos professores que tive até aqui.
- À CAPES, pela ajuda financeira.

# Conteúdo

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>10</b>
<b>2</b>	<b>O método do contorno de paredes</b>	<b>13</b>
2.1	O Método . . . . .	14
2.1.1	Desenvolvimento do método . . . . .	15
2.1.2	Bilhares . . . . .	20
2.1.3	Dualidade dentro/fora . . . . .	26
2.2	Tratamento numérico . . . . .	31
2.3	Exemplos numéricos . . . . .	33
2.3.1	Círculo . . . . .	36
2.3.2	Quadrado . . . . .	40
2.3.3	Quarto de Stadium . . . . .	49
2.3.4	Quarto de Sinai de Bunimovich . . . . .	55
2.3.5	Quarto de “Sinai Quadrado” . . . . .	60
2.4	Discussão a cerca da interpretação física de $T$ . . . . .	66
<b>3</b>	<b>Bilhares com parede permeável</b>	<b>68</b>
3.1	Resultados numéricos . . . . .	69
3.1.1	Círculo . . . . .	70
3.1.2	Quadrado . . . . .	72
<b>4</b>	<b>Outras aplicações</b>	<b>76</b>
4.1	Bilhares isoespectrais . . . . .	76
4.1.1	Bilhar isoespectral . . . . .	77
4.1.2	Resultados numéricos . . . . .	78
4.2	Rede de círculos . . . . .	90
4.2.1	Resultados numéricos . . . . .	91
<b>5</b>	<b>Sumário e conclusões</b>	<b>94</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>99</b>

# Lista de Figuras

1.1	Exemplos de possíveis formatos para $\mathcal{C}$ , onde temos barreiras abertas (a), fechadas (b) e (d) e desconexas (c). . . . .	11
2.1	Regiões interna e externa de um bilhar fechado. . . . .	14
2.2	Curva fechada formando um bilhar, com o sistema de referência interno. Neste caso podemos parametrizar cada ponto em $s$ por um $\theta_s$ . . . . .	21
2.3	Exemplo de bilhar onde podemos encontrar um referencial tal que sempre $\mathbf{r}_b(\theta_b) \leq \mathbf{r}_c(\theta_c)$ . . . . .	22
2.4	Exemplo de bilhar onde podemos encontrar um referencial tal que para um dado conjunto de pontos $\mathbf{r}_b(\theta_b) \leq \mathbf{r}_c(\theta_c)$ . . . . .	23
2.5	Discretização da curva $\mathcal{C}$ . . . . .	31
2.6	Formas dos bilhares discutidos nos exemplos. . . . .	34
2.7	Gráfico de (a) $ T ^2$ e (b) corte em $T_{ij}$ para $i = 400$ com $k = 2,4840$ , primeira raiz de $J_0$ . . . . .	36
2.8	Gráfico de (a) $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ e (b) corte em $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ para $y = 0$ com $k = 2,4840$ , primeira raiz de $J_0$ . . . . .	36
2.9	Gráfico de (a) $ T ^2$ e (b) corte em $T_{ij}$ para $i = 400$ com $k = 4,00$ . . . . .	37
2.10	Gráfico de (a) $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ e (b) corte em $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ para $y = 0$ com $k = 4,0$ . . . . .	37
2.11	Gráfico de (a) $ T ^2$ e (b) corte em $T_{ij}$ para $i = 400$ com $k = 5,5201$ , segunda raiz de $J_0$ . . . . .	38
2.12	Gráfico de (a) $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ e (b) corte em $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ para $y = 0$ com $k = 5,5201$ , segunda raiz de $J_0$ . . . . .	38
2.13	Gráfico de $T_{10,10} \times k$ . . . . .	39
2.14	Gráfico de (a) $ T ^2$ e (b) corte em $T_{ij}$ para $i = 40$ com $k = 90,235114$ . Ângulo de incidência da ressonância $m = 10, n = 27$ . . . . .	41
2.15	Gráfico de (a) $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ e (b) corte em $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ para $y = 0.7825$ com $k = 90,235114$ . . . . .	41
2.16	Gráfico de (a) $ T ^2$ e (b) corte em $T_{ij}$ para $i = 40$ com $k = 90,453866$ ( $m = 10, n = 27$ ). . . . .	42



2.17	Gráfico de (a) $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ e (b) corte em $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ para $y = 0,1575$ com $k = 90,453866$ ( $m = 10, n = 27$ ).	42
2.18	(a) Gráfico 3d da parte interna do bilhar e (b) comparação de um corte na região interna do bilhar com $\sin^2[k_x x] \sin^2[k_y y]$ para $k = 90,453866$ ( $m = 10, n = 27$ ) em $y = 0,1575$ .	43
2.19	Gráfico de (a) $ T ^2$ para $k = 90,453866$ ( $m = 10, n = 27$ ) e $\theta = 90^\circ$ . (b) cortes em $T_{ij}$ para $\theta = 0^\circ$ (em cima) e $\theta = 90^\circ$ (em baixo) em $i = 450$ , para ambos os casos.	44
2.20	Gráfico de (a) $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ e (b) corte em $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ para $k = 90,453866$ ( $m = 10, n = 27$ ) com ângulo de incidência de $\theta = 0^\circ$ , em $y = 0,5$ .	44
2.21	Gráfico de (a) $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ e (b) corte em $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ para $k = 90,453866$ ( $m = 10, n = 27$ ) com ângulo de incidência de $\theta = 90^\circ$ , em $y = 0,5$ .	45
2.22	Gráfico de (a) $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ com uma onda incidente tipo $\cos[k_x x] \sin[k_y y]$ e (b) dois cortes em $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ em $y = -0,1875$ e $y = 0,2825$ (de cima para baixo). $k = 90,453866$ ( $m = 10, n = 27$ ).	46
2.23	(a) Gráfico de $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ com uma onda incidente tipo $\sin[k_x x] \sin[k_y y]$ e (b) dois cortes em $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ em $y = -0,1875$ e $y = 0,2825$ . $k = 90,453866$ ( $m = 10, n = 27$ ).	47
2.24	(a) Gráfico de da superposição de estados em $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ no caso degenerado $10 \times 27/27 \times 10$ , com $\theta = 45^\circ$ . (b) Cortes em várias regiões da área interna do bilhar, onde a solução numérica é representada pela linha contínua e a analítica pela linha pontilhada.	48
2.25	Bilhar quarto de Stadium.	49
2.26	Gráfico de (a) $ T ^2$ e (b) corte em $T_{ij}$ em $i = 500$ para $k = 59,55$ .	49
2.27	Gráfico de (a) $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ e (b) corte em $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ para $y = 0,0$ com $k = 59,55$ .	50
2.28	Gráfico de (a) $ T ^2$ e (b) cortes em $T_{ij}$ em $i = 500$ e $i = 750$ , respectivamente. $k = 59,68$ .	50
2.29	Gráfico de (a) $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ e (b) corte em $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ em $y = -0,08$ com $k = 59,68$ .	51
2.30	Gráfico de (a) $ T ^2$ e (b) cortes em $T_{ij}$ em $i = 500$ e $i = 540$ , respectivamente, para $k = 59,90$ .	51
2.31	Gráfico de (a) $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ e (b) corte em $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ em $y = 0,0$ com $k = 59,90$ .	52
2.32	Gráfico de (a) $ T ^2$ e (b) $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ com $k = 8,8807$ .	53
2.33	Gráfico de (a) $ T ^2$ e (b) $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ com $k = 28,2478$ .	54
2.34	Bilhar quarto de Sinai de Bunimovich.	55
2.35	Gráfico de (a) $ T ^2$ e (b) corte em $T_{ij}$ em $i = 342$ para $k = 43,01$ .	56
2.36	Gráfico de (a) $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ e (b) corte em $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ em $y = -0,25$ para $k = 43,01$ .	56
2.37	Gráfico de (a) $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ e (b) corte em $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ para $y = 0,09$ com $k = 42,97$ .	57
2.38	Gráfico de (a) $ T ^2$ e (b) cortes em $T_{ij}$ para $i = 500$ e $i = 260$ para $k = 42,70$ .	57

2.39	Gráfico de (a) $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ e (b) cortes em $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ em $y = 0,0$ e $y = 0,18$ com $k = 42,70$ . . . . .	58
2.40	Gráfico de (a) $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ e (b) corte em $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ em $y = 0,105$ para $k = 42,39$ . . . . .	58
2.41	Bilhar quarto de Sinai quadrado. . . . .	60
2.42	Gráfico de (a) $ T ^2$ e (b) cortes em $T_{ij}$ para $i = 500$ com $k = 50,379$ . . . . .	61
2.43	Gráfico de (a) $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ e (b) cortes em $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ em $y = 0,075$ e $y = -0,015$ , respectivamente, com $k = 50,349$ . . . . .	61
2.44	Gráfico de (a) $ T ^2$ e (b) cortes em $T_{ij}$ para $i = 450$ com $k = 50,372$ . . . . .	62
2.45	Gráfico de (a) $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ e (b) corte em $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ para $y = 0,075$ e $y = -0,06$ , respectivamente, para $k = 50,372$ . . . . .	62
2.46	Gráfico de (a) $ T ^2$ e (b) corte em $T_{ij}$ para $i = 500$ com $k = 53,3146$ , ressonância $m = 12$ e $n = 12$ do quadrado. . . . .	64
2.47	Gráfico de (a) $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ e (b) e dois cortes em $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ para $y = 0,21$ e $y = -0,375$ , respectivamente, com $k = 53,3146$ , ressonância $m = 12$ e $n = 12$ do quadrado. Aqui o ângulo de incidência tem um acréscimo de $180^\circ$ em relação à figura anterior. . . . .	65
2.48	Gráfico de (a) $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ e (b) e dois cortes em $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ para $y = 0,21$ e $y = -0,375$ , respectivamente, com $k = 53,3146$ , ressonância $m = 12$ e $n = 12$ do quadrado. . . . .	65
2.49	Esquemas de como agem fisicamente a matriz $T$ e função de Green $G_0$ na construção da parte espalhada da função de onda $\psi^{scat}(\mathbf{r})$ para (a) $\mathbf{r}$ externo e (b) $\mathbf{r}$ interno à barreira. . . . .	66
3.1	Gráficos de $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ , $ T ^2$ e seus respectivos cortes para $\gamma$ igual (a) 10, (b) 100, (c) 1000 (que já apresenta comportamento de uma barreira impenetrável, $\gamma \rightarrow \infty$ ). Os cortes em $\psi(\mathbf{r})$ foram todos feitos em $y = 0,0$ (meio do bilhar circular) e $i = 400$ em $T_{ij}$ . A onda incidente tem $k = 8,6537$ , segunda raiz de $J_0$ . A linha pontilhada mostra a borda do bilhar. . . . .	70
3.2	Gráficos de $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ , $ T ^2$ e seus respectivos cortes para $\gamma$ de (a) 10, (b) 100, (c) 1000 (que já apresenta comportamento de uma barreira impenetrável, $\gamma \rightarrow \infty$ ). Os cortes em $\psi(\mathbf{r})$ foram todos feitos em $y = 0,0$ (meio do bilhar circular) e $i = 400$ em $T_{ij}$ . A onda incidente tem $k = 10,50$ . A linha pontilhada mostra a borda do bilhar. . . . .	71
3.3	(a) $ T ^2$ e (b) corte em $T_{ij}$ em $i = 405$ para $\mathcal{T} = 50\%$ com $k = 93,16$ e ângulo de incidência de $0^\circ$ . . . . .	72
3.4	(a) $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ e (b) cortes em $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ para $y = 0,125$ , $y = 0,5$ e $y = 0,75$ (de baixo para cima), para $\mathcal{T} = 50\%$ com $k = 93,16$ e ângulo de incidência de $0^\circ$ . . . . .	72

3.5	Gráficos de $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ , $ T ^2$ e seus respectivos cortes para transmissão de (a) 70%, (b) 50%,(c) 30%,(d) 10%,(e) 0,01%,(f) 0,000001% (que já apresenta comportamento de uma barreira impenetrável, $\gamma \rightarrow \infty$ ). Os cortes em $\psi(\mathbf{r})$ foram todos feitos em $y = 0,0$ (meio do bilhar circular) e para $T$ , $i = 400$ em (a) e $i = 200$ em (b). A onda incidente tem $k = 93,3005417$ (ressonância $21 \times 21$ do quadrado), com o ângulo de incidência correto para a ressonância. A linha pontilhada mostra a borda do bilhar. . . . .	74
3.6	Gráficos de $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ , $ T ^2$ e seus respectivos cortes para transmissão de (a) 70%, (b) 50%,(c) 30%,(d) 10%,(e) 0,01%,(f) 0,000001% (que já apresenta comportamento de uma barreira impenetrável, $\gamma \rightarrow \infty$ ). Os cortes foram todos feitos em $y = 0.5$ (meio do bilhar quadrado). A onda incidente tem $k = 93,16$ , fora de qualquer ressonância do quadrado. A linha pontilhada mostra a borda do bilhar. . . . .	75
4.1	Par de bilhares isoespectrais $GW$ . . . . .	77
4.2	Comparação do cálculo de (a) Driscoll [45] com o cálculo (b) pelo método do contorno de paredes para o par de bilhares $GW$ . Autovalor $k = 1.593092$ , primeira ressonância. . . . .	78
4.3	Comparação do cálculo de (a) Driscoll [45] com o cálculo (b) pelo método do contorno de paredes para o par de bilhares $GW$ . Autovalor $k = 1.911961$ , segunda ressonância. . . . .	79
4.4	Comparação do cálculo de (a) Driscoll [45] com o cálculo (b) pelo método do contorno de paredes para o par de bilhares $GW$ . Autovalor $k = 3.397263$ , oitava ressonância. . . . .	80
4.5	Corte em $\psi(\mathbf{r})$ do bilhar $A$ , para as 3 ressonâncias mostradas anteriormente. Temos em (a), primeira ressonância, cortes em $y = 2,01$ , $y = 0,00$ e $y = -0,24$ ; (b), segunda ressonância, cortes em $y = 2,01$ , $y = 0,00$ e $y = 0,26$ ; e (c), oitava ressonância, cortes em $y = 1,76$ , $y = 0,00$ e $y = 0,26$ . . . . .	81
4.6	Corte em $\psi(\mathbf{r})$ do bilhar $B$ , para as 3 ressonâncias mostradas anteriormente. Temos em (a), primeira ressonância, cortes em $y = 2,26$ , $y = 0,00$ e $y = -0,49$ ; (b), segunda ressonância, cortes em $y = 3,02$ , $y = 0,00$ e $y = 0,76$ ; e (c), oitava ressonância, cortes em $y = 2,01$ , $y = 0,00$ e $y = 0,39$ . . . . .	81
4.7	(a) Gráfico de $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ de $A$ fora da ressonância, $k = 1,75226$ (entre a primeira e segunda ressonância), e (b) cortes em $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ para $y = 2,51$ , $y = 0,00$ e $y = -0,99$ . . . . .	82
4.8	(a) Gráfico de $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ de $B$ fora da ressonância, $k = 1,75226$ (entre a primeira e segunda ressonância), e (b) cortes em $\psi$ para $y = 3,02$ , $y = 0,00$ e $y = -0,24$ . . . . .	82

4.9	(a) $ T ^2$ na oitava ressonância ( $k = 3.397263$ ) de $A$ e (b) cortes em $T_{ij}$ para $i = 100$ , $i = 200$ e $i = 300$ , respectivamente. . . . .	84
4.10	(a) $ T ^2$ na oitava ressonância ( $k = 3.397263$ ) de $B$ e (b) cortes em $T_{ij}$ para $i = 100$ , $i = 200$ e $i = 315$ , respectivamente. . . . .	84
4.11	(a) $ T ^2$ de $A$ fora da ressonância, $k = 1,75226$ (entre a primeira e segunda ressonância), e (b) corte em $T_{ij}$ para $i = 200$ . . . . .	85
4.12	(a) $ T ^2$ de $B$ fora da ressonância, $k = 1,75226$ (entre a primeira e segunda ressonância), e (b) corte em $T_{ij}$ para $i = 200$ . . . . .	85
4.13	Gráfico de $ T_{10,10}  \times k$ para um bilhar com $d = 2$ . Com a curva pontilhada referindo-se ao bilhar $A$ e a cheia ao bilhar $B$ . . . . .	86
4.14	Evolução da matriz $T$ do bilhar isoespectral $A$ com $k$ variando de $+0,005$ (ou $0,01$ , nos casos mais distantes das ressonâncias) a cada gráfico, passando pela primeira ressonância ( $k = 1,593092$ ) em (i) e chegando na segunda ( $k = 1,911961$ ) em (u). . . . .	87
4.15	Evolução da matriz $T$ do bilhar isoespectral $B$ com $k$ variando de $+0,005$ (ou $0,01$ , nos casos mais distantes das ressonâncias) a cada gráfico, passando pela primeira ressonância ( $k = 1,593092$ ) em (i) e chegando na segunda ( $k = 1,911961$ ) em (u). . . . .	88
4.16	Gráfico $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ no espalhamento por uma rede de círculos ordenados. Nos gráficos temos a transmissão dos círculos variando. Em (a) $\mathcal{T} = 0.00001\%$ , (b) $\mathcal{T} = 10\%$ , (c) $\mathcal{T} = 50\%$ e (d) $\mathcal{T} = 90\%$ , com $k = 15$ (primeira coluna) e $k = 20$ (coluna segunda). . . . .	91
4.17	Cortes em $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ no espalhamento por uma rede de círculos impenetráveis ordenados para $k = 15$ . Em (a) $y = 0,0$ (o corte passa pelo meio da primeira linha de círculos), (b) $y = 0,125$ (o corte passa entre a primeira e a segunda linha de círculos). As flexas indicam o centro de cada círculo. . . . .	92
4.18	Cortes em $ \psi(\mathbf{r}) ^2$ no espalhamento por uma rede de círculos ordenados com $\mathcal{T} = 50\%$ e $k = 15$ . Em (a) $y = 0,0$ (o corte passa pelo meio da primeira linha de círculos), (b) $y = 0,125$ (o corte passa entre a primeira e a segunda linha de círculos). As flexas indicam o centro de cada círculo. . . . .	92
4.19	(a) Gráfico de $ T ^2$ no espalhamento por uma rede de círculos impenetráveis ordenados e (b) cortes em $i = 200$ , $i = 400$ e $i = 600$ com $k = 20$ . . . . .	93

# Capítulo 1

## Introdução

Problemas de valor de fronteira sempre foram de grande interesse experimental e teórico na Física. Nas últimas décadas, com a evolução da engenharia quântica, se desenvolveu grandemente a área de estudo de problemas de fronteira no âmbito da mecânica quântica experimental, exemplos disso são os *pontos quânticos* [1] e os *currais quânticos* [2][3]. Sistemas como esses podem ser tratados teoricamente através dos chamados bilhares, curvas fechadas com a função de onda se anulando sobre as bordas [4].

Face a estes interesses, vários métodos têm sido desenvolvidos para a resolução de tais sistemas, como:

- “boundary integral method”: função de onda é expressa em termos de uma integral de linha e sua derivada normal sobre a fronteira. O espectro de autovalores é obtido encontrando as raízes de um determinante de Fredholm[5][6][7][8];
- decomposição por ondas planas: utiliza uma superposição de ondas planas como Ansatz para a solução da equação de Helmholtz[9][10];
- “boundary element method”: Método semelhante ao “boundary integral method”, onde o determinante de Fredholm é resolvido a partir de uma discretização da equação integral envolvida [11];
- teoria de perturbação: o problema de espalhamento é resolvido considerando o potencial de interação barreira como uma perturbação ao problema da partícula livre, sendo resolvido pelo formalismo da matriz  $S$  [12];
- “scaling method”: calcula diretamente os autovalores e autofunções do bilhar resolvendo uma equação de autovalores generalizada em termos das quantidades relacionadas à barreira [13].

Recentemente foi desenvolvido um novo método para a solução de problemas de espalhamento quântico de uma partícula por barreiras arbitrárias, o *método do contorno de paredes* [14], que pode ser aplicado a barreiras espalhadoras abertas ou fechadas, desconexas (divididas em várias partes) ou não, ver figura (1.1).

Neste trabalho iremos aplicar o método do contorno de paredes na resolução do problema de bilhares quânticos em duas dimensões.

Iniciaremos o segundo capítulo fazendo uma discussão do método e desenvolvendo uma forma deste mais apropriada à aplicação no estudo de bilhares quânticos. Desta abordagem, obtemos a matriz  $T$  como o objeto matemático principal de toda a nossa análise, visto que ela carrega informações importantes à cerca da energia e geometria do problema, além de fornecer as soluções corretas de espalhamento para a parte externa ao bilhar e, nos casos em que a a energia da onda incidente é um autovalor do problema, fornece os autoestados do problema interno.

Como aplicação então discutiremos vários problemas:

- solução de bilhares gerais de várias formas;
- análise da dualidade dentro/fora e do princípio da transparência[15][16][17];
- obtenção da matriz  $S$  para a solução externa de bilhares.

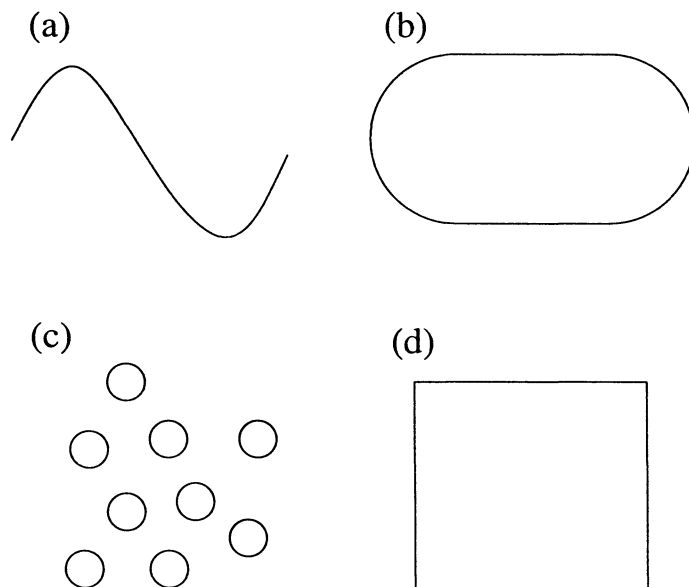


Figura 1.1: Exemplos de possíveis formatos para  $\mathcal{C}$ , onde temos barreiras abertas (a), fechadas (b) e (d) e desconexas (c).

No terceiro capítulo aplicaremos nossos resultados no estudo de bilhares permeáveis, caso onde é conferida à função de onda probabilidades de transmissão e reflexão através da parede do bilhar, sendo este o caso mais geral do método.

No penúltimo capítulo o método será aplicado a mais um problema de bilhares, os bilhares isoespectrais, problema relativamente novo que estuda o caso de um par de bilhares de geometria diferente que possuem espectros de energia idênticos [18][19][20].

Ainda no penúltimo capítulo estudaremos o problema de uma onda interagindo com uma rede de espalhadores na forma de bilhares. Este problema é interessante do ponto de vista do estudo de transporte de cargas em meios ordenados e desordenados[21], condutância[22] e vários outros casos envolvendo redes [23][24][25].

Finalmente, no último capítulo faremos nossas considerações finais.

## Capítulo 2

# O método do contorno de paredes

Existem várias maneiras de se encontrar soluções de espalhamento para curvas abertas e fechadas. Fisicamente estas curvas representam barreiras onde uma partícula fica presa dentro de uma certa região (curva fechada, ver figura (1.1a)) ou uma barreira onde a partícula não tem possibilidade de ser presa (curva aberta, ver figuras (1.1b) e (1.1d)).

No caso das curvas fechadas, conhecidas como *bilhares*, podemos dividir o espaço em duas regiões: interna (parte de dentro da curva) e externa (parte de fora da curva), ver figura (2.1). Na resolução desse tipo de problemas, geralmente, a solução encontrada vale apenas para um dos lados da barreira. Sendo assim é necessário que resolvamos duas vezes o problema para achar sua solução completa (para ambos os lados). Certos trabalhos exploram conexões existentes entre a solução da parte externa (problema de espalhamento) e interna (solução do bilhar) dos bilhares [15] [17].

Recentemente foi desenvolvido [14] um método para a obtenção de autoestados de espalhamento de barreiras desconexas, abertas ou fechadas (ver figura 1.1) com condições de contorno muito gerais, o *método do contorno de paredes*. O método é simples, tanto conceitual quanto numericamente, nos fornecendo uma abordagem interessante e acessível para a resolução de problemas de fronteiras de formatos variados.

Neste capítulo será apresentada uma breve introdução ao espalhamento quântico necessária ao entendimento da formulação e o “funcionamento” do método do contorno de paredes. Serão mostrados sua aplicação ao caso da dualidade dentro/fora e resultados da aplicação do método ao cálculo de espalhamento por vários tipos de barreiras.

O caso de espalhamento em que iremos nos ater neste trabalho dá ênfase ao problema de barreiras fechadas. Nesta situação temos mais de uma região a ser considerada, uma parte externa e outra interna. Várias maneiras foram desenvol-



vidas para se encontrar soluções de espalhamento para bilhares fechados. Dentre todos, o método mais utilizado na resolução destes problemas (problemas de valor de fronteira) é o “boundary integral method” [7][8], inclusive na obtenção da solução para bilhares quânticos [5] [26]. O método baseia-se na conversão de uma equação diferencial em uma equação integral sobre a fronteira da região física do sistema (espalhador). Embora o “boundary integral method” seja muito útil, ele tem algumas desvantagens. Mais notavelmente, a solução obtida através desse método, e de outros métodos como os citados anteriormente, só vale em um lado da fronteira fechada [6].

Veremos no desenvolvimento da secção seguinte que o método do contorno de paredes fornece a solução para ambas as regiões de um bilhar fechado a partir de uma única equação (um único cálculo), que fornece a solução para a função de onda espalhada  $\psi(\mathbf{r})$  em todo o espaço. Sendo assim a presente abordagem constitui-se em uma ferramenta muito útil na solução de problemas de condições de fronteira.

## 2.1 O Método

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

No espalhamento por uma parede precisamos que a onda interaja com o potencial somente *sobre os pontos* que pertencem à parede  $\mathcal{C}$ , comportando-se no resto do espaço como uma partícula livre. Se criarmos um potencial o qual consiga si-

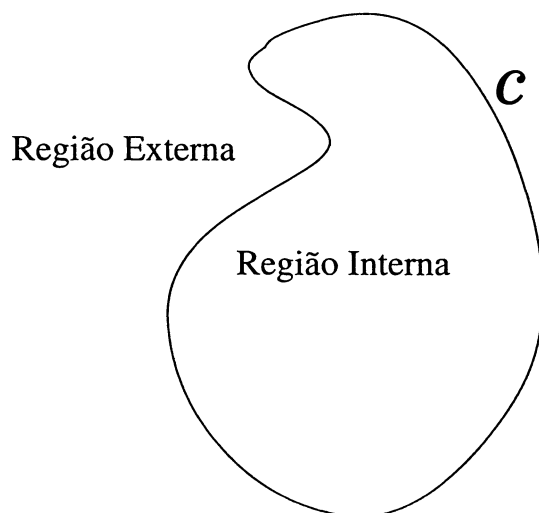


Figura 2.1: Regiões interna e externa de um bilhar fechado.

mular este comportamento e, em um limite apropriado, leve a função de onda a satisfazer a condição de fronteira desejada, poderemos usar a abordagem da teoria de espalhamento para a resolução do problema.

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

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

onde a integral é feita sobre a superfície  $\mathcal{C}$ , o termo  $\gamma(s)$  controla a permeabilidade da barreira em questão e  $\alpha(s)$  é um termo que controla a escolha da condição de contorno desejada. Estes dois termos independem entre si. O método do contorno de paredes mostra que, ao resolvermos o problema, temos no final que a função de onda do sistema satisfaz à condição

$$\alpha(s) \psi(\mathbf{r}(s))|_{\mathcal{C}} + [1 - \alpha(s)] \partial_{\mathbf{n}}(s) \psi(\mathbf{r}(s))|_{\mathcal{C}} = 0, \quad (2.2)$$

com  $\gamma(s) \rightarrow \infty$  em (2.1).

A ação da função delta no potencial proposto garante que a partícula só sofrerá a ação do potencial sobre  $\mathcal{C}$  e o parâmetro  $\gamma$  controla a permeabilidade da parede. Para valores de  $\gamma$  finitos, o potencial (2.1) terá o efeito de uma parede permeável. Se  $\gamma(s) \rightarrow \infty$  o efeito será de uma parede infinita (impenetrável). Essas características satisfazem às exigências para o potencial que permitem utilizarmos a abordagem de espalhamento para o problema de condição de fronteira, tendo como resultado um método amplo e acurado para a resolução deste problema para formas arbitrárias.

Utilizaremos em todo o trabalho o termo  $\alpha(s) = 1$ , isso faz com que o potencial (2.1) satisfaça uma condição de contorno do tipo Dirichlet.

### 2.1.1 Desenvolvimento do método

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

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

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

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

que é a equação diferencial de espalhamento para um potencial arbitrário  $U(\mathbf{r})$  a ser resolvida. Podemos resolvê-la pelo método da função de Green que consiste em transformá-la em uma equação integral da seguinte maneira. Existe para (2.4) uma função  $G_0(\mathbf{r})$  tal que

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

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

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

com  $(\nabla^2 + k^2)\varphi(\mathbf{r}) = 0$  (ou  $H_0(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r})$ ) e  $G_0$  sendo a função de Green da partícula livre, obedece à (2.4). Esta equação integral na qual transformamos (2.4) é chamada equação de Lipmann-Schwinger.

Como já adiantamos, para simular a ação de uma parede sobre a partícula utilizaremos nos nossos cálculos um potencial do tipo

$$V(\mathbf{r}) = \int_{\mathcal{C}} ds \gamma(s) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}(s)), \quad (2.7)$$

onde fazemos a integral sobre a superfície  $\mathcal{C}$ , podendo  $\mathcal{C}$  ser conexa ou desconexa. Como estamos interessados na discussão de bilhares (condição de contorno de Dirichlet) em toda a tese iremos considerar (2.7) ao invés do caso mais geral (2.1).  $\mathbf{r}$  é o vetor posição do ponto  $s$  sobre  $\mathcal{C}$  e  $\gamma(s)$  é a “força” com que o potencial age em cada ponto de  $s$ . Claramente,  $V(\mathbf{r}) = 0$  para qualquer  $\mathbf{r}$  que não pertença a  $\mathcal{C}$ . No limite de  $\gamma \rightarrow \infty$ , a autofunção irá satisfazer (2.2) com  $\alpha(s) = 1$ , condição de contorno de Dirichlet,  $\psi(\mathbf{r}) = 0$  em  $\mathcal{C}$ . Para  $\gamma(s)$ , finito uma função de onda submetida a um potencial do tipo de (2.7) irá satisfazer uma condição de fronteira do tipo permeável.

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

$$\psi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \left[ \int_{\mathcal{C}} ds \gamma(s) \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}(s)) \right] \psi(\mathbf{r}'),$$

a parte em  $\delta$  do potencial irá facilitar a resolução da integral de volume que irá nos fornecer a seguinte equação

$$\psi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) + \int_{\mathcal{C}} ds' \gamma(s') G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}(s')) \psi(\mathbf{r}(s')). \quad (2.8)$$

Podemos interpretar  $\mathcal{C}$  como uma barreira permeável caracterizada por  $\gamma(s)$ . Qualquer onda plana de número de onda  $k$  que insida perpendicularmente ao contorno  $\mathcal{C}$  em  $s$  tem uma probabilidade  $\mathcal{T} = 4k^2 / (4k^2 + \gamma(s)^2)$  de ser transmitida através de  $s$ , e uma probabilidade  $\mathcal{R} = \gamma(s)^2 / (4k^2 + \gamma(s)^2)$  de ser refletida. Fazendo o limite de  $\gamma \rightarrow \infty$  em  $\mathcal{T}$ , podemos ver que a probabilidade de transmissão tende a zero, o que faz com que a autofunção se anule sobre a barreira, satisfazendo assim a condição de contorno de Dirichlet, como já vimos no caso da análise do potencial (2.7).

Consideremos em (2.8) um vetor posição  $\mathbf{r} = \mathbf{r}(s_b)$  sobre um ponto do  $b$  em  $\mathcal{C}$  e também que  $\gamma(s)$  assume um valor constante  $\gamma$  sobre todo o contorno da fronteira.

O caso em que  $\gamma$  varia sobre  $s$  pode ser tratado da mesma maneira que o caso constante, porém existem complicações adicionais que podem ser evitadas sem prejuízos ao entendimento do método.

Podemos escrever  $\varphi(\mathbf{r})$  sobre um ponto  $s_b$  na barreira como

$$\varphi(\mathbf{r}(s_b)) = \int_{\mathcal{C}} ds_a T_{\gamma}^{-1}(s_b, s_a) \psi(\mathbf{r}(s_a)), \quad (2.9)$$

onde  $T_{\gamma}^{-1}(s_b, s_a) = \delta(s_b - s_a) - \gamma G_0(\mathbf{r}(s_b), \mathbf{r}(s_a))$ . Se substituirmos  $T_{\gamma}^{-1}(s_b, s_a)$  em (2.9) teremos

$$\text{ingrid17}\psi(\mathbf{r}(s_b)) = \varphi(\mathbf{r}(s_b)) + \gamma \int_{\mathcal{C}} ds_a G_0(\mathbf{r}(s_b), \mathbf{r}(s_a)) \psi(\mathbf{r}(s_a)), \quad (2.10)$$

que é o valor de  $\psi(\mathbf{r}(s_b))$  sobre o ponto  $s_b$  da barreira. Podemos observar pela definição de  $T_{\gamma}^{-1}(s_b, s_a)$  que esta é simétrica perante a troca  $s_a \leftrightarrow s_b$ , visto que  $G_0(\mathbf{r}(s_b), \mathbf{r}(s_a)) = G_0(\mathbf{r}(s_a), \mathbf{r}(s_b))$  para qualquer tipo de condição de contorno [27]. Podemos ainda exprimir a função  $T_{\gamma}(s_b, s_a)$  pelas seguintes relações

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

Na verdade podemos definir  $T_{\gamma}(s_b, s_a)$  por apenas uma das relações acima, a outra advém do fato de que  $T_{\gamma}$  deve ser simétrica como  $T_{\gamma}^{-1}$ . Podemos agora encontrar uma forma para  $\psi(\mathbf{r})$  sobre a fronteira que dependa de  $T_{\gamma}(s_b, s_a)$ . Para tanto, multipliquemos (2.9) por  $T_{\gamma}(s_c, s_b)$

$$T_{\gamma}(s_c, s_b) \varphi(\mathbf{r}(s_b)) = \int_{\mathcal{C}} ds_a T_{\gamma}(s_c, s_b) T_{\gamma}^{-1}(s_b, s_a) \psi(\mathbf{r}(s_a)), \quad (2.12)$$

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

$$\int_{\mathcal{C}} ds_b T_{\gamma}(s_c, s_b) \varphi(\mathbf{r}(s_b)) = \int_{\mathcal{C}} ds_a \delta(s_c - s_a) \psi(\mathbf{r}(s_a)), \quad (2.13)$$

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

$$\psi(\mathbf{r}(s_c)) = \int_{\mathcal{C}} ds_b T_{\gamma}(s_c, s_b) \varphi(\mathbf{r}(s_b)). \quad (2.14)$$

Usando essa equação no integrando de (2.10)

$$\psi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) + \int_{\mathcal{C}} \int_{\mathcal{C}} ds_b ds_a G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}(s_b)) \gamma T_{\gamma}(s_b, s_a) \varphi(\mathbf{r}(s_a)). \quad (2.15)$$

Com esta equação chegamos a um resultado interessante. Se de alguma maneira pudermos calcular  $T_\gamma$ , então poderemos obter a função de onda  $\psi(\mathbf{r})$  para qualquer lugar do espaço por simples quadraturas.

Trabalhemos então com  $T_\gamma$ , para a qual podemos derivar uma expressão em série. Para isso inserimos a definição de  $T_\gamma^{-1}(s_b, s_a)$  em uma das identidades (2.11), a primeira por exemplo,

$$\begin{aligned} \delta(s_b - s_a) &= \int_{\mathcal{C}} ds_c T_\gamma(s_b, s_c) [\delta(s_c - s_a) - \gamma G_0(\mathbf{r}(s_c), \mathbf{r}(s_a))] \\ &= \int_{\mathcal{C}} ds_c T_\gamma(s_b, s_c) \delta(s_c - s_a) - \int_{\mathcal{C}} ds_c T_\gamma(s_b, s_c) \gamma G_0(\mathbf{r}(s_c), \mathbf{r}(s_a)) \\ &= T_\gamma(s_b, s_a) - \int_{\mathcal{C}} ds_c T_\gamma(s_b, s_c) \gamma G_0(\mathbf{r}(s_c), \mathbf{r}(s_a)) \end{aligned}$$

isolando  $T_\gamma(s_b, s_a)$  teremos

$$T_\gamma(s_b, s_a) = \delta(s_b - s_a) + \int_{\mathcal{C}} ds_c T_\gamma(s_b, s_c) \gamma G_0(\mathbf{r}(s_c), \mathbf{r}(s_a)) \quad (2.16)$$

e então resolvemos recursivamente a equação integral pelo método das *séries de Neumann* [28], o que nos fornece

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

onde

$$\begin{aligned} T_\gamma^{(j)}(s_b, s_a) &= \gamma^j \int ds_1 \dots ds_{j-1} G_0(\mathbf{r}(s_b), \mathbf{r}(s_{j-1})) G_0(\mathbf{r}(s_{j-1}), \mathbf{r}(s_{j-2})) \dots \\ &\quad \times \dots G_0(\mathbf{r}(s_2), \mathbf{r}(s_1)) G_0(\mathbf{r}(s_1), \mathbf{r}(s_a)). \end{aligned} \quad (2.18)$$

Até agora discutimos o caso para um  $\gamma$  constante sobre a barreira, mas finito. Para trabalharmos com o caso importante de um  $\gamma$  infinito, primeiro achemos a relação (2.11) condizente com tal limite. Usando a primeira igualdade de (2.11) e a definição de  $T_\gamma^{-1}(s_b, s_a)$

$$\delta(s_b - s_a) = \int_{\mathcal{C}} ds_c T_\gamma(s_b, s_c) [\delta(s_c - s_a) - \gamma G_0(\mathbf{r}(s_c), \mathbf{r}(s_a))]$$

tirando  $-\gamma$  em evidência teremos

$$\delta(s_b - s_a) = - \int_{\mathcal{C}} ds_c \gamma T_\gamma(s_b, s_c) \left[ -\frac{\delta(s_c - s_a)}{\gamma} + G_0(\mathbf{r}(s_c), \mathbf{r}(s_a)) \right]$$

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

$$\begin{aligned}\delta(s_b - s_a) &= - \int_{\mathcal{C}} ds_c \lim_{\gamma \rightarrow \infty} \gamma T_\gamma(s_b, s_c) \lim_{\gamma \rightarrow \infty} \left[ -\frac{\delta(s_c - s_a)}{\gamma} + G_0(\mathbf{r}(s_c), \mathbf{r}(s_a)) \right] \\ &= - \int_{\mathcal{C}} ds_c \lim_{\gamma \rightarrow \infty} \gamma T_\gamma(s_b, s_c) [0 + G_0(\mathbf{r}(s_c), \mathbf{r}(s_a))] \\ &= - \int_{\mathcal{C}} ds_c \lim_{\gamma \rightarrow \infty} [\gamma T_\gamma(s_b, s_c)] G_0(\mathbf{r}(s_c), \mathbf{r}(s_a))\end{aligned}$$

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

$$\delta(s_b - s_a) = \int_{\mathcal{C}} ds_c T(s_b, s_c) G_0(\mathbf{r}(s_c), \mathbf{r}(s_a)).$$

O calculo é semelhante para a segunda igualdade, logo

$$\begin{aligned}\delta(s_b - s_a) &= \int_{\mathcal{C}} ds_c T(s_b, s_c) G_0(\mathbf{r}(s_c), \mathbf{r}(s_a)) \\ &= \int_{\mathcal{C}} ds_c G_0(\mathbf{r}(s_b), \mathbf{r}(s_c)) T(s_c, s_a),\end{aligned}\tag{2.19}$$

por questão de simetria de  $G_0$ .

Para a equação (2.15), tirando o limite  $\gamma \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r}) &= \varphi(\mathbf{r}) + \lim_{\gamma \rightarrow \infty} \int_{\mathcal{C}} \int_{\mathcal{C}} ds_b ds_a G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}(s_b)) \gamma T_\gamma(s_b, s_a) \varphi(\mathbf{r}(s_a)) \\ &= \varphi(\mathbf{r}) + \int_{\mathcal{C}} \int_{\mathcal{C}} ds_b ds_a G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}(s_b)) \lim_{\gamma \rightarrow \infty} [\gamma T_\gamma(s_b, s_a)] \varphi(\mathbf{r}(s_a)),\end{aligned}$$

pois  $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}(s_b))$  e  $\varphi(\mathbf{r}(s_a))$  não dependem de  $\gamma$ . Então utilizando a definição de  $T(s_b, s_a)$ , temos

$$\psi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) - \int_{\mathcal{C}} \int_{\mathcal{C}} ds_b ds_a G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}(s_b)) T(s_b, s_a) \varphi(\mathbf{r}(s_a)).\tag{2.20}$$

Esta é equação de espalhamento que nos dá a função de onda  $\psi(\mathbf{r})$  em todo o espaço após o espalhamento da onda por uma barreira impenetrável.

Podemos verificar se (2.20) satisfaz à condição de fronteira necessária. Se fizermos  $\mathbf{r} = \mathbf{r}(s)$  em (2.20)

$$\psi(\mathbf{r}(s)) = \varphi(\mathbf{r}(s)) - \int_{\mathcal{C}} \int_{\mathcal{C}} ds_b ds_a G_0(\mathbf{r}(s), \mathbf{r}(s_b)) T(s_b, s_a) \varphi(\mathbf{r}(s_a)).\tag{2.21}$$

utilizando (2.19) podemos escrever

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r}(s)) &= \varphi(\mathbf{r}(s)) - \int_{\mathcal{C}} ds_a \delta(s - s_a) \varphi(\mathbf{r}(s_a)). \\ &= \varphi(\mathbf{r}(s)) - \varphi(\mathbf{r}(s)) \\ &= 0\end{aligned}\tag{2.22}$$

Então, como visto anteriormente, para o caso onde temos um  $\gamma$  infinito a função de onda se anula na barreira  $C$  satisfazendo assim a condição de fronteira de Dirichlet.

Para finalizar a introdução ao método, vale enfatizar que a equação (2.20) é nosso ponto chave. Analisando-a concluímos que, conseguindo calcular  $T$  de alguma maneira, teremos condições de calcular  $\psi(\mathbf{r})$  em todo o espaço. Em geral pode ser difícil calcular  $T$  analiticamente. No entanto, veremos adiante um método numérico simples e eficiente para efetuar este cálculo. Isto faz do método um instrumento muito útil na obtenção de autoestados de espalhamento e estados ligados de barreiras arbitrárias desconexas, abertas ou fechadas.

Exemplos analíticos dos poucos casos que podem ser resolvidos podem ser encontrados em [14]. Citaremos aqui as equações básicas da solução analítica do bilhar circular a partir do método do contorno de paredes. Tal solução é interessante para uma posterior comparação com o resultado numérico obtido para este bilhar.

Considerando  $C = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 \mid x^2 + y^2 = R^2\}$ , parametrizado por  $\theta$ , teremos de (2.17) para  $T_\gamma$

$$T_\gamma(\theta'', \theta') = \gamma \left[ \delta(\theta'' - \theta') + \left( \frac{\gamma F_0}{1 - 2\pi\gamma F_0} + 2 \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\gamma F_l}{1 - 2\pi\gamma F_l} \cos[l(\theta'' - \theta')] \right) \right], \quad (2.23)$$

onde  $F_l = \sigma J_l(kR)H_l(kR)$ , com  $\sigma = (2\mu/\hbar^2)(-i/4)$

Fazendo  $\varphi(\mathbf{r}) = J_n(kr)\exp[in\theta]/\mathcal{N}$ , onde  $\mathcal{N}$  é uma constante de normalização e inserindo juntamente com (2.23) em (2.15), teremos para  $\psi(\mathbf{r})$

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\mathcal{N}} \left( \frac{J_n(kr)}{1 - 2\pi\gamma\sigma J_n(kR)H_n^{(1)}(kR)} \right) \exp[in\theta], r < R, \quad (2.24)$$

e

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\mathcal{N}} \left( J_n(kr) + \frac{2\pi\gamma\sigma [J_n(kR)]^2 H_n^{(1)}(kR)}{1 - 2\pi\gamma\sigma J_n(kR)H_n^{(1)}(kR)} \right) \exp[in\theta], r > R. \quad (2.25)$$

Pode-se verificar pela resolução direta da equação de Schrödinger que esta é a solução correta para uma partícula interagindo com uma função delta radial com  $\gamma$  finito. Para  $\gamma \rightarrow \infty$  temos a que parte radial de  $\psi(\mathbf{r})$  em (2.24) só é diferente de zero se  $kR$  for uma das raízes  $\alpha_{nm}$  de  $J_n$ , neste caso a parte radial é igual a  $J_n(\alpha_{nm}r/R)$ , que é a solução correta para uma partícula presa dentro de uma região circular. Em (2.25) a parte radial com  $\gamma$  tendendo ao infinito nos fornecerá  $i[J_n(kr)N_n(kR) - J_n(kR)N_n(kr)]/H_n^{(1)}(kR)$ , que é a solução para uma partícula interagindo com a parte externa de uma parede circular impenetrável.

## 2.1.2 Bilhares

Os bilhares são caracterizados por uma única curva fechada  $C$  impenetrável, quantitativamente isto significa que a função de onda deve anular-se sobre a borda do bilhar.

No estudo desse tipo de problema temos interesse tanto na solução de espalhamento na região externa como na obtenção dos auto estados do bilhar na parte interna.

Para a análise a seguir iremos assumir que a origem do sistema de referência está sempre localizado na parte interna do bilhar, assim, escolhendo um sistema polar de coordenadas, poderemos sempre parametrizar um ponto  $s$  sobre  $C$  por  $0 \leq \theta_s < 2\pi$ , ver figura (2.2). Nos restringiremos também a bilhares de forma convexa para que tenhamos uma correspondência unívoca entre  $s$  e  $\theta_s$ .

Diferentemente de outros métodos, como o “boundary integral method” [7] [8], que para um dado problema de fronteira fechada tem-se que calcular duas expressões, uma para a parte externa e uma para a parte interna, aqui apenas a expressão (2.20) já nos fornece a solução de  $\psi$  para as duas regiões. Se a onda incidente no bilhar tiver uma energia  $E = k^2$  que seja um autovalor do problema (situação de ressonância), a solução da parte interna será o autoestado correto do problema, caso contrário  $\psi$  se anula nessa região.

Entender o mecanismo que leva a tal resultado tem um duplo interesse. Primeiro, revelar as sutilezas matemáticas do método do contorno de paredes, que o diferencia dos outros métodos. Segundo, dar uma nova luz sobre o problema da *dualidade dentro/fora* no estudo de bilhares [15] [17].

Então, para mostrar como o método do contorno de paredes funciona, devemos

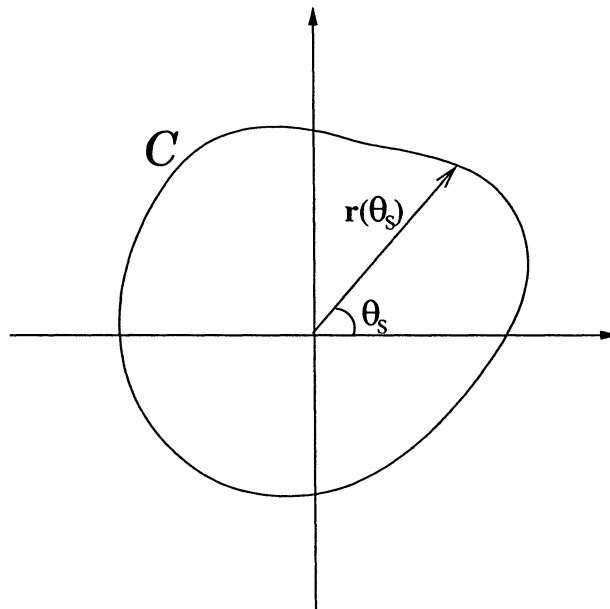


Figura 2.2: Curva fechada formando um bilhar, com o sistema de referência interno. Neste caso podemos parametrizar cada ponto em  $s$  por um  $\theta_s$ .



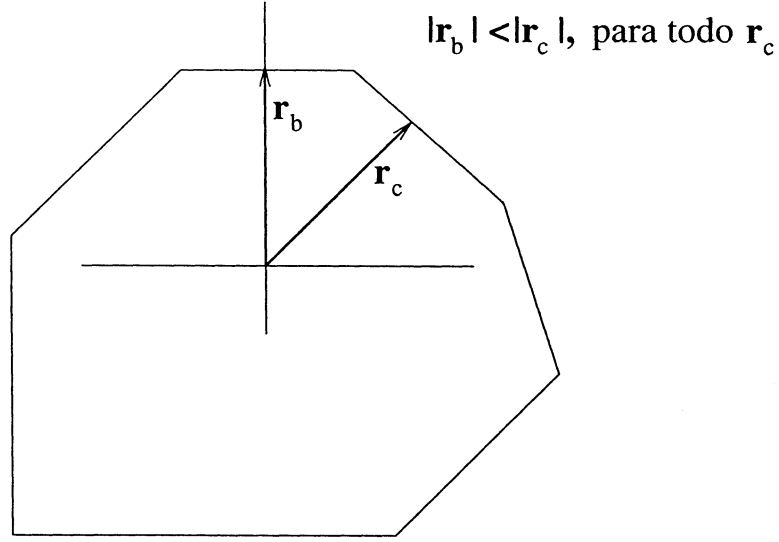


Figura 2.3: Exemplo de bilhar onde podemos encontrar um refencial tal que sempre  $\mathbf{r}_b(\theta_b) \leq \mathbf{r}_c(\theta_c)$ .

começar listando algumas relações que nos serão úteis no trabalho.

1. A função de Green em duas dimensões pode ser escrita como  $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = (4i)^{-1} H_0^+(k|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|)$ , onde  $H_n^\pm(z) = J_n(z) \pm iN_n(z)$ , com  $J_n$  e  $N_n$  as funções de Bessel e Neumann de ordem  $n$ . É importante lembrar que  $N_n(z)$  diverge quando  $z \rightarrow 0$ .
2. Se  $|\mathbf{r}_0| < |\mathbf{r}|$ , nós temos a identidade [29]  $H_0^+(k|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \phi_n(\mathbf{r}_0) h_n^{(+)}(\mathbf{r})$ , onde  $\phi_n(\mathbf{r}_0) = J_n(kr_0) \exp[-in\theta_0]$  e  $h_n^{(\pm)}(\mathbf{r}) = H_n^{(\pm)}(kr) \exp[in\theta]$ .
3. Assuma  $\mathbf{r}_b(\theta_b)$  um vetor posição qualquer sobre  $\mathcal{C}$ . Se  $\mathcal{C}$  é diferenciável em  $\mathbf{r}_b(\theta_b)$ , então podemos escolher um sistema de coordenadas para o qual qualquer vetor posição  $\mathbf{r}_c(\theta_c)$ ,  $\mathbf{r}_b(\theta_b) \leq \mathbf{r}_c(\theta_c)$  (ver (2.3)). Se em  $\mathbf{r}_b(\theta_b)$ ,  $\mathcal{C}$  não é diferenciável, podemos escolher um sistema de coordenadas onde apenas para um conjunto arbitrariamente pequeno de pontos sobre  $\mathcal{C}$ , a situação  $\mathbf{r}_b(\theta_b) \leq \mathbf{r}_c(\theta_c)$  não é satisfeita (ver (2.4))

$$\begin{aligned}
\delta(\theta_b - \theta_a) &= \int_{\mathcal{C}} d\theta_c G_0(\mathbf{r}_c, \mathbf{r}_b) T(\theta_c, \theta_a) \\
&= \int_{\mathcal{C}} d\theta_c \left[ \frac{1}{4i} H_0^+(k|\mathbf{r}_c - \mathbf{r}_b|) \right] T(\theta_c, \theta_a) \\
&= \frac{1}{4i} \int_{\mathcal{C}} d\theta_c \left[ \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \phi_n(\mathbf{r}_b) h_n^{(+)}(\mathbf{r}_c) \right] T(\theta_c, \theta_a),
\end{aligned}$$

onde fizemos  $s_a \rightarrow \theta_a$  e  $s_c \rightarrow \theta_c$ . Se multiplicarmos dos dois lados por  $\phi_l(\mathbf{r}_a)$  e integramos em  $\theta_a$

$$\int_{\mathcal{C}} d\theta_a \phi_l(\mathbf{r}_a) \delta(\theta_b - \theta_a) = \frac{1}{4i} \int_{\mathcal{C}} \int_{\mathcal{C}} d\theta_a d\theta_c \left[ \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \phi_n(\mathbf{r}_b) h_n^{(+)}(\mathbf{r}_c) \right] \phi_l(\mathbf{r}_a) T(\theta_c, \theta_a)$$

$$\phi_l(\mathbf{r}_b) = \frac{1}{4i} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \left( \int_{\mathcal{C}} \int_{\mathcal{C}} d\theta_a d\theta_c h_n^{(+)}(\mathbf{r}_c) T(\theta_c, \theta_a) \phi_l(\mathbf{r}_a) \right) \phi_n(\mathbf{r}_b). \quad (2.26)$$

Como (2.26) deve valer para todo  $l$ ,

$$\frac{1}{4i} \int_{\mathcal{C}} \int_{\mathcal{C}} d\theta_a d\theta_c h_n^{(+)}(\mathbf{r}_c) T(\theta_c, \theta_a) \phi_l(\mathbf{r}_a) = \delta_{nl}. \quad (2.27)$$

4. Qualquer função bem definida no  $\mathbb{R}^2$ , solução da equação de Helmholtz, pode ser expandida em termos de um conjunto  $\phi_l(\mathbf{r})$ . Como  $\varphi$  obedece a equação de Schrödinger para a partícula livre com energia  $E = k^2$ , nós poderemos sempre escrever

$$\varphi(\mathbf{r}) = \sum_l c_l \phi_l(\mathbf{r}). \quad (2.28)$$

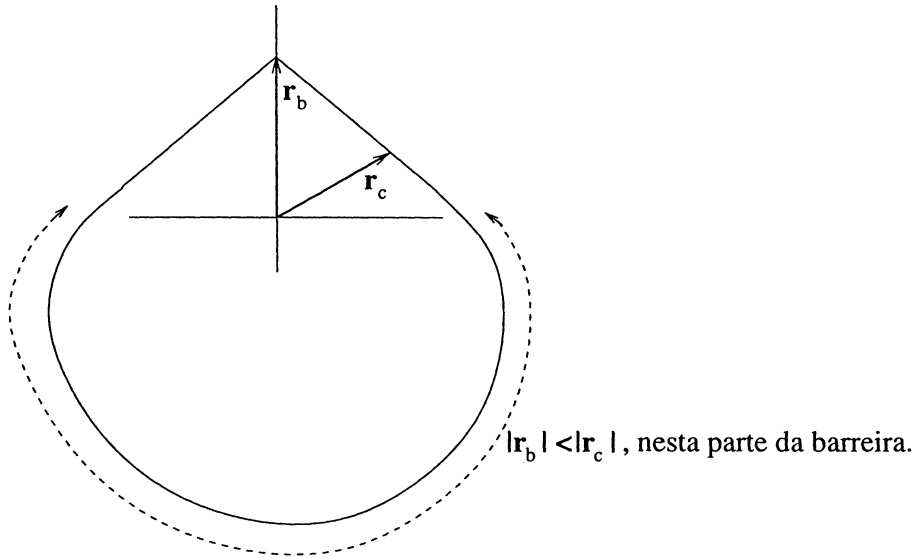


Figura 2.4: Exemplo de bilhar onde podemos encontrar um referencial tal que para um dado conjunto de pontos  $\mathbf{r}_b(\theta_b) \leq \mathbf{r}_c(\theta_c)$ .

Podemos ainda dividir a (2.28) em duas partes

$$\varphi(\mathbf{r}) = \sum_{l=\{p\}} c_l \phi_l(\mathbf{r}) + \sum_{l=\{q\}} c_l \phi_l(\mathbf{r}). \quad (2.29)$$

Em (2.29), a primeira parte representa a soma máxima de termos (a partir da série original) que se anulam identicamente em qualquer ponto da fronteira  $\mathcal{C}$ . Logo, a segunda parte não pode se anular em toda a fronteira, caso contrário teremos a solução trivial  $\varphi = 0$ . Obviamente, se não temos uma partição da série de  $\phi_l$  em  $\varphi$  que se anule em  $\mathcal{C}$ , o conjunto  $p$  é vazio e voltamos a equação (2.28).

### I. Caso interno e o mecanismo de filtro

Para o caso interno considere um sistema de coordenadas  $\mathbf{r} = (r, \theta)$  tal que  $r \leq r_b(\theta_b)$ , para qualquer  $\theta_b$ . Utilizando as considerações feitas nos ítems anteriores em (2.20)

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \varphi(\mathbf{r}) - \int_{\mathcal{C}} \int_{\mathcal{C}} d\theta_b d\theta_a \left[ \frac{1}{4i} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \phi_n(\mathbf{r}) h_n^{(+)}(\mathbf{r}_b) \right] T(\theta_b, \theta_a) \varphi(\mathbf{r}_a) \\ &= \varphi(\mathbf{r}) - \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \phi_n(\mathbf{r}) \frac{1}{4i} \int_{\mathcal{C}} \int_{\mathcal{C}} d\theta_b d\theta_a h_n^{(+)}(\mathbf{r}_b) T(\theta_b, \theta_a) \varphi(\mathbf{r}_a) \end{aligned}$$

Utilizando as expansões para  $\varphi(\mathbf{r})$  em todo o espaço e para  $\varphi(\mathbf{r}_a)$  sobre a barreira

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \sum_l c_l \phi_l(\mathbf{r}) - \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \phi_n(\mathbf{r}) \frac{1}{4i} \int_{\mathcal{C}} \int_{\mathcal{C}} d\theta_b d\theta_a h_n^{(+)}(\mathbf{r}_b) T(\theta_b, \theta_a) \times \\ &\quad \times \left[ \sum_{l=\{p\}} c_l \phi_l(\mathbf{r}_a) + \sum_{l=\{q\}} c_l \phi_l(\mathbf{r}_a) \right]. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Suponhamos inicialmente que  $E = k^2$  não é uma autoenergia do bilhar. Se isso for verdade, o conjunto  $\{p\}$  deve ser vazio, pois, este conjunto engloba os termos do somatório que se anulam sobre  $\mathcal{C}$  e resolvem corretamente a equação de Schrödinger, o que contraria a suposição inicial de que  $k$  não pertence ao espectro de energia do bilhar.

Fazendo a soma do conjunto  $\{p\}$  igual a zero em (2.30) teremos

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

usando (2.27)

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

Como  $\{p\} = 0$ , o conjunto  $\{q\}$  abrange toda a expansão de  $\varphi(\mathbf{r})$ . Então  $\psi(\mathbf{r}) = 0$ , quando  $E$  não é uma autoenergia do bilhar.

Se  $E$  é uma autoenergia do bilhar, então  $\psi$  pode ou não ser separada na forma dada acima. Se  $\{p\}$  for vazio, teremos novamente a solução  $\psi(\mathbf{r}) = 0$ . Entretanto, se pudermos fazer a partição da soma como feita acima, a equação (2.30) nos leva ao seguinte resultado

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

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

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

Utilizando (2.27), como na demonstração anterior, teremos

$$\psi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r}) - \sum_{l=\{q\}} c_l \phi_l(\mathbf{r}) = \sum_{l=\{p\}} c_l \phi_l(\mathbf{r}), \quad (2.31)$$

que é a solução correta para a parte interna do bilhar.

Desses resultados obtidos para a parte interna do bilhar podemos concluir que a integral na equação (2.20) funciona como uma tipo de “filtro matemático” que age extraindo qualquer parte da onda incidente que se anule na fronteira, deixando a parte restante inalterada. Se escolhermos uma função de onda incidente  $\varphi(\mathbf{r})$  adequada e formos mudando o valor de seu número de onda incidente  $k$ , podemos eventualmente encontrar os autoestados corretos para o problema interno do bilhar. A forma adequada da onda incidente para obtenção de tal resultado tem a ver com a simetria do bilhar.

## II. Caso externo e a matriz $S$

Os resultados acima não se aplicam ao caso externo, pois não podemos mais afirmar que sempre teremos um sistema de referência em que  $r \leq r_b(\theta_b)$  para qualquer ponto de  $\mathcal{C}$  (lembrando que o sistema de referência escolhido está colocado dentro do bilhar). Logo, não poderemos mais usar as expansões para  $G_0$  como feito anteriormente, o que invalida o cálculo feito no ítem I para o caso externo a ser estudado agora. Entretanto, uma situação interessante é quando, para qualquer  $r_c(\theta_c)$ , temos  $r \geq r_c(\theta_c)$ . Então, do ítem 2 das nossas relações úteis, podemos escrever  $G_0$  da seguinte forma

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_b) = \frac{1}{4i} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} \phi_n(\mathbf{r}_b) h_n^{(+)}(\mathbf{r}) \quad (2.32)$$

Substituindo  $G_0$  em (2.20)

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \varphi(\mathbf{r}) - \int_{\mathcal{C}} \int_{\mathcal{C}} d\theta_b d\theta_a \left[ \frac{1}{4i} \sum_n \phi_n(\mathbf{r}_b) h_n^{(+)}(\mathbf{r}) \right] T(\theta_b, \theta_a) \varphi(\mathbf{r}(\theta_a)) \\ &= \varphi(\mathbf{r}) - \frac{1}{4i} \sum_n h_n^{(+)}(\mathbf{r}) \int_{\mathcal{C}} \int_{\mathcal{C}} d\theta_b d\theta_a \phi_n(\mathbf{r}_b) T(\theta_b, \theta_a) \varphi(\mathbf{r}(\theta_a)). \end{aligned} \quad (2.33)$$

Na forma usual do formalismo de espalhamento da matriz  $S$ , a forma assintótica de uma função de onda de energia  $E = k^2$  é dado por

$$\psi_l(\mathbf{r}) = h_l^{(-)}(\mathbf{r}) + \sum_n S_{ln}(k) h_n^{(+)}(\mathbf{r}). \quad (2.34)$$

Se fizermos  $\varphi(\mathbf{r}) = h_l^{(-)}(\mathbf{r})$  em (2.33) e lembrando que  $T(\theta_a, \theta_b) = T(\theta_b, \theta_a)$ , de uma comparação direta com (2.33) temos que

$$S_{ln}(k) = -\frac{1}{4i} \int_{\mathcal{C}} \int_{\mathcal{C}} d\theta_b d\theta_a h_l^{(-)}(\mathbf{r}_b) T(\theta_b, \theta_a) \phi_n(\mathbf{r}_a). \quad (2.35)$$

A relação encontrada acima é exata e estabelece uma conexão direta entre o método do contorno de paredes e o formalismo da Matriz  $S$ . Como podemos calcular  $T$  numericamente com boa precisão para qualquer forma de fronteira  $\mathcal{C}$ , esse pode ser um método muito útil na obtenção da matriz  $S$  para bilhares arbitrários.

### 2.1.3 Dualidade dentro/fora

Uma característica muito importante dos bilhares é a chamada *dualidade dentro/fora* [15][17][30]. Na sua versão fraca, a dualidade dentro/fora pode ser exposta rigorosamente da seguinte maneira [15]. Considere um bilhar  $\mathcal{C}$  o qual possui uma fronteira diferenciável por partes até segunda ordem. Considere os autovalores  $\exp[-i\lambda_j(k)]$ ,

com as fases de espalhamento  $\lambda_j \in [0, 2\pi)$ , da matriz de espalhamento  $S(k)$  do problema externo. Se exatas  $m$  fases de espalhamento de  $S$  convergirem para  $2\pi$  pela esquerda para  $k \rightarrow k_j$ , também pela esquerda, então o bilhar tem um autovalor  $k_j^2$   $m$  vezes degenerado. A proposição inversa também é verdadeira. Um ponto interessante da formulação acima é que, embora a autofase se aproxime de  $2\pi$  quando  $k \rightarrow k_j$ , 1 não é necessariamente um autovalor de  $S(k_j)$ , se ele o for, temos  $\exp[-i\lambda_j(k_j)] = 1$ , que é a forma forte da dualidade dentro/fora.

### I. Autovalores da matriz $S$ e os autovalores do problema interior

O operador de espalhamento para problema de bilhar é dado pela forma matricial na equação (2.35). Para um dado  $k$ , façamos  $\{c_{jl}(k)\}$  ser o conjunto de coeficientes do  $j$ -ésimo autovetor de  $S(k)$  em tal representação. Nós temos então

$$\sum_n S_{ln}(k) c_{jn} = \exp[-i\lambda_j(k)] c_{jl}. \quad (2.36)$$

Como  $S$  é unitária, segue-se que

$$\sum_n c_{jn}^* S_{nl}(k) = \exp[-i\lambda_j(k)] c_{jl}^*, \quad (2.37)$$

onde  $c^* = c^*(k)$ . Substituindo (2.35) na equação acima

$$\begin{aligned} \sum_l c_{jl}^* S_{ln}(k) &= \sum_l c_{jl}^* \left[ -\frac{1}{4i} \int_C \int_C d\theta_b d\theta_a h_l^{(-)}(\mathbf{r}_b) T(\theta_b, \theta_a) \phi_n(\mathbf{r}_a) \right] \\ &= -\frac{1}{4i} \int_C \int_C d\theta_b d\theta_a \sum_l c_{jl}^* h_l^{(-)}(\mathbf{r}_b) T(\theta_b, \theta_a) \phi_n(\mathbf{r}_a) \\ &= \exp[-i\lambda_j(k)] c_{jn}^* \end{aligned} \quad (2.38)$$

Multiplicando (2.27) por  $c_{jl}^*$ , arrumando os índices e somando em  $l$  temos

$$\sum_l c_{jl}^* \delta_{ln} = \frac{1}{4i} \int_C \int_C d\theta_b d\theta_a \sum_l c_{jl}^* h_l^{(+)}(\mathbf{r}_b) T(\theta_b, \theta_a) \phi_n(\mathbf{r}_a). \quad (2.39)$$

Substituindo  $c_{jn}^*$  em (2.38) e utilizando-se de alguma álgebra teremos

$$\frac{1}{4i} \int_C \int_C d\theta_b d\theta_a \sum_l c_{jl}^* \left[ \exp[-i\lambda_j(k)] h_l^{(+)}(\mathbf{r}_b) - h_l^{(-)}(\mathbf{r}_b) \right] T(\theta_b, \theta_a) \phi_n(\mathbf{r}_a) = 0. \quad (2.40)$$

Como a equação acima deve valer independente de  $n$

$$\sum_l c_{jl}^* \left[ \exp[-i\lambda_j(k)] h_l^{(+)}(\mathbf{r}_b) - h_l^{(-)}(\mathbf{r}_b) \right] = 0. \quad (2.41)$$

Podemos deixar a equação acima em outra forma utilizando-se das relações  $h_l^{(\pm)}(\mathbf{r}_b) = H_l^{(\pm)}(kr_b)\exp[i\ell\theta_b]$  e  $\phi_l(\mathbf{r}_b) = J_l(kr_b)\exp[-i\ell\theta_b]$ .

$$\begin{aligned} h_l^{(\pm)}(\mathbf{r}_b) &= H_l^{(\pm)}(kr_b)\exp[i\ell\theta_b] \\ &= [J_l(kr_b) \pm iN_l(kr_b)]\exp[i\ell\theta_b] \\ &= \phi_l^*(\mathbf{r}_b) \pm iN_l(kr_b)\exp[i\ell\theta_b]. \end{aligned} \quad (2.42)$$

Utilizando este resultado em (2.41)

$$\sum_l c_{jl}^* \{ \exp[-i\lambda_j(k)] [\phi_l^*(\mathbf{r}_b) + iN_l(kr_b)\exp[i\ell\theta_b]] - [\phi_l^*(\mathbf{r}_b) - iN_l(kr_b)\exp[i\ell\theta_b]] \} = 0$$

Rearranjando os termos

$$\sum_l c_{jl}^* \left\{ (\exp[-i\lambda_j(k)] + 1) + i(\exp[-i\lambda_j(k)] - 1) \frac{N_l(kr_b)}{J_l(kr_b)} \right\} \phi_l^*(\mathbf{r}_b) = 0. \quad (2.43)$$

Assumamos agora que quando  $k \rightarrow k_j$  as autofases convergem para  $2\pi$ . Tomando tal limite em (2.43)

$$\lim_{k \rightarrow k_j} \sum_l c_{jl}^* \left\{ (\exp[-i\lambda_j(k)] + 1) + i(\exp[-i\lambda_j(k)] - 1) \frac{N_l(kr_b)}{J_l(kr_b)} \right\} \phi_l^*(\mathbf{r}_b) = 0. \quad (2.44)$$

Para cada  $l$  em (2.44), efetuando o limite,  $c_{jl}^*$  vezes o termo entre  $\{\}$  assume um valor constante  $d_{jl}$ , pois o segundo termo entre chaves anula-se e o valor do limite independe do valor de  $\mathbf{r}_b$  sobre a borda do bilhar. Consideremos então uma expansão do tipo

$$\Phi_j(\mathbf{r}) = \sum_l d_{jl} \phi_l^*(\mathbf{r}), \quad (2.45)$$

com  $k = k_j$ . Tal expansão satisfaz a equação de Schrödinger na parte interna e se anula para qualquer ponto sobre  $\mathcal{C}$ , como podemos ver fazendo  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_a$  em (2.45). Então  $\Phi_j(\mathbf{r})$  é um estado ligado do problema do bilhar com um autovalor  $E_j = k_j^2$ . É interessante salientar que essa solução para o problema interno foi obtida através das soluções de espalhamento da região externa, o que reforça a relação entre as duas soluções.

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

$$\begin{aligned} \delta_{ln} - S_{ln}(k) &= \frac{1}{4i} \int_{\mathcal{C}} \int_{\mathcal{C}} d\theta_b d\theta_a [h_l^{(+)}(\mathbf{r}_b) + h_l^{(-)}(\mathbf{r}_b)] T(\theta_b, \theta_a) \phi_n(\mathbf{r}_a) \\ &= \frac{1}{2i} \int_{\mathcal{C}} \int_{\mathcal{C}} d\theta_b d\theta_a \phi_l^*(\mathbf{r}_b) T(\theta_b, \theta_a) \phi_n(\mathbf{r}_a), \end{aligned} \quad (2.46)$$

onde utilizamos (2.27) e (2.35). Consideremos então

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

com  $k < k_j$ . Este é um ponto importante, visto que, se fizermos  $k = k_j$  não poderemos inverter a ordem do somatório e da integral na equação acima, pois isto anularia a integral. Tomando o limite da equação quando  $k \rightarrow k_j$  ficamos com

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

pois  $\sum_l d_{jl} \phi_l^*(\mathbf{r}_b) = 0$ , de (2.44). Então

$$\lim_{k \rightarrow k_j} \sum_l d_{jl} S_{ln}(k) \rightarrow d_{jn}. \quad (2.47)$$

Os autovalores de  $S$  são do tipo  $\exp[-i\lambda(k)]$ , o que implica que  $\lambda(k \rightarrow k_j) \rightarrow 2\pi$ . Podemos observar que o conjunto  $\{d_{jn}\}$  não é necessariamente um autovetor de  $S$ , visto que não tomamos a igualdade em (2.47).

## II. O princípio da transparência e a versão forte da dualidade dentro/fora

Para melhor vermos a relevância dos autovalores da matriz  $S$  na relação entre as soluções interna e externa, consideramos em (2.34) a soma  $\Psi_j(\mathbf{r}) = \sum_l c_{jl}^* \psi_l(\mathbf{r})$  (com  $\{c_{jl}\}$  um conjunto de autovetores de  $S$ )

$$\sum_l c_{jl}^* \psi_l(\mathbf{r}) = \sum_l c_{jl}^* h_l^{(-)}(\mathbf{r}) + \sum_n \sum_l c_{jl}^* S_{ln}(k) h_n^{(+)}(\mathbf{r}) \quad (2.48)$$

utilizando as relações (2.38) e (2.39) na equação acima teremos

$$\Psi_j(\mathbf{r}) = \sum_l c_{jl}^* h_l^{(-)}(\mathbf{r}) + \exp[-i\lambda_j] \sum_l c_{jl}^* h_l^{(+)}(\mathbf{r}). \quad (2.49)$$

Fazendo  $k = k_j$ , para a equação (2.45) teremos que

$$\Phi_j(\mathbf{r}) = \sum_l c_{jl}^* \phi_l^*(\mathbf{r}), \quad (2.50)$$

pois  $d_{jl} = c_{jl}^*$  em (2.44), considerando um vetor posição qualquer, e não mais somente sobre a barreira como anteriormente. Então, para  $k = k_j$ ,  $\Phi_j(\mathbf{r})$  é uma solução do



problema interno. Fazendo agora  $k = k_j$  ( $\exp[-i\lambda_j] = 1$ , exatamente) para a equação (2.49)

$$\begin{aligned}\Psi_j(\mathbf{r}) &= \sum_l c_{jl}^* [h_l^{(-)}(\mathbf{r}) + h_l^{(+)}(\mathbf{r})] \\ &= \sum_l c_{jl}^* \phi_l^*(\mathbf{r}),\end{aligned}\tag{2.51}$$

onde, mais uma vez, utilizamos as relações para  $H_0$ , listadas no início da seção.

Vemos dos resultados acima que as duas expansões para  $\Psi$  e  $\Phi$  têm a mesma forma. Concluimos então, que a solução  $\Phi(\mathbf{r})$  para os autoestados do bilhar pode ser expandida para a solução de espalhamento  $\Psi(\mathbf{r})$ , isto é, nós temos uma única solução para a equação de Helmholtz que é válida em todo o espaço  $\mathbb{R}^2$  e satisfaz a condição de contorno de Dirichlet sobre  $\mathcal{C}$ . Esta é a versão forte da dualidade dentro/fora para bilhares planos.

Esta característica do método do contorno de paredes está relacionada com a idéia de transparência discutida em [15] [16]. Se escolhermos uma função de onda incidente  $\phi(\mathbf{r})$  apropriada de energia igual a uma energia de ressonância do problema interno do bilhar, o obstáculo torna-se transparente para a onda.

Por outro lado, se  $k$  não for exatamente um autovalor de energia do bilhar (os autovalores de  $S$  não forem exatamente iguais a unidade), a transparência não funciona. Isto parece contradizer a equação (2.15). Aparentemente, se escolhermos uma solução qualquer  $\varphi(\mathbf{r})$  que se anule sobre a barreira  $\mathcal{C}$ , ela será transparente para  $\psi(\mathbf{r})$ , sem que levemos em consideração os autovalores de  $S$  na escolha. Entretanto, devemos observar o seguinte, na nossa formulação inicial supusemos que  $\varphi(\mathbf{r})$  é uma função bem definida em todo o  $\mathbb{R}^2$ . Na versão fraca da dualidade dentro/fora, o autoestado do bilhar não pode ser expandido para *todo* o  $\mathbb{R}^2$  (ou por ser ela não ser unívoca [15] [16] ou não ser limitada [4] no exterior do bilhar), então neste caso não podemos escolher esta forma para a onda incidente  $\varphi(\mathbf{r})$ . Consideremos um autoestado da região interna ou um estado de espalhamento da região externa que se anula na barreira do bilhar, mas que em nenhum dos casos pode ser estendido para todo o plano, do tipo (2.28), truncando a série em algum  $L$  finito

$$\varphi^{(L)}(\mathbf{r}) = \sum_{l=-L}^{l=+L} c_l \phi_l(\mathbf{r}).\tag{2.52}$$

Para um  $L$  fixo,  $\varphi^{(L)}(\mathbf{r})$  é uma solução válida para a equação de Helmholtz em todo o plano, logo ela pode ser escolhida como a equação da onda incidente em (2.15).

Se fizermos  $L \rightarrow \infty$ ,  $\varphi^{(L)}(\mathbf{r})$  se anula sobre a barreira  $\mathcal{C}$  e então  $\psi(\mathbf{r}) \rightarrow \varphi^{(L \rightarrow \infty)}(\mathbf{r})$ . Se a série representar um autoestado do bilhar, então, para  $\mathbf{r}$ 's internos ao bilhar,  $\psi$  converge para o resultado correto. Este resultado se aplica também se, no início da análise, escolhermos um autoestado de espalhamento, com a observação que agora

estaremos tratando de  $\mathbf{r}$ 's externos, obviamente. Porém, na região complementar do plano a que escolhemos inicialmente, a série não converge, então  $\psi(\mathbf{r})$  também não convergirá para uma solução do problema, que não poderá ser expandida para todo o espaço. Temos assim uma quebra no princípio da transparência. Um bom exemplo disto é o bilhar “cake like” que é discutido em [16].

## 2.2 Tratamento numérico

Como já foi visto desde o início do capítulo, a idéia principal no método do contorno de paredes é conseguir calcular  $T$  sobre a barreira espalhadora  $\mathcal{C}$  e inseri-la em (2.15), obtendo assim a função de onda espalhada em todo o espaço. Foi visto durante o desenvolvimento que, apesar de a formulação do método não ser complicada, são poucos os casos que apresentam fácil solução analítica.

Veremos aqui como utilizar os resultados obtidos na secção anterior a fim de obter uma abordagem numérica do método que utilizaremos então para a solução dos casos de difícil solução analítica.

Na equação (2.8) dividimos  $\mathcal{C}$  em  $N$  partes,  $\{\mathcal{C}_j\}_{j=1,2\dots N}$  (ver figura (2.5)), tomando então a integral sobre cada elemento  $j$

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r}) &= \varphi(\mathbf{r}) + \sum_{j=1}^N \int_{\mathcal{C}_j} ds \gamma G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}(s)) \psi(\mathbf{r}(s)) \\ &\approx \varphi(\mathbf{r}) + \sum_{j=1}^N \int_{\mathcal{C}_j} ds \gamma G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}(s)) \psi(\mathbf{r}(s_j)),\end{aligned}\tag{2.53}$$

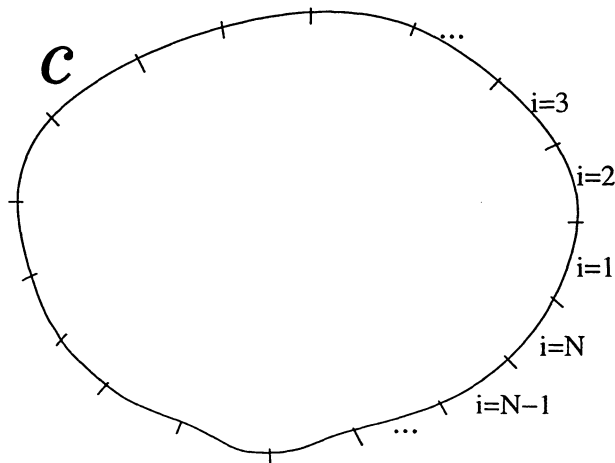


Figura 2.5: Discretização da curva  $\mathcal{C}$ .

onde  $s_j$  é o ponto médio do segmento  $\mathcal{C}_j$  e, por uma questão de simplicidade, fizemos  $\gamma$  constante sobre a barreira. Fazendo  $\mathbf{r}(s_j) = \mathbf{r}_j$  e  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_i$

$$\begin{aligned}\psi(\mathbf{r}_i) &= \varphi(\mathbf{r}_i) + \sum_{j=1}^N \int_{\mathcal{C}_j} ds \gamma G_0(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \psi(\mathbf{r}_j) \\ &= \varphi(\mathbf{r}_i) + \sum_{j=1}^N \gamma M_{ij} \psi(\mathbf{r}_j),\end{aligned}\tag{2.54}$$

onde fizemos  $M_{ij} = \int_{\mathcal{C}_j} ds G_0(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)$ .

Se  $\Psi = (\psi(\mathbf{r}_1), \dots, \psi(\mathbf{r}_N))$  e  $\Phi = (\varphi(\mathbf{r}_1), \dots, \varphi(\mathbf{r}_N))$ , teremos então

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

Depois de alguma álgebra podemos encontrar, a partir desta equação, que

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

se multiplicarmos ambos os lados por  $\gamma$

$$\gamma \Psi = \mathbf{T} \Phi,\tag{2.55}$$

onde fizemos  $\mathbf{T} = \gamma [\mathbf{I} - \gamma \mathbf{M}]^{-1}$ , que é a forma discretizada da matriz  $\mathbf{T}$ . Podemos chegar a esse resultado também a partir da equação (2.9). Temos das equações acima que

$$\gamma \Psi_i = (\mathbf{T} \Phi)_i = \gamma \sum_{j=1}^N [(\mathbf{I} - \gamma \mathbf{M})^{-1}]_{ij} \Phi_j,\tag{2.56}$$

onde  $\Psi_i = \psi(\mathbf{r}_i)$  e  $\Phi_j = \varphi(\mathbf{r}_j)$ . Então,  $\gamma \psi(\mathbf{r}(s_j)) = \gamma \psi(\mathbf{r}_j) = \gamma \Psi_j$ . Substituindo  $\gamma \Psi_j = (\mathbf{T} \Phi)_j$  em (2.54)

$$\psi(\mathbf{r}) \approx \varphi(\mathbf{r}) + \sum_{j=1}^N \int_{\mathcal{C}_j} ds G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_j) (\mathbf{T} \Phi)_j.\tag{2.57}$$

Utilizando a “aproximação por valor médio” para a resolução da integral e definindo  $\Delta_j$  como o volume de  $\mathcal{C}_j$

$$\psi(\mathbf{r}) \approx \varphi(\mathbf{r}) + \sum_{j=1}^N G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_j) \Delta_j (\mathbf{T} \Phi)_j.\tag{2.58}$$

Esta é a aproximação numérica para  $\psi(\mathbf{r})$  em todo os espaço para  $\gamma$  finito. Vimos que para o cálculo de  $\mathbf{M}$  temos

$$M_{ij} = \int_{\mathcal{C}_j} ds G_0(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)\tag{2.59}$$

Podemos resolver essa integral para  $\mathbf{M}$  da mesma maneira feita logo acima para  $\psi$ , logo

$$M_{ij} \approx G_0(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j)\Delta_j \quad (2.60)$$

No problema no qual é focado nosso estudo, espalhamento em duas dimensões, esta aproximação trará problemas quando  $i = j$ , pois neste caso, teremos que analisar a função de Neumann  $N(kr)$  em  $r = 0$  ( $r = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ ), situação na qual ela diverge. Por este motivo, teremos que calcular explicitamente a integral (2.59) para os elementos da diagonal de  $\mathbf{M}$ .

Para a situação em que  $\gamma \rightarrow \infty$ ,  $\mathbf{T} \rightarrow \mathbf{M}^{-1}$  (ver forma de  $\mathbf{T}$ ), então de (2.58)

$$\psi(\mathbf{r}) \approx \varphi(\mathbf{r}) - \sum_{j=1}^N G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_j)\Delta_j(\mathbf{M}^{-1}\Phi)_j, \quad (2.61)$$

que é a equação para a autofunção  $\psi(\mathbf{r})$  de uma partícula livre interagindo com uma região impenetrável  $\mathcal{C}$ .

Uma análise para a performance do método utilizando a forma (2.59) e (2.60) na obtenção de  $\mathbf{M}$  pode ser checada em Luz *et al*[14]. Nesta análise pode-se ver que aproximações numéricas feitas aqui funcionam muito bem para os nossos propósitos, deixando o método fácil e rápido na sua execução computacional.

A princípio (2.61) se aproxima da solução exata para  $\psi(\mathbf{r})$  à medida que  $N \rightarrow \infty$ . Temos então que saber escolher  $N$  de modo que ele seja grande o bastante para satisfazer tal limite e, ainda assim, não tão grande a ponto de comprometer o uso computacional do método. Um meio de fazermos essa escolha é observando que o método traz bons resultados para uma  $\lambda N/l$  (comprimento de cada segmento da fronteira  $l/N$  por comprimento de onda  $\lambda = 2\pi/k$ ) maior que  $10^1$  [14]. Então, para um certo número de onda  $k$  incidente que estamos utilizando, escolhemos  $N$  tal que satisfaça a condição descrita acima. Isto fará com que no limite levemos nossa solução discretizada de  $\psi$  à solução correta.

## 2.3 Exemplos numéricos

Nessa seção serão mostrados cálculos numéricos efetuados para as formas de bilhares mostradas na figura (2.6) a partir do método do contorno de paredes, mais o caso do círculo. Como visto anteriormente, a maneira como desenvolvemos o método é direcionada às soluções de bilhares convexos, o que restringiria o seu uso a essa classe de bilhares apenas. Porém, aplicaremos também o método aos bilhares côncavos e veremos se os resultados são satisfatórios.

O que diferencia os vários tipos de bilhares é a integrabilidade. Esta característica refere-se a dinâmica clássica de uma partícula na região interna do bilhar.

Em problemas de bilhares analisados quanticamente, as propriedades da função de onda e da estatística dos níveis de energia são muito diferentes se o sistema for integrável (como o círculo e o quadrado) ou caótico (como o Stadium de Bunimovich e o Bilhar de Sinai)[4]. Isto, logicamente, irá influenciar nossos resultados. Na figura (2.6) temos (a) integrável, (b) e (c) caóticos [31] e (d) pseudointegrável [32] (bilhar regular classicamente mas que apresenta características caóticas quando quantizado).

Antes de iniciar a análise numérica, é interessante apresentar uma ferramenta que o método do contorno de paredes fornece para encontrar os espectros de energias dos bilhares. Por enquanto veremos apenas como proceder com tal ferramenta para obter tais energias, para posteriormente entenderemos como esta funciona.

Apartir das análises analíticas feitas à cerca do método é intuitivo, que, podemos retirar informações sobre as energias de ressonância dos bilhares a partir da análise de gráfico que mostre a variação de *um dos elementos da matriz  $T$*  com o número de onda  $k$ . A partir de gráfico deste tipo, podemos esperar que os autovalores  $k = \sqrt{E}$  possam ser encontrados à medida a matriz  $T$  passe por alguma mudança de comportamento observável nas ressonâncias. Para bilhares facilmente solúveis como o círculo e o quadrado essa característica não tem muita relevância, porém, ela torna-se muito importante em bilhares mais complicados de se obter o espectro de energias analiticamente.

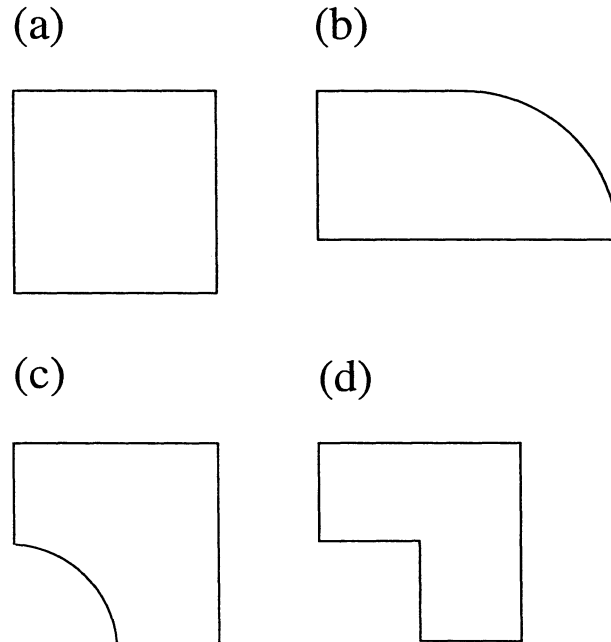


Figura 2.6: Formas dos bilhares discutidos nos exemplos.

Nessa seção, nos restringiremos a bilhares impenetráveis ( $\gamma \rightarrow \infty$ ) em duas dimensões, focalizando as atenções sobre a matriz  $T$  e sobre a função de onda  $\psi(\mathbf{r})$ , dadas por  $\mathbf{M}^{-1}$  e (2.61), respectivamente. Nas análises estamos interessados nas amplitudes relativas das funções, então apresentaremos  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  e  $|T|^2$  normalizados para seu máximo valor ser igual a 1,0.

O valor de  $N$  utilizado varia de caso para caso. Como vimos, esta escolha depende do tamanho do bilhar e do valor do número de onda  $k$  utilizado. Quanto maior (menor) o bilhar e menor (maior)  $k$ , maior (menor) deve ser  $N$  para que  $\mathcal{C}$  se comporte como uma barreira impenetrável. A região do espaço em que se encontra o bilhar é discretizado de modo a ter dimensão  $N \times N$ .

Em todos os gráficos as partes mais claras referem-se aos elementos de maior intensidade (da matriz e da função de onda) enquanto que os elementos de menos intensidade são representados por pontos mais escuros nos gráficos, o que gera uma escala de tons que vai do branco a o preto passando por tons intermediários para os elementos de intensidades medianas.

Como assumimos também, por simplicidade, que  $\hbar = 2\mu = 1$ , a energia é dada por  $E = k^2$ .

A menos de mencionado o contrário, foram usadas ondas planas,  $\varphi(\mathbf{r}) = \exp[i(k_x x + k_y y)]$  onde  $k^2 = k_x^2 + k_y^2$  com  $k_x = k \cos[\theta]$  e  $k_y = k \sin[\theta]$ , sendo  $\theta$  o ângulo de incidência da onda no bilhar, dado por  $\tan \theta = \frac{k_y}{k_x}$ . Esta escolha faz sentido na medida que as ondas planas têm grande relevância no estudo do caso da partícula livre.

### 2.3.1 Círculo

Começaremos a discussão dos exemplos numéricos calculados através do método do contorno de paredes com o caso da barreira circular. Como vimos no decorrer do capítulo, o círculo é um caso interessante visto sua resolução analítica através do método de contorno de paredes ser possível.

Todos os círculos possuem  $r = 1,0$ , centrados em  $0,0$  e a onda incide no bilhar com um ângulo de  $\frac{\pi}{4}$ .

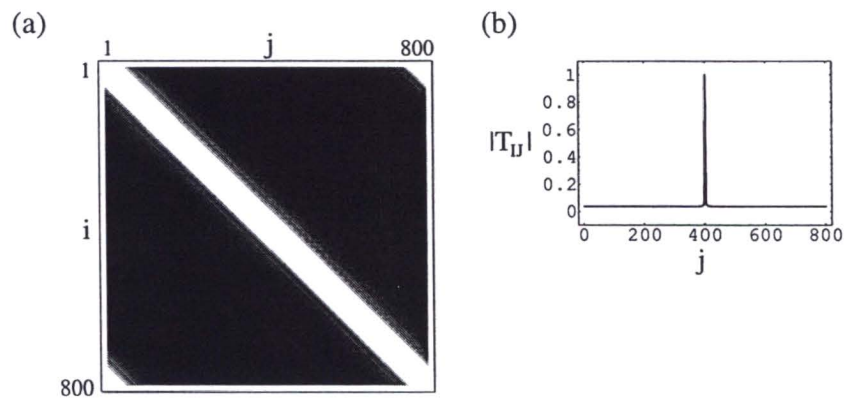


Figura 2.7: Gráfico de (a)  $|T|^2$  e (b) corte em  $T_{ij}$  para  $i = 400$  com  $k = 2,4840$ , primeira raiz de  $J_0$ .

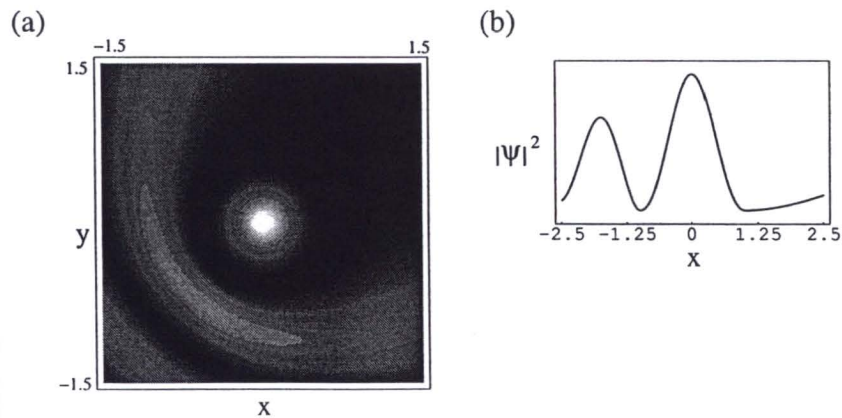


Figura 2.8: Gráfico de (a)  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  e (b) corte em  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  para  $y = 0$  com  $k = 2,4840$ , primeira raiz de  $J_0$

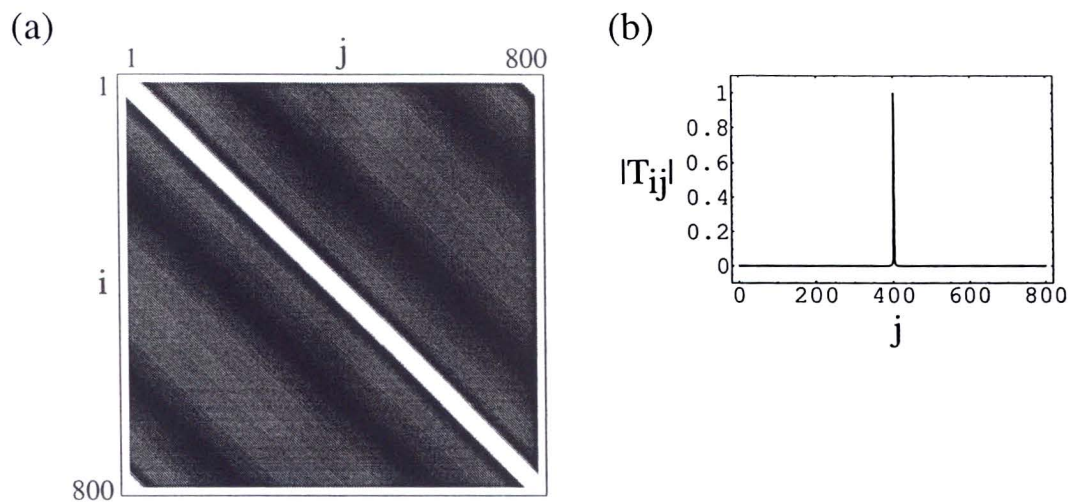


Figura 2.9: Gráfico de (a)  $|T|^2$  e (b) corte em  $T_{ij}$  para  $i = 400$  com  $k = 4,00$ .

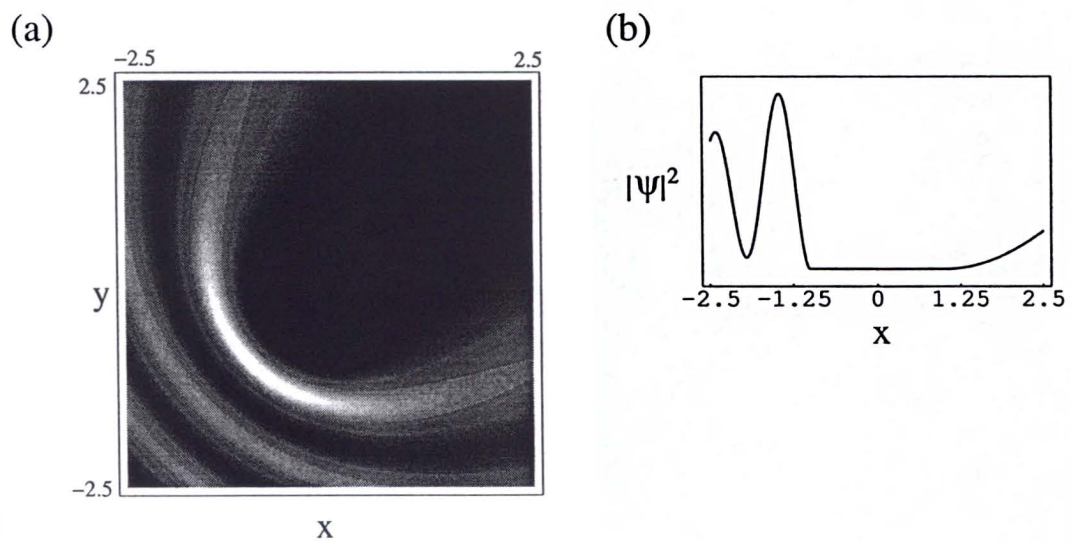


Figura 2.10: Gráfico de (a)  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  e (b) corte em  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  para  $y = 0$  com  $k = 4,0$ .



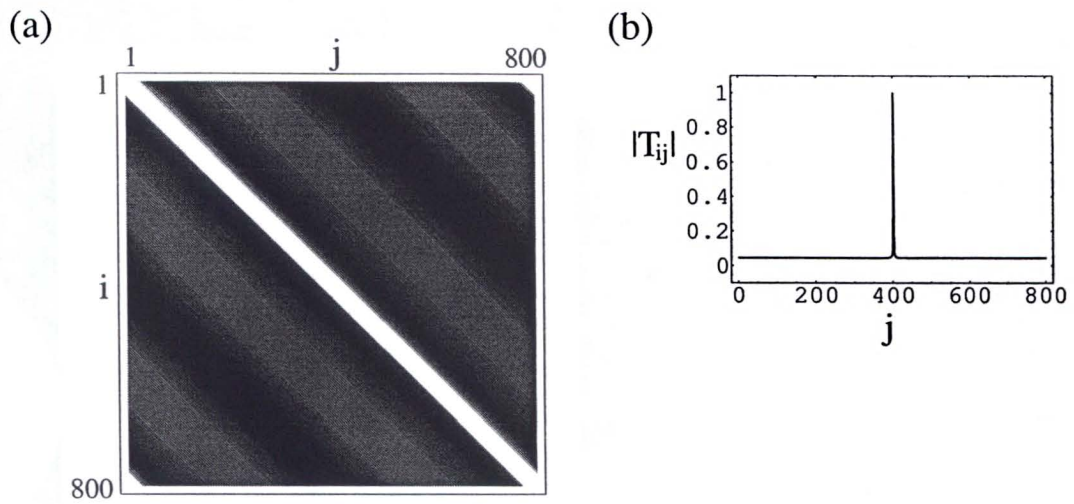


Figura 2.11: Gráfico de (a)  $|T|^2$  e (b) corte em  $T_{ij}$  para  $i = 400$  com  $k = 5,5201$ , segunda raiz de  $J_0$ .

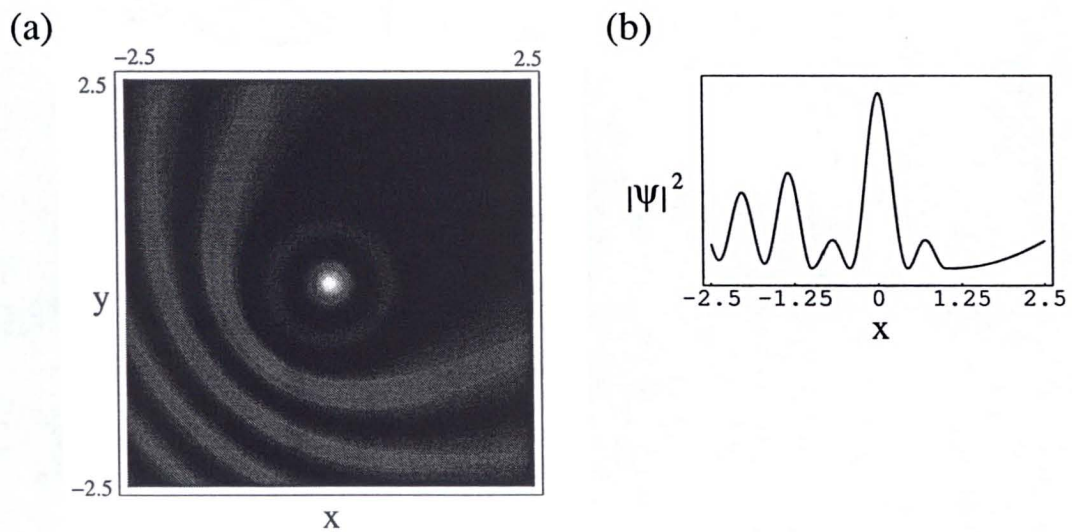


Figura 2.12: Gráfico de (a)  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  e (b) corte em  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  para  $y = 0$  com  $k = 5,5201$ , segunda raiz de  $J_0$ .

Várias informações interessantes podem ser retiradas dos resultados obtidos numericamente para o bilhar circular. A mais evidente, e importante, é a concordância da solução analítica, exposta no fim da subseção (2.2.1), com a numérica que pode ser observada nas figuras (2.8)-(2.12). Em (2.8) e (2.12) excitamos dois autoestados consecutivos do bilhar circular, as primeira e segunda raízes de  $J_0$ , respectivamente. Observando seus cortes nos gráficos da função de onda  $\psi(\mathbf{r})$  para estes estados, podemos ver claramente que, na região interna à barreira, a função de onda é uma solução tipo função de Bessel [27][28]. Em (2.10) a onda incidente possui um número de onda  $k$  com valor entre as duas primeiras raízes de  $J_0$ . Esta não é solução do bilhar circular, então a solução dentro do círculo é nula, como era de se esperar, pois, nesta condição, nenhum estado pode ser excitado.

Analisando a matriz  $T$ , podemos ver que esta é simétrica e os elementos de sua diagonal ( $i = j$ ) são maiores do que os de fora ( $i \neq j$ ). No caso em que há ressonância, a diferença entre os elementos pertencentes e não pertencentes à diagonal diminui drasticamente, como será melhor visto na análise dos próximos bilhares. Esta pode ser uma ferramenta importante para o estudo de bilhares, visto que o cálculo da matriz é muito mais rápido computacionalmente do que o cálculo da função de onda, e de suas propriedades podemos extrair muitas informações relevantes sobre o sistema.

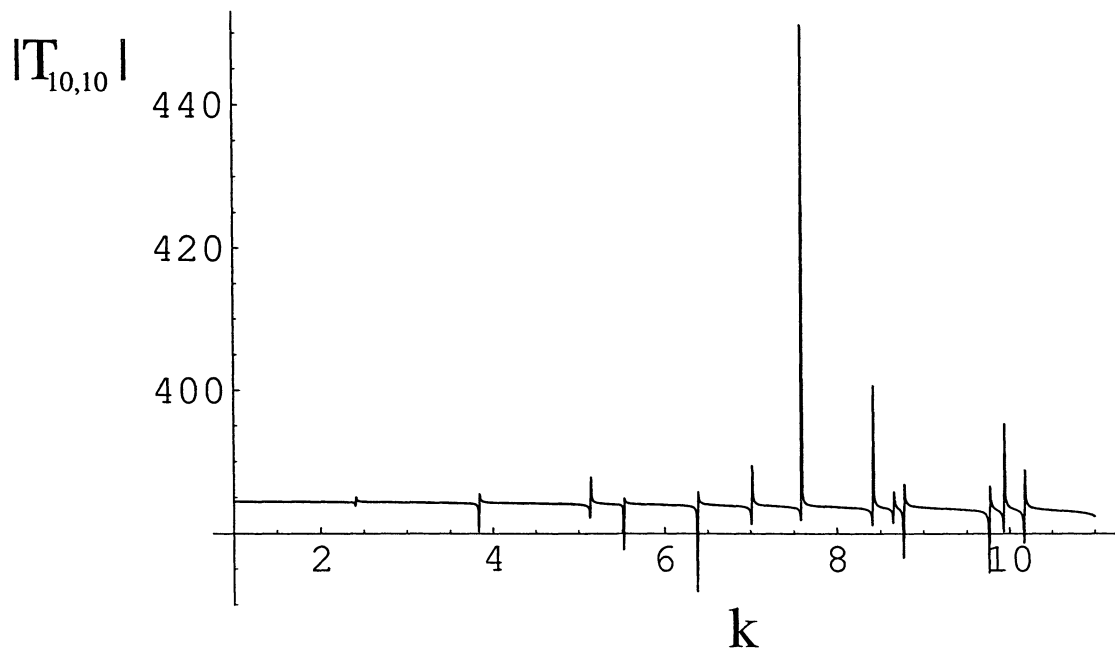


Figura 2.13: Gráfico de  $T_{10,10} \times k$ .

Como citado anteriormente, um método de encontrar as ressonâncias de um bilhar é analisando o comportamento de um dos elementos da matriz  $T$  à medida que variamos o número de onda  $k$ . Observando  $T$ , vemos que seu comportamento muda quando  $k$  é um autovalor do bilhar. Logo, se observarmos em um gráfico  $|T_{ij}| \times k$  (com  $i$  e  $j$  fixos) essa mudança de comportamento de  $T$  poderemos encontrar os autovalores de seu espectro. Para o bilhar circular isto é mostrado na figura (2.13). Nesta podemos facilmente observar que as ressonâncias “caem” nas “descontinuidades” do eixo  $k$ , que é solução da parte interna do bilhar circular. É interessante ressaltar que nos cálculos numéricos efetivados foi utilizada a sequência de raízes de  $J_0$ , porém o que aparece no gráfico é sequência de raízes de  $J_n$ , que é a solução correta para o espectro de energias do bilhar circular.

Para bilhares facilmente solúveis, como o círculo e o quadrado, essa característica não tem muita relevância, porém ela torna-se importante em bilhares mais complicados de se obter o espectro de energias analiticamente.

Através dos cortes em  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  para os valores de  $k$  mostrados podemos avaliar a “escolha” feita para o número de onda  $k$ . Em todos os casos a onda fora do bilhar é muito menor que as autofunções na região interna. Esta diferença indica o quão acurados fomos na obtenção do autovalor associado a tal autofunção. Quando maior a diferença, maior o sucesso que tivemos na determinação do autovalor, pois só com o valor exato de  $k$  a solução correta na região interna é conseguida.

Essas características iniciais aqui citadas são melhor observadas nos outros bilhares estudados, visto sua maior complexidade.

### 2.3.2 Quadrado

O caso do bilhar quadrado, assim como o círculo, tem bastante interesse na medida que conhecemos sua solução analítica da literatura, têm-se assim o seu espectro de energias de ressonância a disposição. Com esse bilhar podemos fazer mais uma vez vários testes a cerca do funcionamento do método e de seus resultados numéricos, antes de passar para bilhares mais complicados.

Dentre essas análises é interessante verificarmos a influência da escolha da função de onda incidente  $\varphi(\mathbf{r})$  no resultado para a relação entre a solução externa (de espalhamento) e a solução interna, no caso da análise do princípio da transparência. Verificaremos também como o método se comporta no caso da superposição dos autoestados degenerados do bilhar.

Para o bilhar quadrado o número de onda  $k$  é dado por  $k = \pi\sqrt{m^2 + n^2}$ , onde  $k_x = m\pi$  e  $k_y = n\pi$ .

Em todas as figuras apresentadas os quadrados têm lado  $l = 1, 0$ .

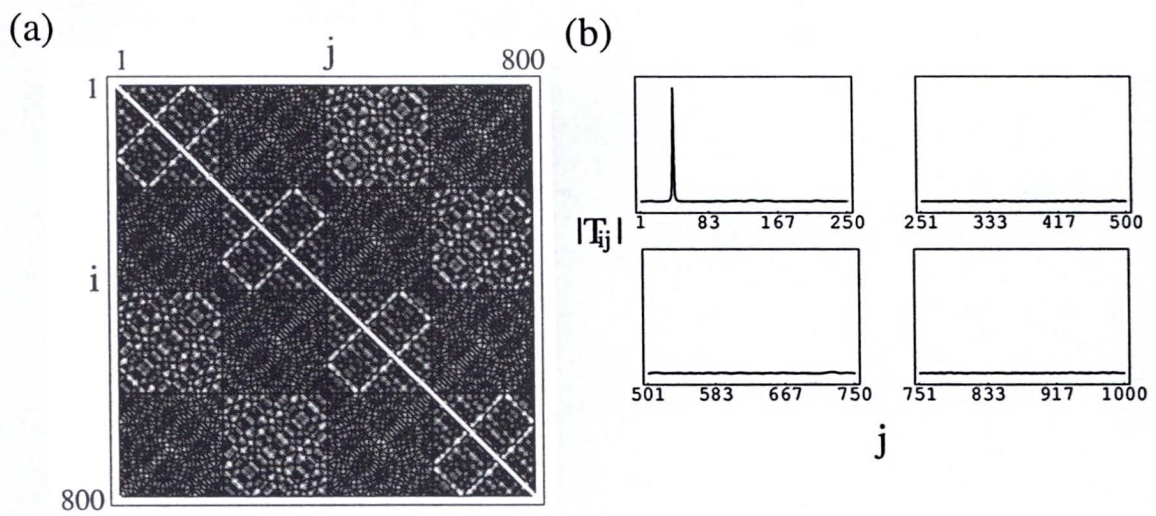


Figura 2.14: Gráfico de (a)  $|T|^2$  e (b) corte em  $T_{ij}$  para  $i = 40$  com  $k = 90, 235114$ . Ângulo de incidência da ressonância  $m = 10, n = 27$

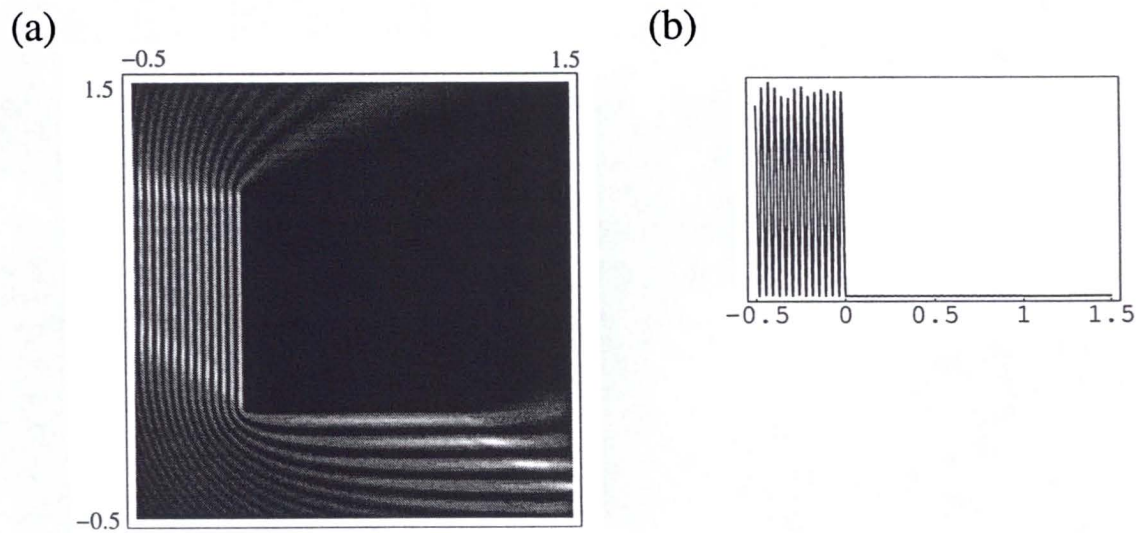


Figura 2.15: Gráfico de (a)  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  e (b) corte em  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  para  $y = 0.7825$  com  $k = 90, 235114$ .

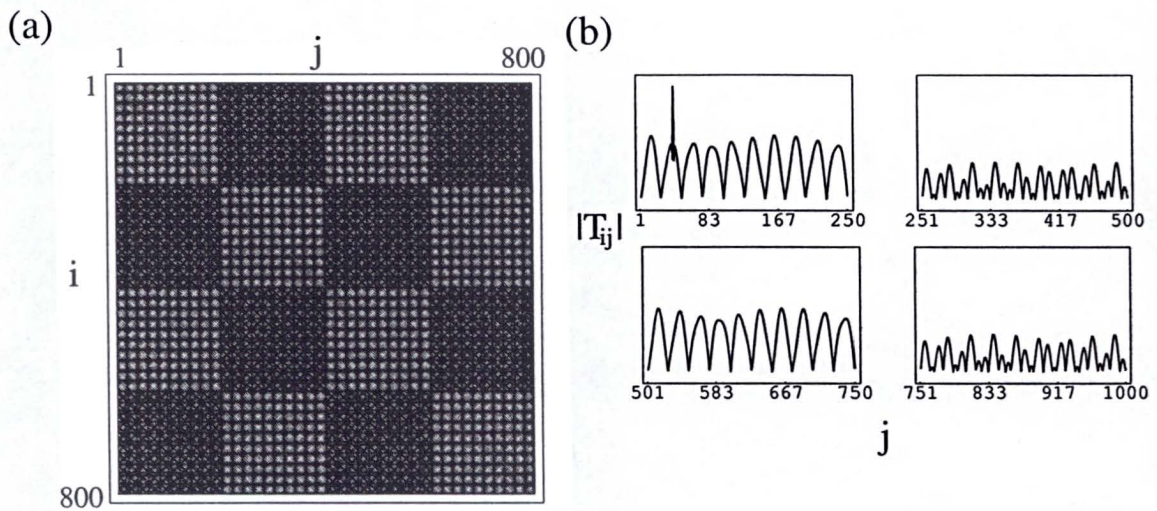


Figura 2.16: Gráfico de (a)  $|T|^2$  e (b) corte em  $T_{ij}$  para  $i = 40$  com  $k = 90,453866$  ( $m = 10, n = 27$ ).

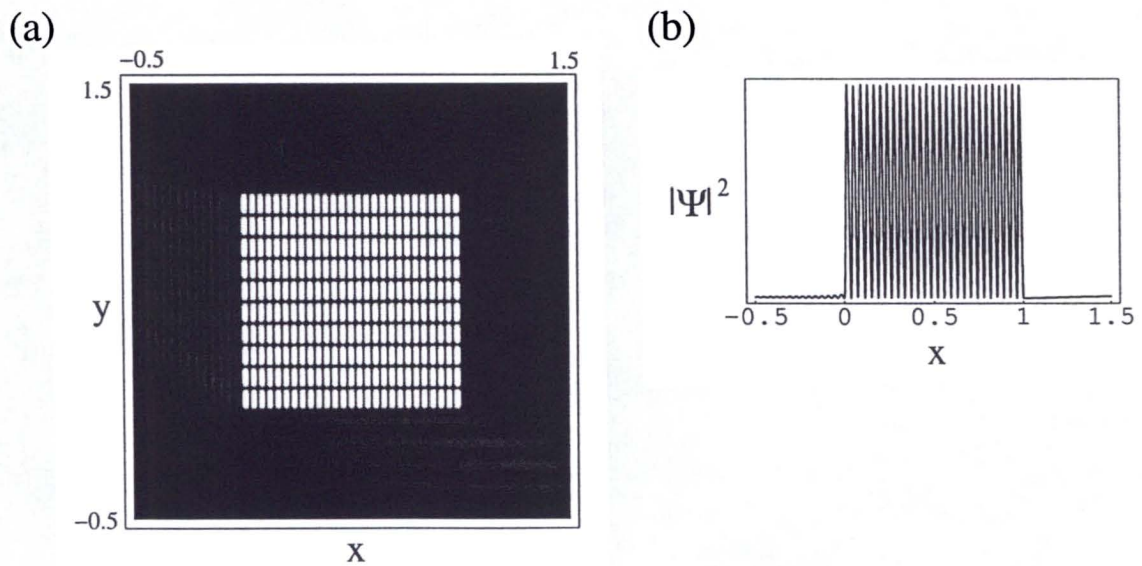


Figura 2.17: Gráfico de (a)  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  e (b) corte em  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  para  $y = 0.1575$  com  $k = 90,453866$  ( $m = 10, n = 27$ ).

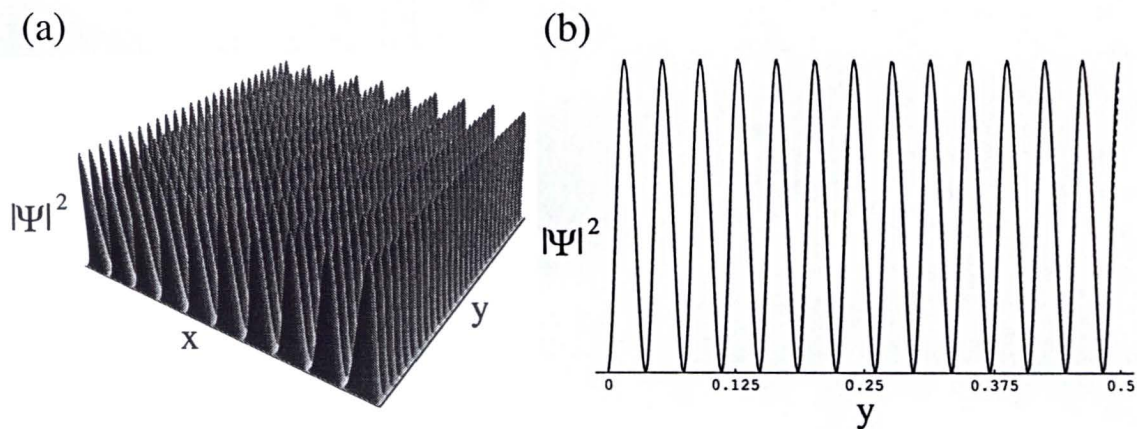


Figura 2.18: (a) Gráfico 3d da parte interna do bilhar e (b) comparação de um corte na região interna do bilhar com  $\sin^2[k_x x] \sin^2[k_y y]$  para  $k = 90,453866$  ( $m = 10$ ,  $n = 27$ ) em  $y = 0,1575$ .

Como vimos no caso do círculo, certas características se sobressaem na análise da matriz  $T$  quando esta é observada em um caso em que a onda incidente é uma autoenergia do bilhar ou em um caso em que o  $k$  não pertence ao espectro de energia deste. Essas características se mostram muito mais pronunciadas no quadrado, visto sua diferente simetria, o que fará a matriz  $T$  adotar um comportamento mais acentuado. No caso fora de alguma ressonância, temos a matriz  $T$  com os elementos da diagonal muito maiores que os de fora, enquanto, em caso de ressonância, essa diferença entre os elementos diminui drasticamente. Podemos perceber também que, na ressonância, a diagonal principal é muito mais “fina” do que nos casos em que  $k$  não é um autovalor do bilhar. Há também uma diferença significativa na “figura” formada pelos elementos da matriz. No caso de ressonância há um certo padrão, padrão esse que vai desaparecendo a medida que vamos alterando o número de onda  $k$ , e assim nos afastando do  $k$  pertencente ao espectro do bilhar.

Como já dito antes, essas características se tornam muito úteis na obtenção do espectro de bilhares que não tem sua solução analítica de fácil obtenção. Variando  $k$  podemos, a partir da análise apenas da matriz  $T$ , ter o espectro de autovalores de qualquer bilhar que tenhamos interesse.

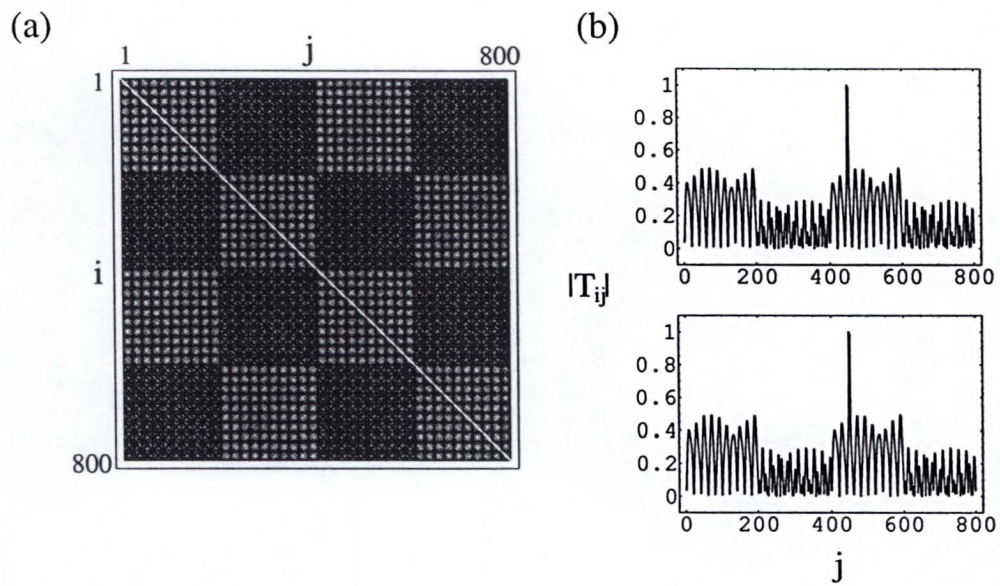


Figura 2.19: Gráfico de (a)  $|T|^2$  para  $k = 90,453866$  ( $m = 10, n = 27$ ) e  $\theta = 90^\circ$ . (b) cortes em  $T_{ij}$  para  $\theta = 0^\circ$  (em cima) e  $\theta = 90^\circ$  (em baixo) em  $i = 450$ , para ambos os casos .

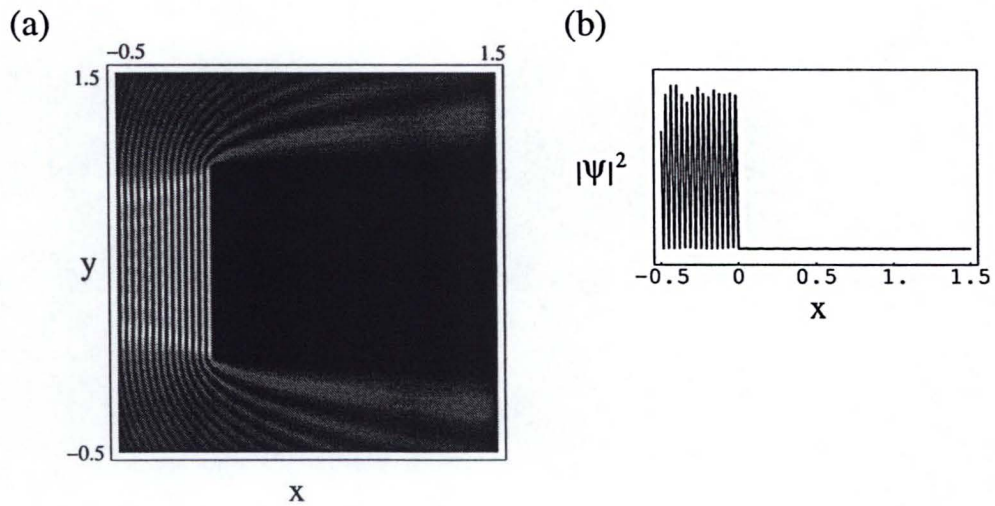


Figura 2.20: Gráfico de (a)  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  e (b) corte em  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  para  $k = 90,453866$  ( $m = 10, n = 27$ ) com ângulo de incidência de  $\theta = 0^\circ$ , em  $y = 0,5$ .

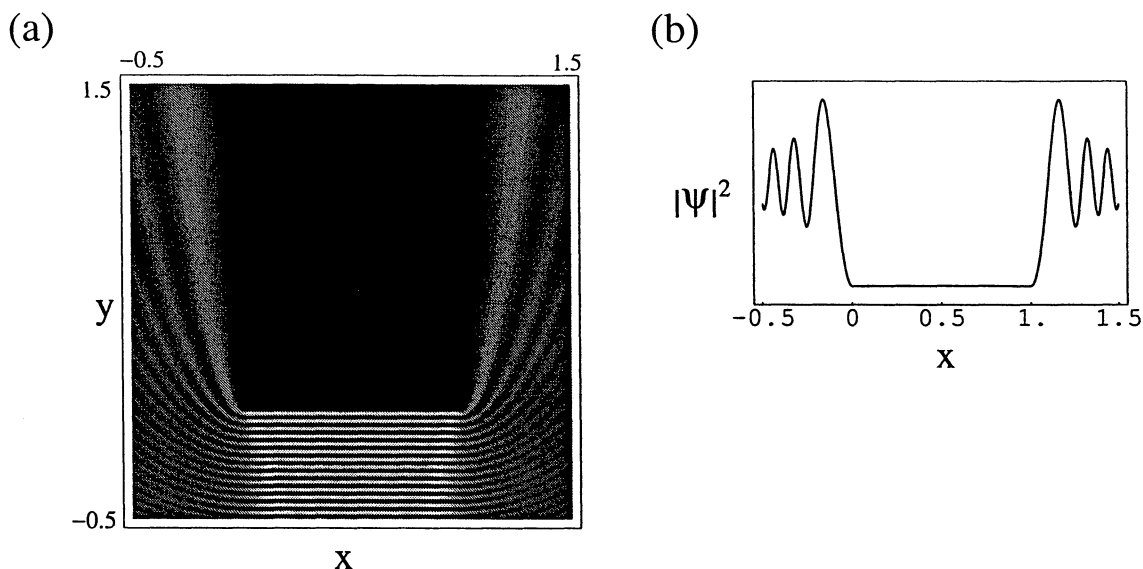


Figura 2.21: Gráfico de (a)  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  e (b) corte em  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  para  $k = 90,453866$  ( $m = 10, n = 27$ ) com ângulo de incidência de  $\theta = 90^\circ$ , em  $y = 0,5$ .

Um problema depois de encontrarmos o  $k$  de ressonância a partir da análise da matriz  $T$  é saber o ângulo correto de incidência da onda para a excitação do estado correspondente a tal  $k$ , pois como a matriz não carrega informação a cerca da direção de incidência da onda, apenas de seu módulo, não temos indícios através dela de como separar  $k$  entre  $k_x$  e  $k_y$ . Como podemos ver em (2.19a) a matriz é mesma para o espalhamento no ângulo correto, mostrada anteriormente. Aqui o gráfico de densidade foi feito para o ângulo de incidência de  $90^\circ$ . Em (2.19b) temos dois cortes em  $|T|$ , um para o ângulo de incidência de  $0^\circ$  e o outro para  $90^\circ$ , respectivamente. Para os dois ângulos de incidência a matriz  $T$  é idêntica. Em (2.20) e (2.21) podemos ver que se a onda não incide com o ângulo correto não conseguimos excitar o estado correspondente à energia da onda.

Este problema não é exclusivo do estudo do bilhar quadrado devido a presença de autovalores degenerados. Ele apresenta-se para os outros bilhares também, já que em todos eles devemos ter uma divisão característica de  $k$ , em  $k_x$  e  $k_y$ , para cada autoestado.



## Transparência

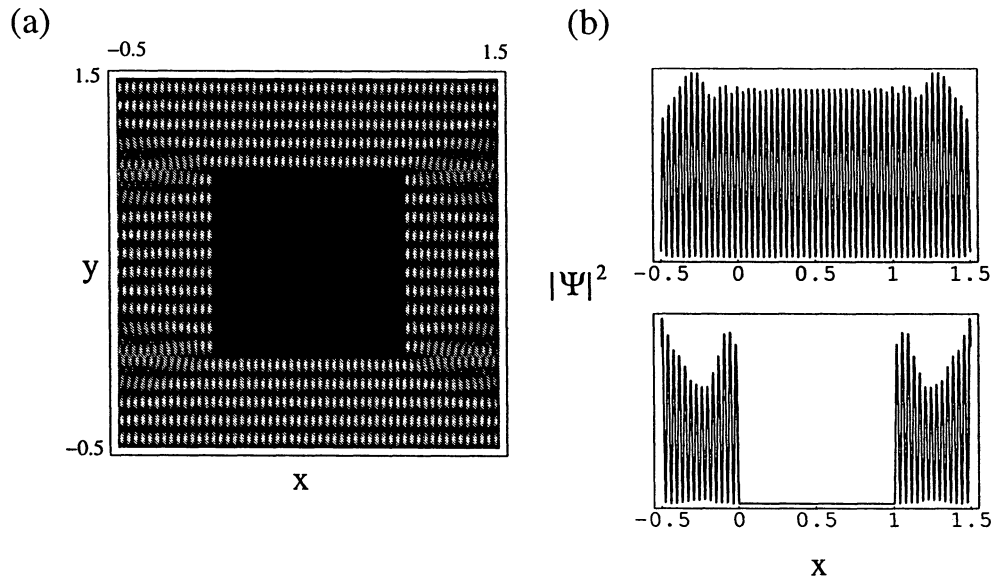


Figura 2.22: Gráfico de (a)  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  com uma onda incidente tipo  $\cos[k_x x] \sin[k_y y]$  e (b) dois cortes em  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  em  $y = -0,1875$  e  $y = 0,2825$  (de cima para baixo).  $k = 90,453866$  ( $m = 10$ ,  $n = 27$ ).

Na figura (2.22) fizemos uma onda incidente do tipo  $\cos[k_x x] \sin[k_y y]$ . Sabemos que a solução para a parte interna do bilhar quadrado é uma combinação de senos, logo, no processo de filtro da matriz  $T$  serão retirados todos os componentes da expansão da função de onda incidente, fazendo com que  $\psi(\mathbf{r})$  seja nula na região interna. Na figura (2.23) mudamos a onda incidente para uma onda do tipo  $\sin[k_x x] \sin[k_y y]$ , em contraste com o caso anterior, nesta situação a função de onda incidente tem a mesma forma da solução interna do bilhar. Estes dois casos exemplificam bem a propriedade de transparência dos bilhares. No primeiro caso a solução não pode ser expandida para todo o espaço, visto que a onda incidente não tem uma forma semelhante à solução interna. Já no segundo caso, a solução interna e a onda incidente têm a mesma forma, logo podemos estender a solução interna para todo o espaço, fazendo a barreira se tornar “transparente” perante a ação da onda.

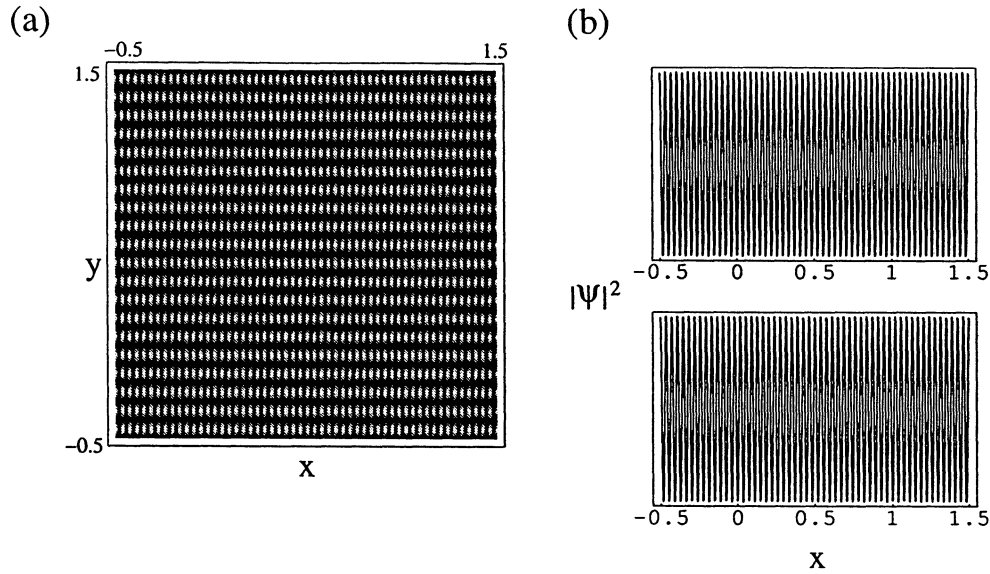


Figura 2.23: (a) Gráfico de  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  com uma onda incidente tipo  $\sin[k_x x] \sin[k_y y]$  e (b) dois cortes em  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  em  $y = -0,1875$  e  $y = 0,2825$ .  $k = 90,453866$  ( $m = 10$ ,  $n = 27$ ).

### Estado degenerado - Superposição de autoestados

Devido a sua simetria, o bilhar quadrado tem muitos estados de energia degenerados. Seus vetores número de onda são dados por  $k = \pi\sqrt{m^2 + n^2}$ ; uma vez, que trocando  $m$  por  $n$ , ou vice-versa, temos o mesmo valor de  $k$ , a energia do estado será a mesma, mudando a direção da onda incidente, pois  $\mathbf{k} = k_x \hat{i} + k_y \hat{j}$ .

Se temos  $\psi(\mathbf{r})_{nm}$ , superpondo os estados teremos

$$\psi(\mathbf{r})_s = c_{nm}\psi(\mathbf{r})_{nm} + c_{n'm'}\psi(\mathbf{r})_{n'm'}. \quad (2.62)$$

No caso em que nos ateremos,  $n' = m$  e  $m' = n$ , então

$$\psi(\mathbf{r})_s = c_{nm}\psi(\mathbf{r})_{nm} + c_{mn}\psi(\mathbf{r})_{mn}. \quad (2.63)$$

Para quadrado, com lado igual a 1, temos que  $c_{nm}$  é dado por

$$\begin{aligned} c_{nm} &= 2 \int_0^1 \sin[n\pi x] \exp[ik_x x] dx \int_0^1 \sin[m\pi y] \exp[ik_y y] dy \\ &= 2 \left( \frac{\pi n}{k_x^2 - n^2 \pi^2} [(-1)^n \exp[ik_x] - 1] \right) \times \\ &\quad \left( \frac{\pi m}{k_y^2 - m^2 \pi^2} [(-1)^m \exp[ik_y] - 1] \right). \end{aligned} \quad (2.64)$$

Da equação anterior vemos que trocando  $n$  por  $m$ , ou vice-versa, temos a mesma forma para  $c_{nm}$ , logo

$$\psi(\mathbf{r})_s = c'_{nm}(\psi(\mathbf{r})_{nm} + \psi(\mathbf{r})_{mn}) \quad (2.65)$$

e

$$|\psi(\mathbf{r})_s|^2 = |c'_{nm}|^2 |\psi(\mathbf{r})_{nm} + \psi(\mathbf{r})_{mn}|^2. \quad (2.66)$$

Na figura (2.24) temos em (a) o cálculo numérico da superposição dos estados  $10 \times 27$  e  $27 \times 10$  ( $m = 10$  e  $n = 27$ , e vice versa, mesma ressonância mostrada anteriormente para a ressonância do quadrado) para a parte interna do bilhar. A onda incide no bilhar com um ângulo de  $45^\circ$ , que está exatamente no meio dos dois ângulos de incidência para as ressonâncias degeneradas,  $\tan^{-1}[10/27]$  e  $\tan^{-1}[27/10]$ . Em (b) é mostrado a comparação entre a solução numérica e a analítica. Podemos ver que praticamente não há diferença entre as duas soluções.

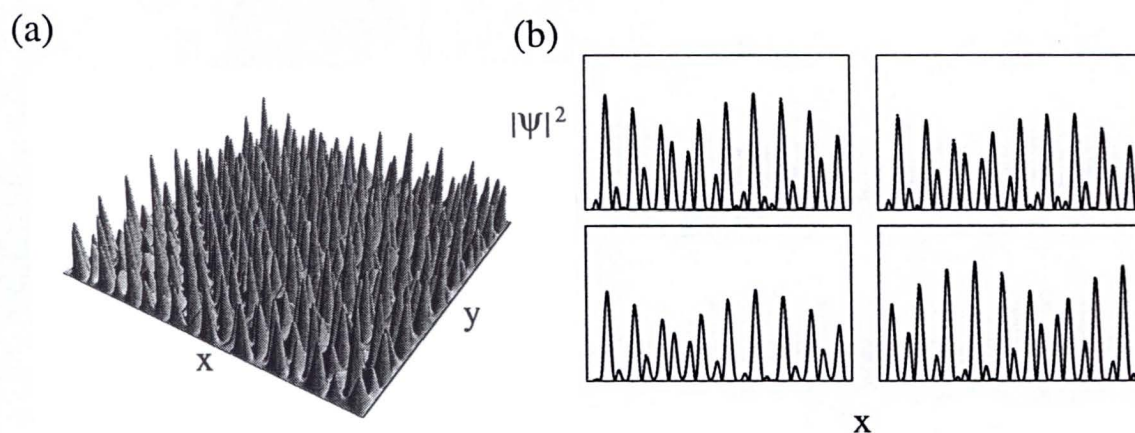


Figura 2.24: (a) Gráfico de da superposição de estados em  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  no caso degenerado  $10 \times 27/27 \times 10$ , com  $\theta = 45^\circ$ . (b) Cortes em várias regiões da área interna do bilhar, onde a solução numérica é representada pela linha contínua e a analítica pela linha pontilhada.

### 2.3.3 Quarto de Stadium

Em todas as figuras o bilhar tem lado  $l = 1,0$  e quarto de círculo com raio  $r = 1,0$ , ver figura (2.25).

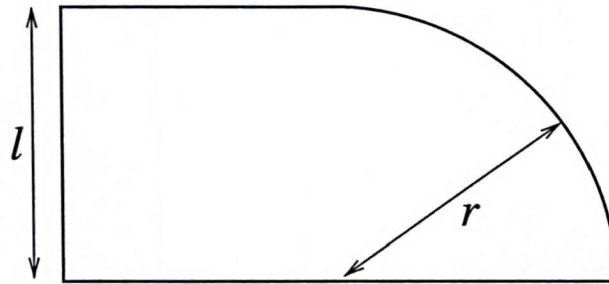


Figura 2.25: Bilhar quarto de Stadium.

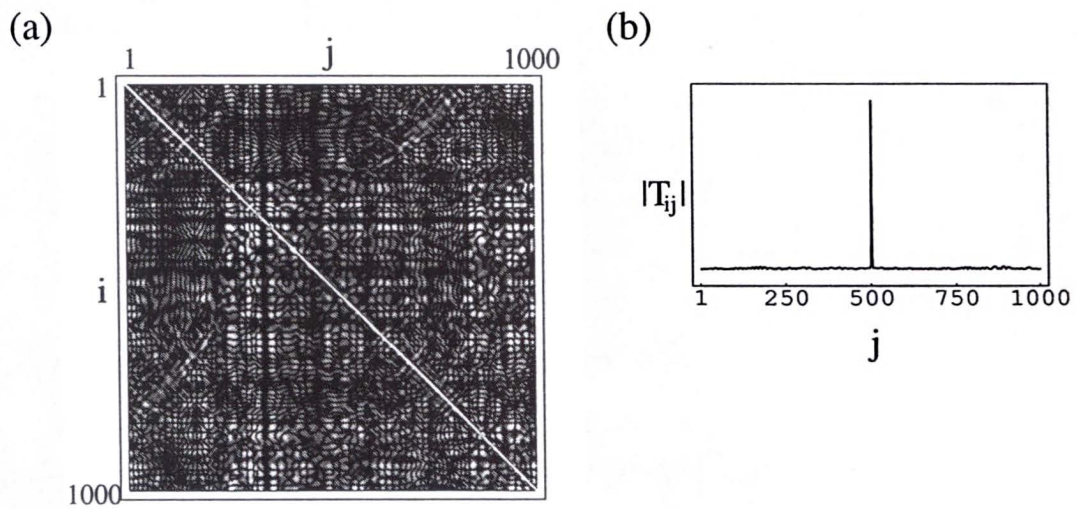


Figura 2.26: Gráfico de (a)  $|T|^2$  e (b) corte em  $T_{ij}$  em  $i = 500$  para  $k = 59, 55$

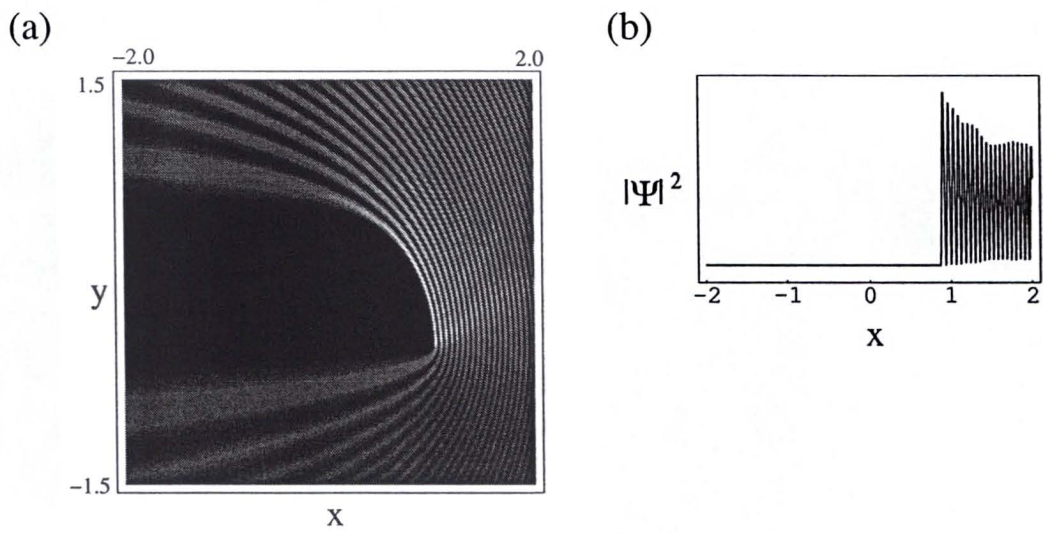


Figura 2.27: Gráfico de (a)  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  e (b) corte em  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  para  $y = 0, 0$  com  $k = 59, 55$ .

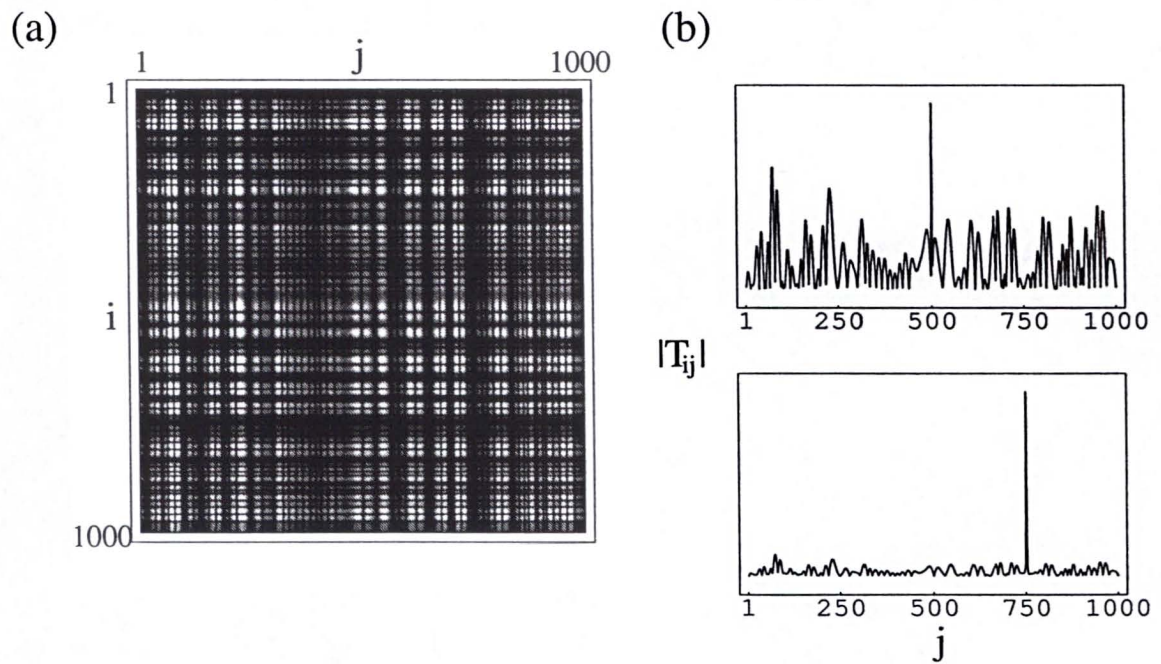


Figura 2.28: Gráfico de (a)  $|T|^2$  e (b) cortes em  $T_{ij}$  em  $i = 500$  e  $i = 750$ , respectivamente.  $k = 59, 68$

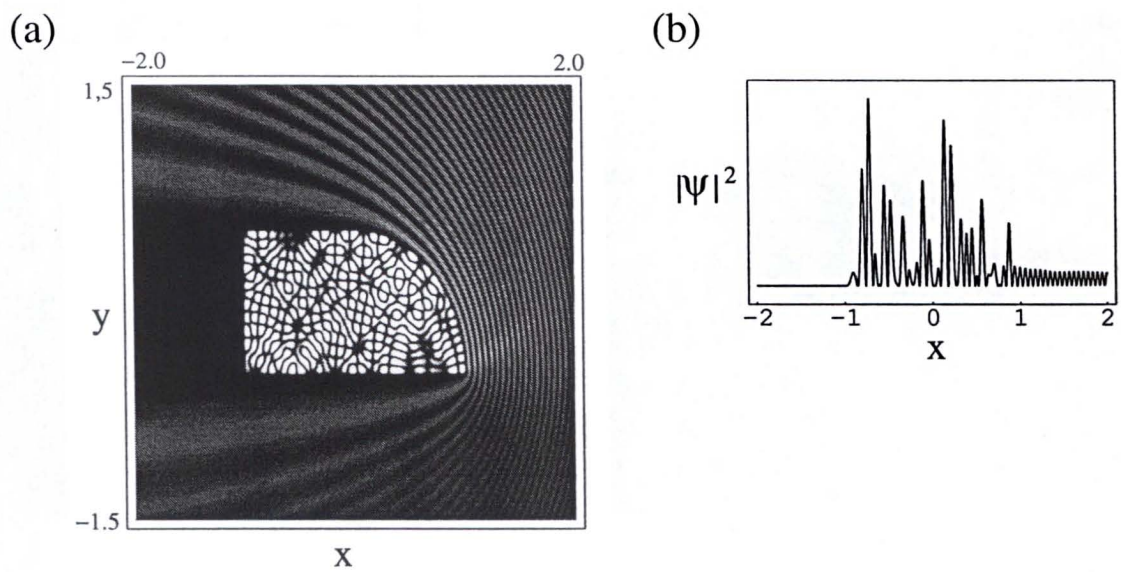


Figura 2.29: Gráfico de (a)  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  e (b) corte em  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  em  $y = -0,08$  com  $k = 59,68$ .

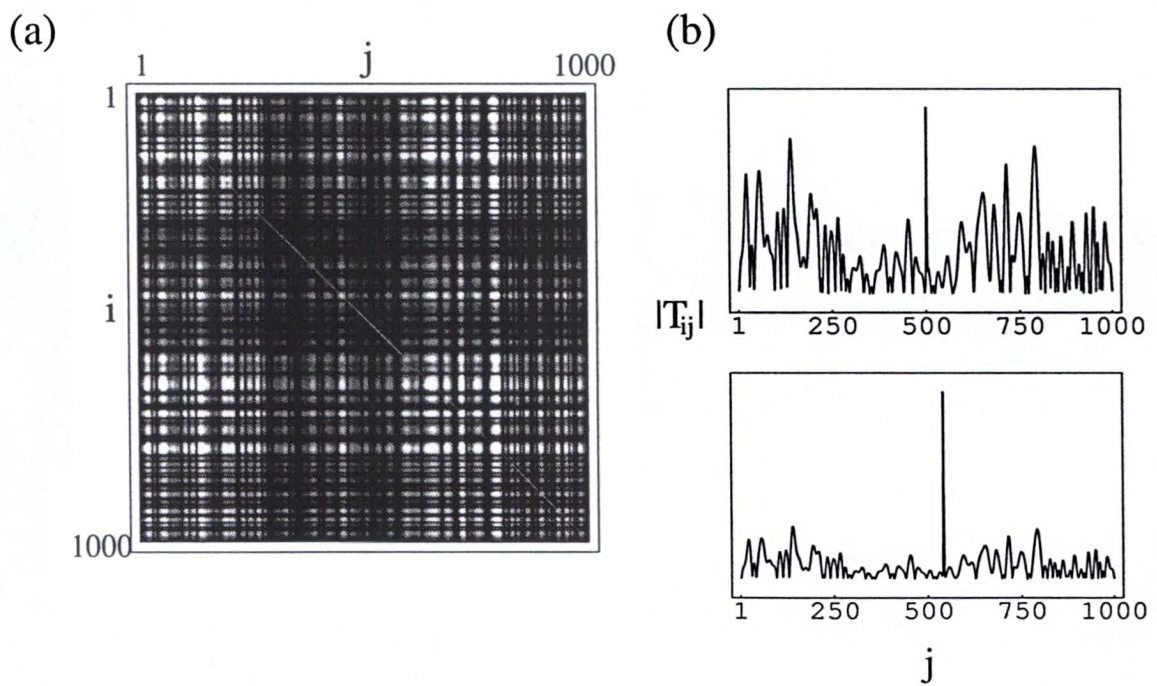


Figura 2.30: Gráfico de (a)  $|T|^2$  e (b) cortes em  $T_{ij}$  em  $i = 500$  e  $i = 540$ , respectivamente, para  $k = 59,90$ .

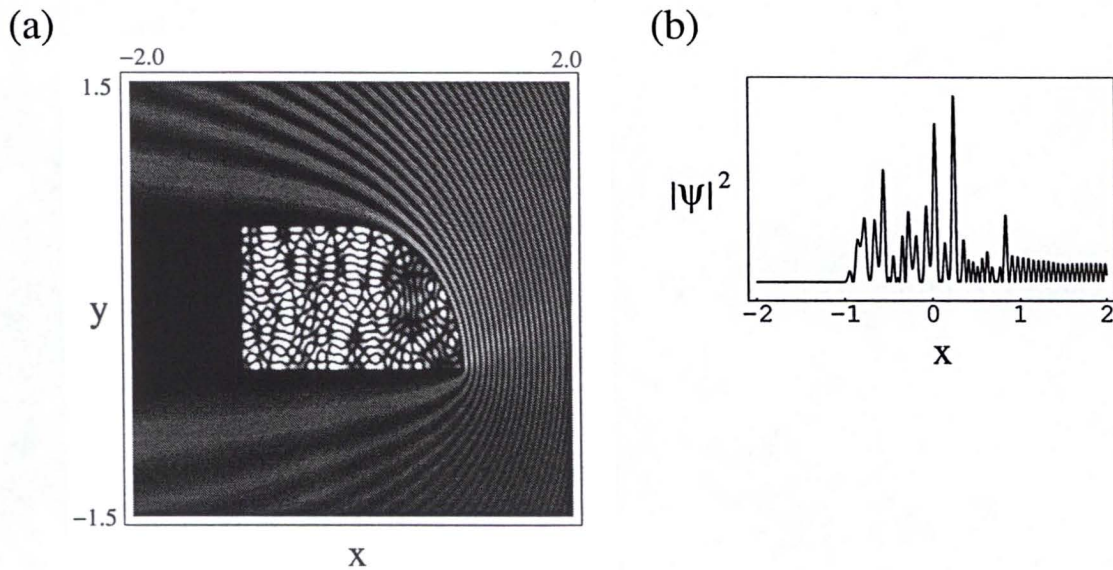


Figura 2.31: Gráfico de (a)  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  e (b) corte em  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  em  $y = 0, 0$  com  $k = 59, 90$ .

O conjunto de gráficos (2.26)-(2.27) mostra um caso em que o  $k$  da onda incidente não corresponde a um autovalor do bilhar. O número de onda incidente  $k$  tem uma diferença de apenas 0,13 para a ressonância a seguir, que é mostrada em (2.29).

Os dois conjuntos de gráficos (2.28)-(2.29) e (2.30)-(2.31) são referentes a duas ressonâncias consecutivas do bilhar Stadium.

É interessante observar a pouca variação em  $k$  para os 3 casos mostrados. Isso demonstra a boa resolução que podemos obter a partir do método do contorno de paredes, ajustando um  $N$  que satisfaça nossas necessidades (ênfatizando que foi utilizado  $N = 1000$ , nestes cálculos).

Analisando a matriz  $T$ , percebemos mais uma vez as características citadas anteriormente. No caso das ressonâncias podemos ver que, quando encontramos o número de onda  $k$  que mais se aproxima do exato, os elementos da diagonal da matriz quase não aparecem, o que mostra o quão estreita se torna a diagonal nestes casos. No quarto de stadium é mais complicado encontrar as ressonâncias nesta região de números de onda  $k$  mais elevados, devido a grande densidade de autoestados nessa região do espectro, que se deve também a sua natureza caótica.

### Comparação com outros cálculos

Aqui calculamos a matriz  $T$  e  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  para alguns números de onda  $k$  dados por Ortiz e Almeida [33]. Vemos a perfeita concordância na localização das ressonâncias dadas no artigo citado com o resultado obtido através do método do contorno de paredes.

Os números de onda  $k$  aqui mostrados são os que, no artigo de Ortiz e Almeida[33], não precisam considerar os *modos evanescentes* (ondas que, além da componente de onda plana, que oscila, possui uma componente que decai exponencialmente) em seus cálculos [4]. O método em [33] não tem um comportamento regular quando são necessários modos evanescentes, o que não ocorre no nosso caso. Quando comparamos nossos cálculos com resultados em [33], que exigem modos evanescentes, então encontramos discrepâncias. Isto é então devido ao problema de convergência do método em utilizado [33] para estas situações.

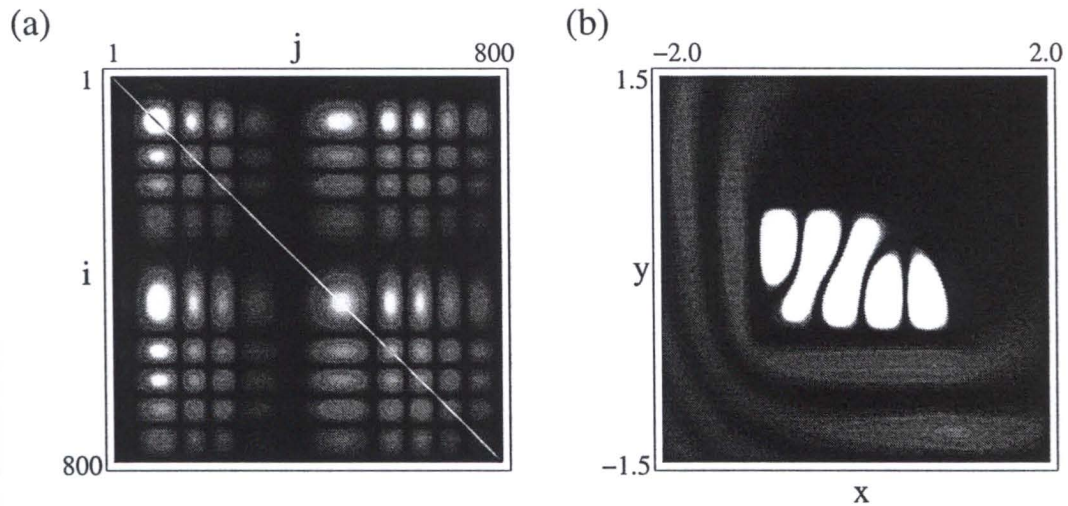


Figura 2.32: Gráfico de (a)  $|T|^2$  e (b)  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  com  $k = 8, 8807$ .



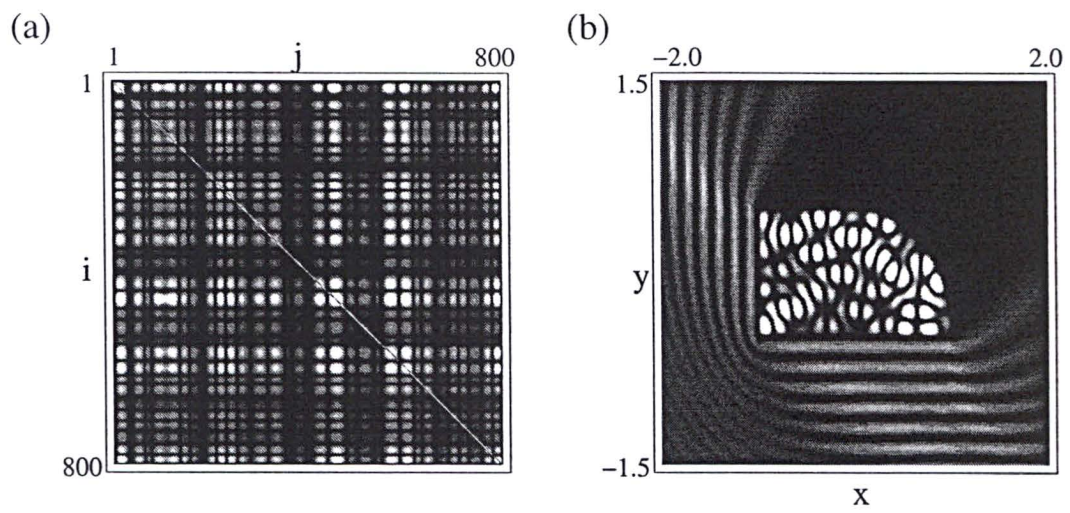


Figura 2.33: Gráfico de (a)  $|T|^2$  e (b)  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  com  $k = 28, 2478$ .

### 2.3.4 Quarto de Sinai de Bunimovich

O bilhar Quarto de Sinai de Bunimovich é da classe dos bilhares côncavos, ou que possui algum tipo de cavidade. A formulação do método do contorno de paredes que mostramos anteriormente é voltada à bilhares de forma geral. Porém, a abordagem utilizada para a prova do mecanismo de filtro, princípio da transparência e dualidade dentro/fora não se aplica à classe dos bilhares côncavos, pois nestes nem todas as quatro suposições feitas para o desenvolvimento do método são válidas. Por exemplo, não podemos encontrar um referencial onde tenhamos sempre  $\mathbf{r} > \mathbf{r}_s$ , com  $\mathbf{r}_s$  um vetor posição sobre a superfície. NO caso mais geral, visto na análise analítica, um único  $\theta$ , em um bilhar côncavo, não nos levará mais, necessariamente, a um único vetor posição sobre a superfície (o que não ocorre aqui, visto que o sistema de referência é colocado no centro do quadrado).

Em todas as figuras o bilhar possui lado  $l = 1,0$  e quarto de círculo com raio  $r = 0,6$ , ver figura (2.34).

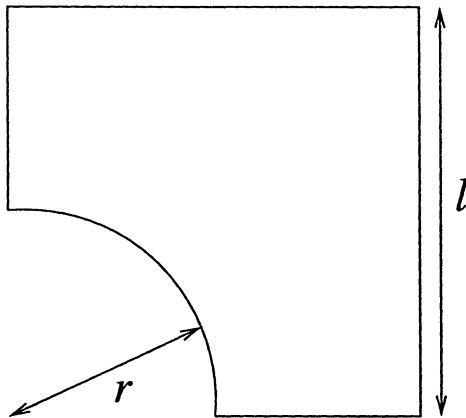


Figura 2.34: Bilhar quarto de Sinai de Bunimovich.

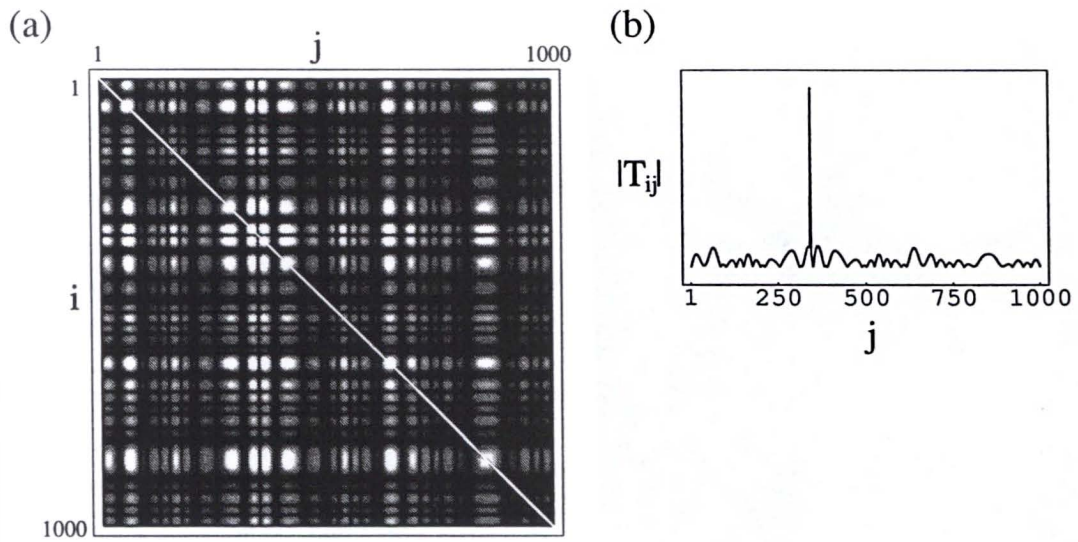


Figura 2.35: Gráfico de (a)  $|T|^2$  e (b) corte em  $T_{ij}$  em  $i = 342$  para  $k = 43,01$ .

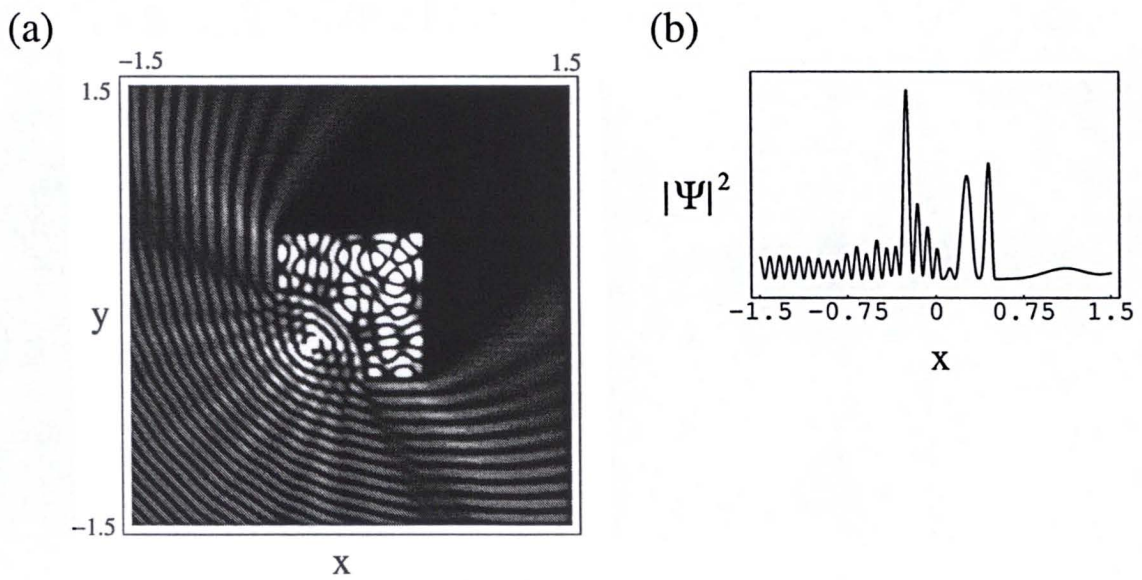


Figura 2.36: Gráfico de (a)  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  e (b) corte em  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  em  $y = -0,25$  para  $k = 43,01$ .

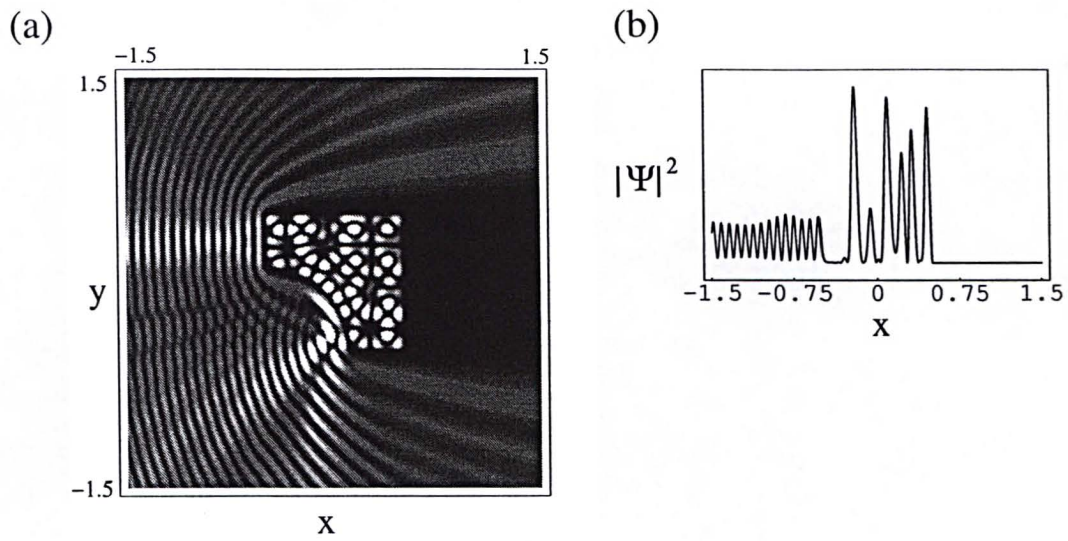


Figura 2.37: Gráfico de (a)  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  e (b) corte em  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  para  $y = 0.09$  com  $k = 42, 97$ .

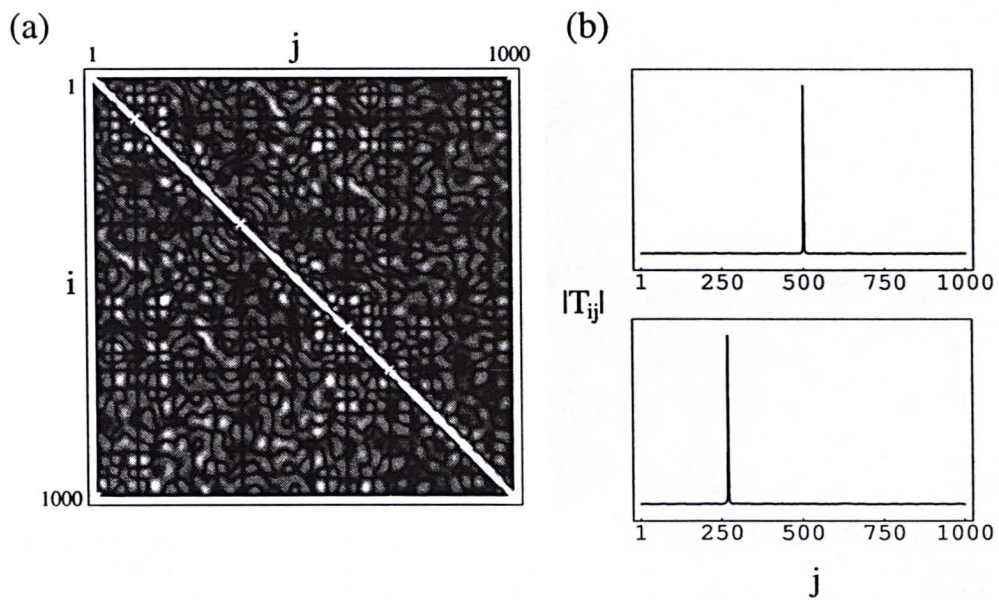


Figura 2.38: Gráfico de (a)  $|T|^2$  e (b) cortes em  $T_{ij}$  para  $i = 500$  e  $i = 260$  para  $k = 42, 70$ .

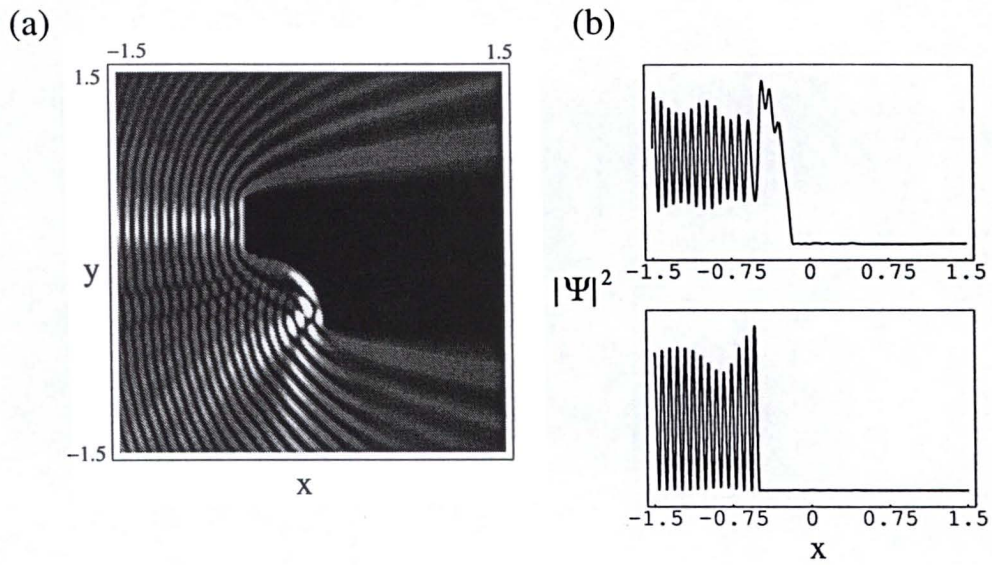


Figura 2.39: Gráfico de (a)  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  e (b) cortes em  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  em  $y = 0,0$  e  $y = 0,18$  com  $k = 42,70$ .

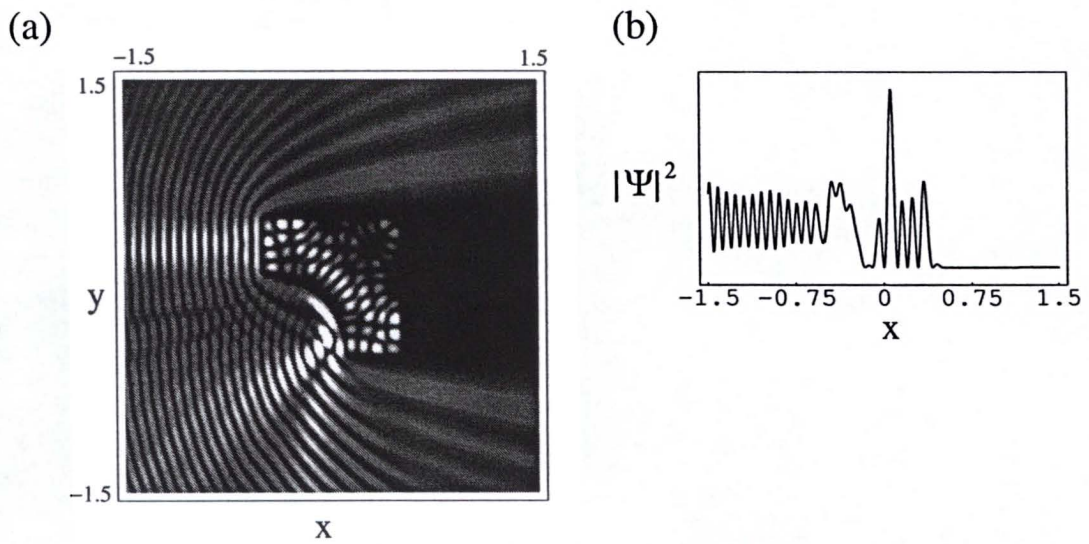


Figura 2.40: Gráfico de (a)  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  e (b) corte em  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  em  $y = 0,105$  para  $k = 42,39$ .

Observando os gráficos de  $\psi(\mathbf{r})$  podemos perceber que mesmo não sendo a prova do mecanismo de filtro direcionado à classe de bilhares a qual pertence o Sinai de Bunimovich, os resultados numéricos indicam que nestes também a matriz  $T$  apresenta a propriedade de filtro. As características apresentadas são as mesmas que nos bilhares convexos.

Uma pequena diferença que se pode notar é na matriz  $T$ . Em (a) na figura 2.35 uma parte dos elementos da diagonal, a partir de  $i$ , ou  $j$ , igual a 750, os elementos da diagonal se “alargam”. Este comportamento localiza-se nos elementos calculados sobre o quarto de círculo da figura.

### 2.3.5 Quarto de “Sinai Quadrado”

O bilhar quarto de “Sinai Quadrado”, é um caso similar ao quarto de Sinai de Bunimovich, analisado anteriormente. Ele também pertence à classe dos bilhares côncavos, onde agora muda o tipo de concavidade. Porém, devido a sua simetria ele é um bilhar quase-integrável (bilhar que classicamente não é caótico, mas apresenta caos após a quantização) [34].

Em todas as figuras o bilhar tem lado “maior”  $l = 1,0$  e lado “menor” igual a  $\frac{l}{2}$ , ver figura (2.41).

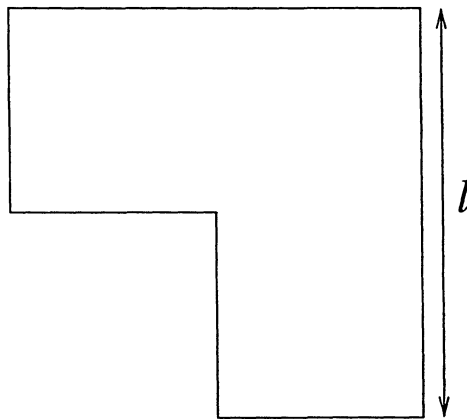


Figura 2.41: Bilhar quarto de Sinai quadrado.

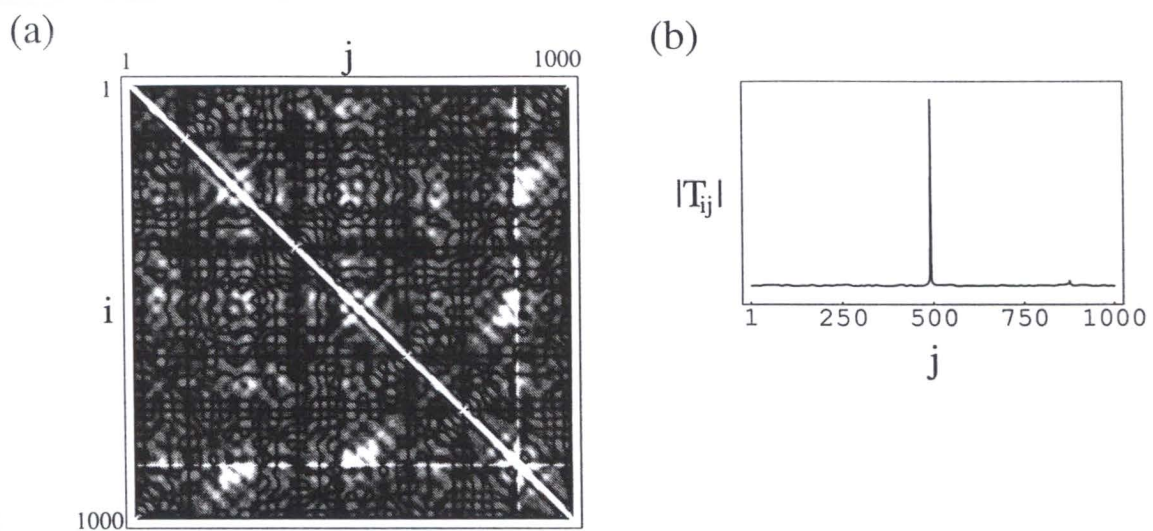


Figura 2.42: Gráfico de (a)  $|T|^2$  e (b) cortes em  $T_{ij}$  para  $i = 500$  com  $k = 50, 379$ .

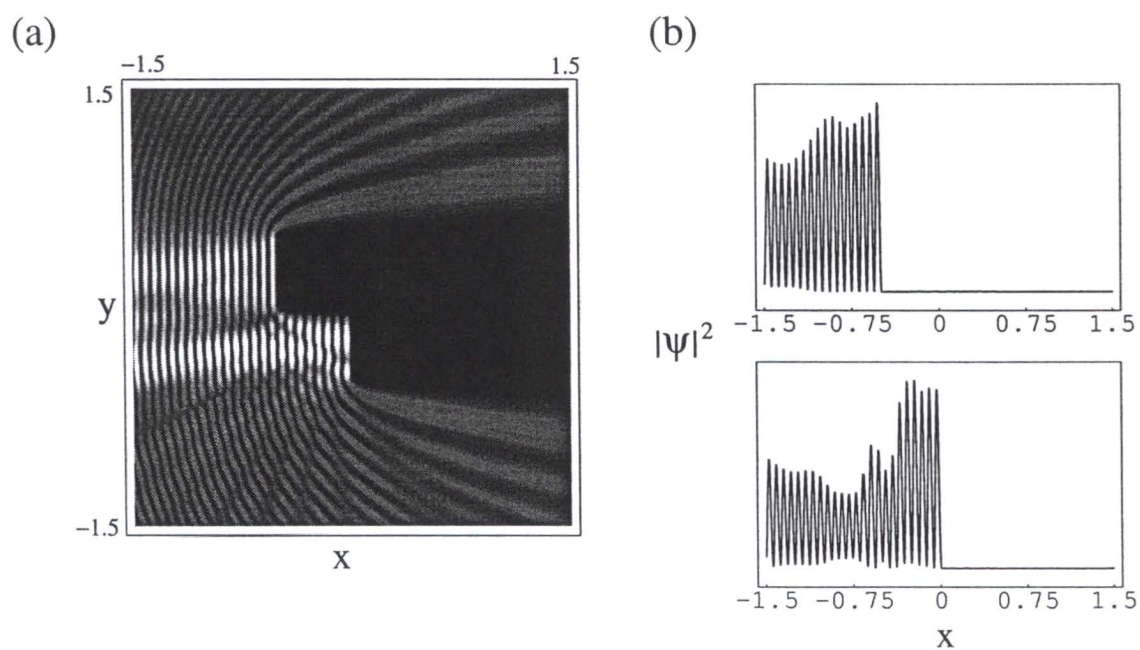


Figura 2.43: Gráfico de (a)  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  e (b) cortes em  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  em  $y = 0,075$  e  $y = -0,015$ , respectivamente, com  $k = 50, 349$ .



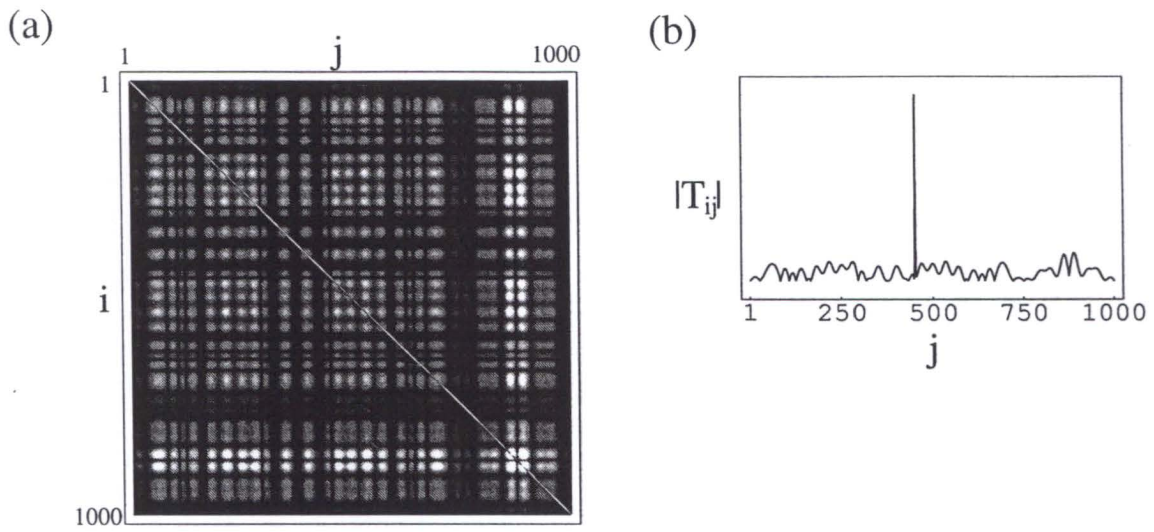


Figura 2.44: Gráfico de (a)  $|T|^2$  e (b) cortes em  $T_{ij}$  para  $i = 450$  com  $k = 50, 372$ .

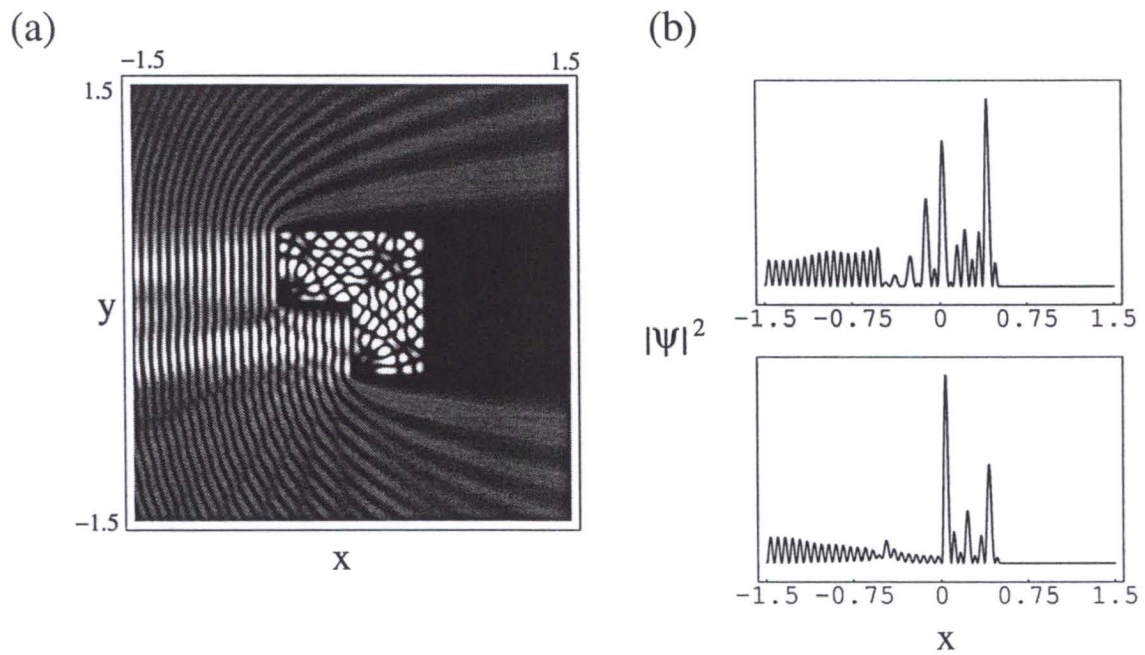


Figura 2.45: Gráfico de (a)  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  e (b) corte em  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  para  $y = 0, 075$  e  $y = -0, 06$ , respectivamente, para  $k = 50.372$ .

No quarto de Sinai quadrado mostram-se as características principais do método que vem sendo observadas em todos os bilhares estudados até agora. Assim como no quarto de Sinai de Bunimovich, através da análise dos gráficos de  $\psi(\mathbf{r})$  vemos que o mecanismo de filtro da matriz  $T$  se mostra presente para este bilhar.

## Ressonância do quadrado

Qualquer solução que se anule sobre as linhas de simetria de um bilhar pode ser solução para o problema interno.

Pode-se ver facilmente que o quarto de “Sinai quadrado” pode ser separado em 3 quadrados menores com lado medindo o mesmo comprimento do lado da concavidade do bilhar original. Então, qualquer solução que se anule sobre as linhas dessa divisão, é solução para o problema. Logo, as soluções para o bilhar quadrado devem ser soluções para este bilhar também, desde que escolhamos um  $k$  que respeite o proposto acima.

A prova do proposto acima é mostrada nas figuras (2.47) e (2.48). Nelas vemos facilmente que se completássemos o quadrado “faltante” no bilhar teríamos o quadrado maior completo e com sua solução interna correta. Comparando a figura (2.46) com os resultados obtidos para o quadrado vemos que a matriz  $T$  do Sinai quadrado em uma ressonância do quadrado é idêntica a que temos para o próprio bilhar quadrado.

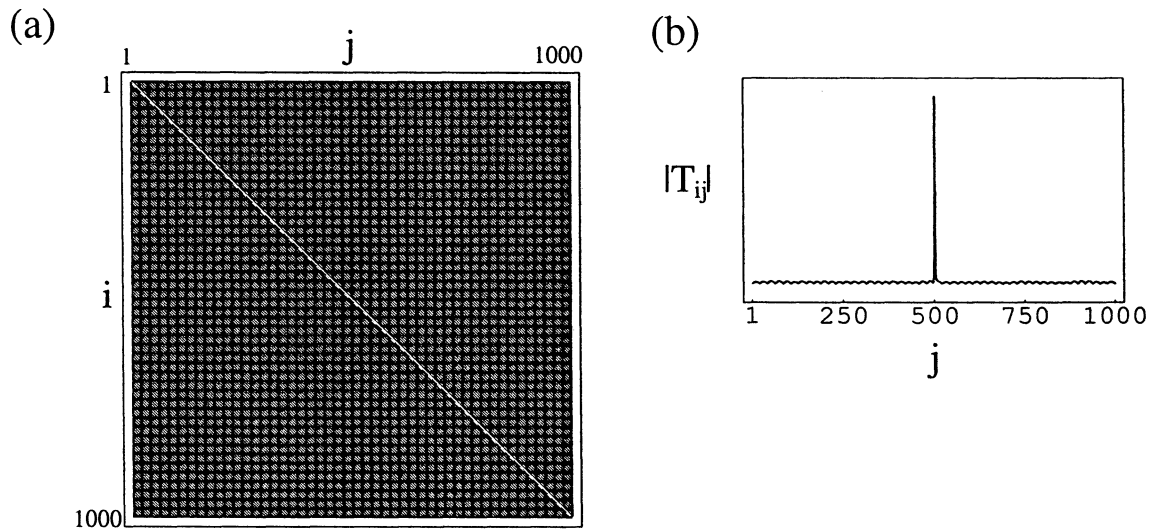


Figura 2.46: Gráfico de (a)  $|T|^2$  e (b) corte em  $T_{ij}$  para  $i = 500$  com  $k = 53,3146$ , ressonância  $m = 12$  e  $n = 12$  do quadrado.

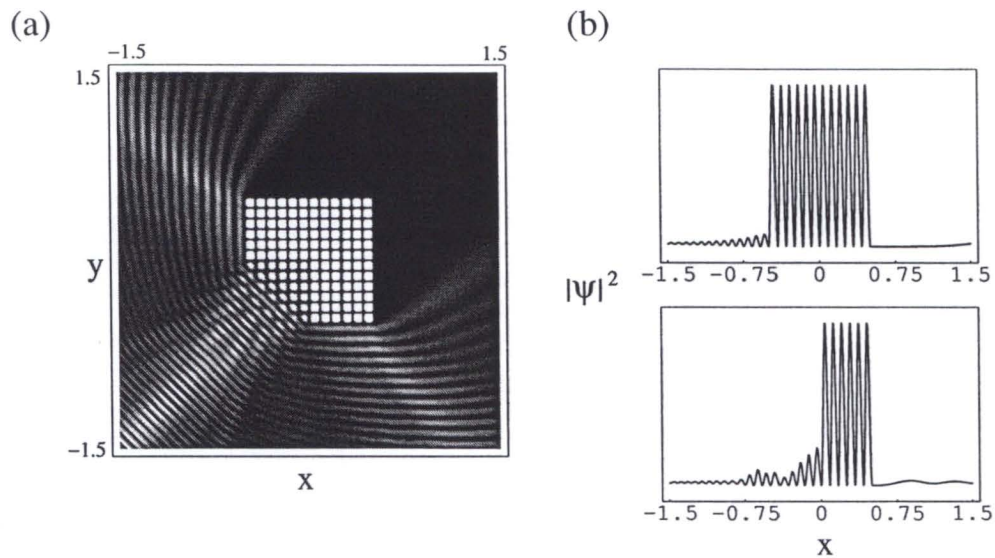


Figura 2.47: Gráfico de (a)  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  e (b) e dois cortes em  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  para  $y = 0,21$  e  $y = -0,375$ , respectivamente, com  $k = 53,3146$ , ressonância  $m = 12$  e  $n = 12$  do quadrado. Aqui o ângulo de incidência tem um acréscimo de  $180^\circ$  em relação à figura anterior.

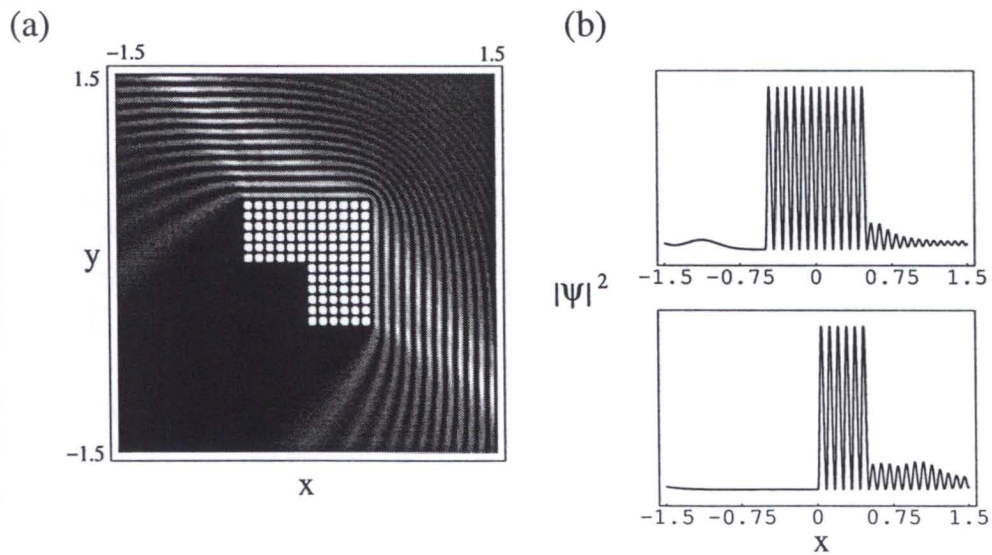


Figura 2.48: Gráfico de (a)  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  e (b) e dois cortes em  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  para  $y = 0.21$  e  $y = -0.375$ , respectivamente, com  $k = 53,3146$ , ressonância  $m = 12$  e  $n = 12$  do quadrado.

## 2.4 Discussão a cerca da interpretação física de $T$

Toda a idéia principal do método do contorno de paredes gira em torno da obtenção da Matriz  $T$ . Esta matriz apresenta certa facilidade no seu cálculo, uma vez que é calculada apenas sobre a barreira espalhadora em consideração. Através de simples análises desta matriz podemos verificar várias características do sistema que estamos estudando, uma vez que é um objeto inerente ao formato da barreira e ao valor de sua energia. Partindo destas análises podemos trabalhar, por exemplo, com o caso de ressonâncias, a integrabilidade, a simetria e a permeabilidade.

A partir das equações de espalhamento encontradas pode ser feita uma análise do comportamento físico da matriz  $T$ , além da extensa análise matemática já feita. Na equação (2.20) temos que a função de onda  $\psi(\mathbf{r})$ , após ser espalhada, é formada pela soma de uma onda incidente  $\varphi(\mathbf{r})$ , com uma parte espalhada  $\psi^{scat}(\mathbf{r})$ , que interagiu com a barreira. Aqui estamos interessados no comportamento de  $\psi^{scat}(\mathbf{r})$ , que caracteriza o espalhamento. Para qualquer ponto  $\mathbf{r}$  do espaço, tanto fora quanto dentro de  $\mathcal{C}$ , a parte espalhada da função de onda é resultante da soma dos valores da onda espalhada por cada ponto de  $\mathcal{C}$ . A matriz  $T$  nesse processo age como um tipo de propagador da onda sobre a barreira. Para um dado  $s_a$ , a matriz  $T$  propaga a “onda fonte” até um ponto  $s_b$ , que então é propagado livremente até  $\mathbf{r}$  por  $G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}_b)$ , como vemos esquematizado na figura (2.49). Todas as colisões que acon-

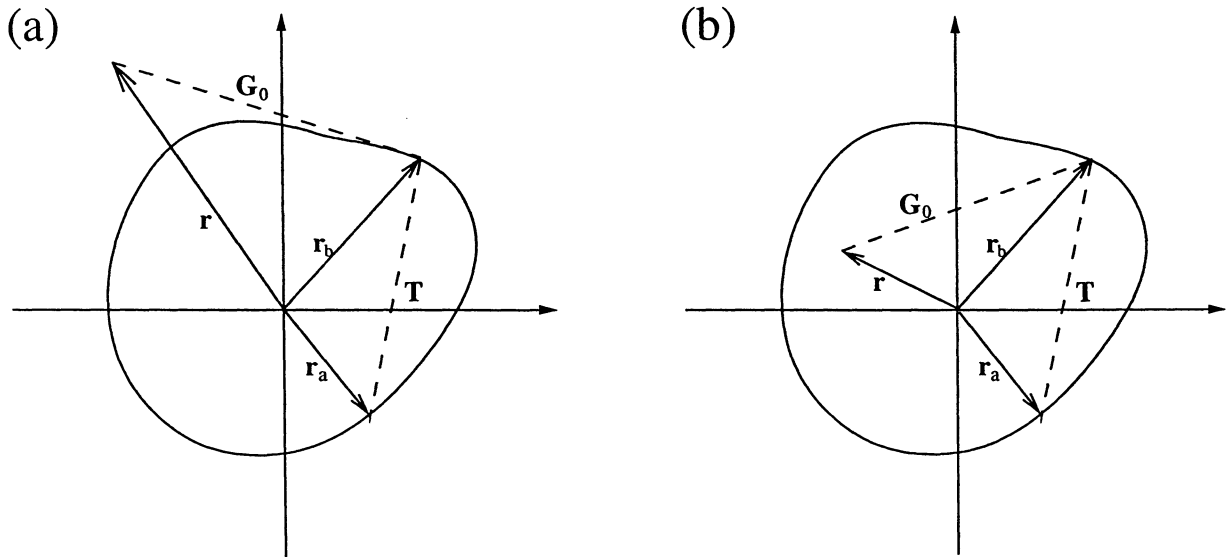


Figura 2.49: Esquemas de como agem fisicamente a matriz  $T$  e função de Green  $G_0$  na construção da parte espalhada da função de onda  $\psi^{scat}(\mathbf{r})$  para (a)  $\mathbf{r}$  externo e (b)  $\mathbf{r}$  interno à barreira.

tecem entre o ponto de “incidência”  $a$  da onda e o ponto de “saída”  $b$  da barreira estão incluídos em  $T(s_a, s_b)$ . Ou seja,  $T$  não é uma quantidade perturbativa, ela já representa todas as contribuições dos múltiplos espalhamentos ocorridos nas paredes do bilhar. Na obtenção de  $\psi^{scat}(\mathbf{r})$  temos então que somar sobre todos os pontos espalhadores  $\mathbf{r}_b$ . Neste processo, o módulo de  $T_{ij}$  é interpretado como a amplitude de probabilidade do componente da onda que incide perpendicularmente à barreira em  $s_i$  ser espalhado e virar uma “fonte” (sair) em  $s_j$ . A partir desta observação pode-se entender por que sempre o módulo do elemento da diagonal da matriz  $T$  é maior que os elementos de fora da diagonal. Nesta situação, quando observamos o módulo de  $T$ , estamos analisando a probabilidade de uma partícula incidir sobre um ponto da barreira espalhadora e sair por esse mesmo ponto, ou seja, a probabilidade de reflexão neste ponto, que, logicamente, é maior que a probabilidade da partícula sair de outro ponto da barreira. Este princípio está particularmente ligado ao *princípio óptico* ou *princípio de Huygens*, assim como a própria função de Green [35], a partir da qual  $T$  é construída.

Da descrição acima, podemos entender o mecanismo que gera os auto-estados internos, quando  $k$  é um  $k$  ressonante, ou que fornece  $\psi = 0$  quando  $k$  está fora da ressonância. Em primeiro lugar, podemos pensar em  $T_{ij}$  como sendo fontes pontuais de ondas (princípio de Huygens). Fora da ressonância, os elementos  $T_{ij}$  “não estão correlacionados” de tal forma que temos fontes não coerentes, e a soma destas contribuições resultam em interferência destrutiva. Já quando estamos na ressonância, os  $T_{ij}$  possui um padrão característico (ver por exemplo figuras (2.16), (2.28), (2.35), (2.44)) e isto origina interferência construtiva, de tal forma que  $\psi \neq 0$  para o bilhar. Na verdade, o tipo de padrão de  $T$  na ressonância reflete exatamente os máximos e mínimos observados na distribuição espacial dos autoestados no interior do bilhar. Isto explica qualitativamente o por que dos termos de  $T$  longe da diagonal principal se formarem importantes nas ressonâncias.

## Capítulo 3

# Bilhares com parede permeável

Nos capítulos anteriores o trabalho desenvolvido foi totalmente direcionado aos bilhares com paredes impenetráveis, o que na nossa análise significa que  $\gamma(s)$ , o parâmetro que controla a permeabilidade da parede do bilhar no método do contorno de paredes, tende a infinito. A rigor, a maior parte das definições que temos para bilhar [16] exigem que a condição de contorno de Dirichlet seja satisfeita (função de onda  $\psi(\mathbf{r})$  se anule sobre a barreira). Porém, existem casos em que torna-se interessante que as barreiras em estudo assumam outras condições de contorno. Isto é o que ocorre, por exemplo, nos “soft wall billiards” [36][37][38]. Podemos querer que, ao invés de a parede do obstáculo espalhador ser rígida, esta tenha uma certa permeabilidade. Sendo assim, a função de onda  $\psi(\mathbf{r})$  não precisa mais anular-se sobre a parede, podendo ser espalhada e/ou transmitida através da barreira.

Considerar o obstáculo espalhador permeável no método do contorno de paredes significa que  $\gamma(s)$  deve assumir um valor finito sobre a parede deste espalhador. Sendo assim, o potencial ainda se mantém agindo apenas sobre o contorno  $\mathcal{C}$ . Podemos então utilizar ainda a forma (2.1) para o potencial que, como dito desde o início do trabalho, tem certa flexibilidade no tratamento de  $\mathcal{C}$ , flexibilidade esta que se estende também às aplicações do método.

Como vimos no início do primeiro capítulo, escolhendo  $\alpha(s) = 1$  em (2.1) teremos a forma  $V(\mathbf{r}) = \int_{\mathcal{C}} ds \gamma(s) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}(s))$  para o potencial ao qual submetemos a onda que será espalhada. Essa forma de  $V(\mathbf{r})$  age no sentido de formar uma barreira permeável à onda, sendo a permeabilidade controlada por  $\gamma(s)$ , com probabilidades  $\mathcal{T} = 4k^2/(4k^2 + \gamma(s)^2)$  de transmissão e  $\mathcal{R} = \gamma(s)^2/(4k^2 + \gamma(s)^2)$  de reflexão através de  $s$ . A demonstração deste fato é feita em [14].

As equações que utilizaremos aqui para a solução dos bilhares permeáveis são as (2.15) para cálculo de  $\psi(\mathbf{r})$  e (2.16) para o cálculo da matriz  $T$ . Assim como feito na obtenção das equações citadas, nos manteremos aqui no caso em que  $\gamma$  é constante sobre a fronteira do bilhar.

Um caso a ser considerado em trabalhos futuros é onde  $\gamma$  é finito e mantém a dependência em  $s$ . Neste caso ainda podemos usar (2.15) e (2.16), a única modificação que teríamos a fazer é na equação (2.18), que é utilizada no cálculo de  $T$ . Nesta equação existe um  $\gamma(s_j)$  que multiplica cada  $G_0(\mathbf{r}(s_j), \mathbf{r}(s_{j-1}))$ . Como em tal desenvolvimento  $\gamma$  é constante, todos os termos são iguais e saem da integral em um único termo  $\gamma^j$ . Então, se pretendermos que a permeabilidade varie sobre  $\mathcal{C}$  basta que mantenhamos a dependência em  $s_j$  para o fator  $\gamma$  nesta equação, o que não trará muitas complicações a mais aos cálculos.

### 3.1 Resultados numéricos

Pouca coisa muda no cálculo numérico para quando  $\gamma$  é finito. Anteriormente usamos (2.61) na obtenção de  $\psi(\mathbf{r})$ . Para barreiras permeáveis devemos usar (2.58), que é a equação de espalhamento discretizada para todo o espaço dependendo de uma função  $\gamma$ , com  $\gamma$  finito e constante sobre toda a barreira.

A diferença aqui reside toda em como é feita a avaliação de  $\mathbf{T}$ , pois no tratamento numérico pelo qual passa o método, a ação de  $\gamma$  é toda incorporada na matriz  $T$ . Para os bilhares impermeáveis  $\mathbf{T} \rightarrow \mathbf{M}^{-1}$ , então precisávamos calcular apenas a inversa de  $\mathbf{M}$ . Agora temos que manter a forma original da matriz  $T$  discretizada,  $\mathbf{T} = \gamma[\mathbf{I} - \gamma\mathbf{M}]^{-1}$ , o que não acresce muita dificuldade extra ao trabalho computacional.

Nos cálculos numéricos conduzidos aqui usamos duas maneiras para conferir valor numérico ao fator  $\gamma$ . Podemos dar o valor ao próprio  $\gamma$  diretamente ou podemos utilizar as formas de  $\mathcal{R}$  e  $\mathcal{T}$  para isso. Escolhendo  $\mathcal{T}$  e isolando  $\gamma$  nesta, teremos que  $\gamma = 2k\sqrt{\frac{1}{\mathcal{T}} - 1}$  (onde pode-se perceber bem a dependência inversa que o fator tem com a permeabilidade, visto que quanto maior for a transmissão  $\mathcal{T}$ , e consequentemente a permeabilidade, menor será o fator  $\gamma$ ). Pela definição de  $\mathcal{T}$  temos  $0 < \mathcal{T} < 1$ . Utilizar o conceito de transmissão, inerente a permeabilidade, pode ser de mais fácil assimilação, na medida que este é mais intuitivo que o  $\gamma$  em si. Deste modo também podemos ter idéia dos valores numéricos “característicos” e úteis de  $\gamma$ .

Vejam alguns exemplos de aplicações do método do contorno de paredes para os bilhares permeáveis circular e quadrado. Para todas as figuras aqui apresentadas os círculos têm raio  $r = 1, 0$  e os quadrados têm lado  $l = 1, 0$ .



### 3.1.1 Círculo

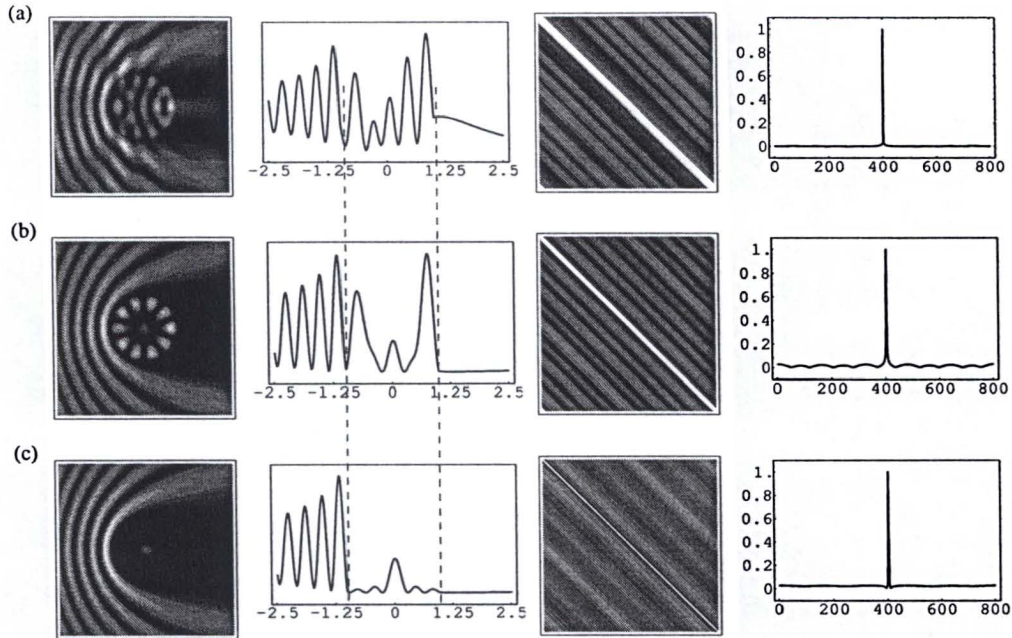


Figura 3.1: Gráficos de  $|\psi(\mathbf{r})|^2$ ,  $|T|^2$  e seus respectivos cortes para  $\gamma$  igual (a) 10,(b) 100,(c) 1000 (que já apresenta comportamento de uma barreira impenetrável,  $\gamma \rightarrow \infty$ ). Os cortes em  $\psi(\mathbf{r})$  foram todos feitos em  $y = 0,0$  (meio do bilhar circular) e  $i = 400$  em  $T_{ij}$ . A onda incidente tem  $k = 8,6537$ , segunda raiz de  $J_0$ . A linha pontilhada mostra a borda do bilhar.

Na figura (3.1) vemos o que acontece com o bilhar conforme é mudado o fator  $\gamma$  para um número de onda  $k$  que é autovalor do bilhar circular. Vemos que, começando com um fator pequeno ( $\gamma = 10 \rightarrow \mathcal{T} = 0,750$ ), o bilhar torna-se permeável a uma certa parte da onda e reflete outra, não mostrando sinais de ressonâncias em seu interior. Quando vamos aumentando  $\gamma$  o bilhar passa por uma situação onde a solução interna começa a apresentar sinais da ressonância associada ao autovalor  $k$  misturada ainda a uma parte da onda que é transmitida pela barreira ( $\gamma = 100 \rightarrow \mathcal{T} = 0,029$ ) e por fim chegando a uma situação onde o comportamento já é de um bilhar impenetrável ( $\gamma = 1000 \rightarrow \mathcal{T} = 0,00029$ ).

Na figura (3.2) o bilhar mostra o mesmo comportamento, porém agora o número de onda  $k$  não corresponde a nenhum autovalor do bilhar circular.

É interessante perceber a semelhança entre (3.1.a) e (3.2.a). A diferença dos resultados para  $\psi(\mathbf{r})$  do bilhar onde a onda incidente tem  $k$  pertencente ao espectro de autovalores do problema do bilhar circular e do caso onde  $k$  não pertence ao

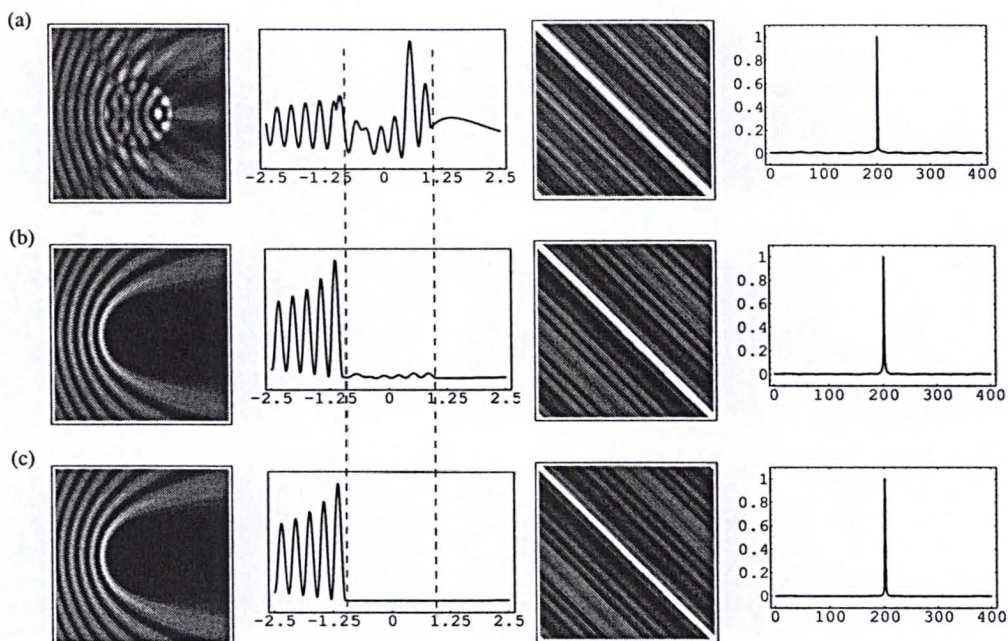


Figura 3.2: Gráficos de  $|\psi(\mathbf{r})|^2$ ,  $|T|^2$  e seus respectivos cortes para  $\gamma$  de (a) 10, (b) 100, (c) 1000 (que já apresenta comportamento de uma barreira impenetrável,  $\gamma \rightarrow \infty$ ). Os cortes em  $\psi(\mathbf{r})$  foram todos feitos em  $y = 0, 0$  (meio do bilhar circular) e  $i = 400$  em  $T_{ij}$ . A onda incidente tem  $k = 10, 50$ . A linha pontilhada mostra a borda do bilhar.

espectro é muito pequena e se deve ao acréscimo no número de onda, que ocorre do primeiro para o segundo caso. Nesta situação a permeabilidade do bilhar é grande, então, não importa o espectro de energias do bilhar, pois, as soluções para  $\psi(\mathbf{r})$  não obedecem mais às mesmas condições de fronteira de antes ( $\psi(\mathbf{r}(s)) = 0$ ). Porém, à medida que a permeabilidade vai diminuindo ( $\gamma \rightarrow \infty$ ), as soluções para os dois casos vão se tornando totalmente distintas e tendendo à solução correta do bilhar infinito, inclusive a forma da matriz  $T$ .

Os resultados comentados acima condizem com os cálculos teóricos levados a cabo no início do capítulo anterior, pois, se  $\gamma$  é finito, não temos mais o bilhar obedecendo às condições de contorno de Dirichlet ( $\psi(\mathbf{r}(s)) = 0$ ). Logo não podemos mais ver o problema interno como o de um bilhar impenetrável e a solução interna do bilhar não pode ser semelhante àquela de quando  $\gamma \rightarrow \infty$ .

### 3.1.2 Quadrado

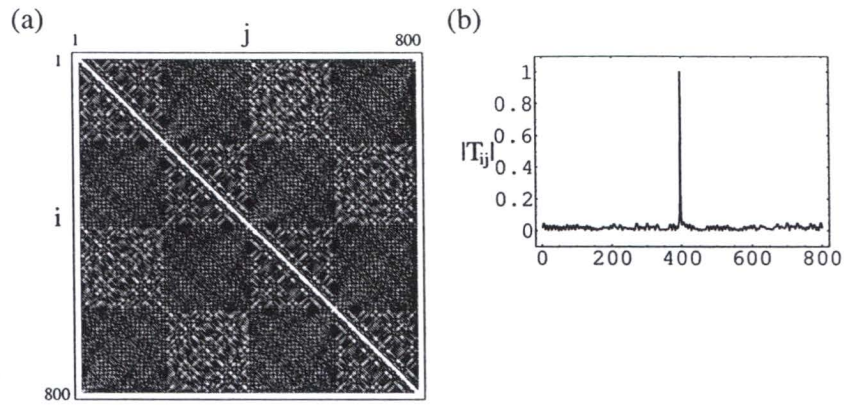


Figura 3.3: (a)  $|T|^2$  e (b) corte em  $T_{ij}$  em  $i = 405$  para  $\mathcal{T} = 50\%$  com  $k = 93, 16$  e ângulo de incidência de  $0^\circ$ .

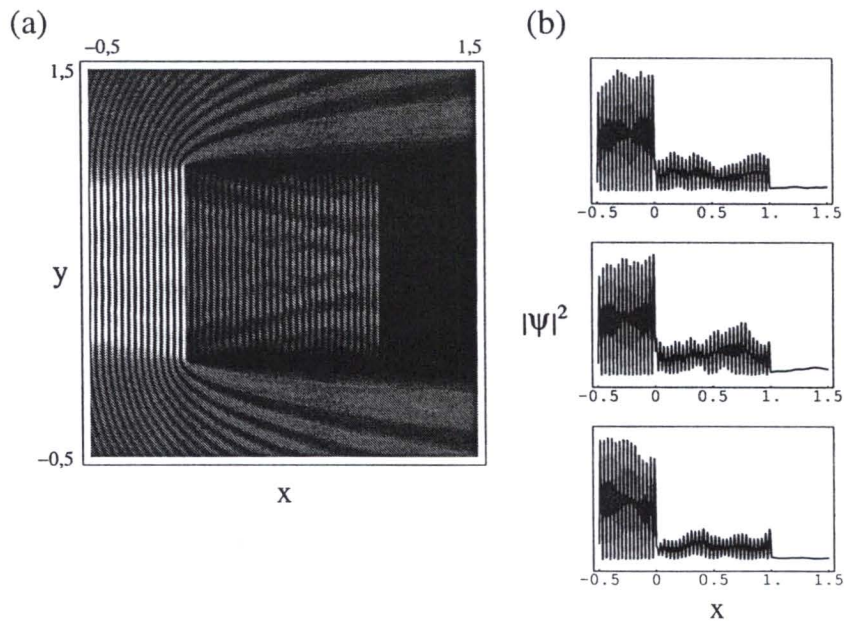


Figura 3.4: (a)  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  e (b) cortes em  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  para  $y = 0,125$ ,  $y = 0,5$  e  $y = 0,75$  (de baixo para cima), para  $\mathcal{T} = 50\%$  com  $k = 93, 16$  e ângulo de incidência de  $0^\circ$ .

Nas figuras (3.3) e (3.4) são mostrados a matriz  $T$  e  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  para um bilhar permável quadrado com a onda incidindo num ângulo de  $90^\circ$ . Para as figuras (3.5) e (3.6), a análise é similar à feita no caso do bilhar circular. Observamos que à medida que o fator  $\gamma$  vai crescendo ( $T$  diminuindo), a solução interna vai se “transformando” na solução correta para o autovalor  $k$  do bilhar impenetrável, associado à onda incidente.

Das análises dos bilhares circular e quadrado podemos perceber que, em ambos os casos, onde o que predomina é a solução do bilhar permeável, não importando se  $k$  é um autovalor ou não do caso análogo com  $\gamma \rightarrow \infty$ , a análise da matriz  $T$  não apresenta relevância, pois esta é similar para números de onda com valores próximos (para uma mesma geometria).

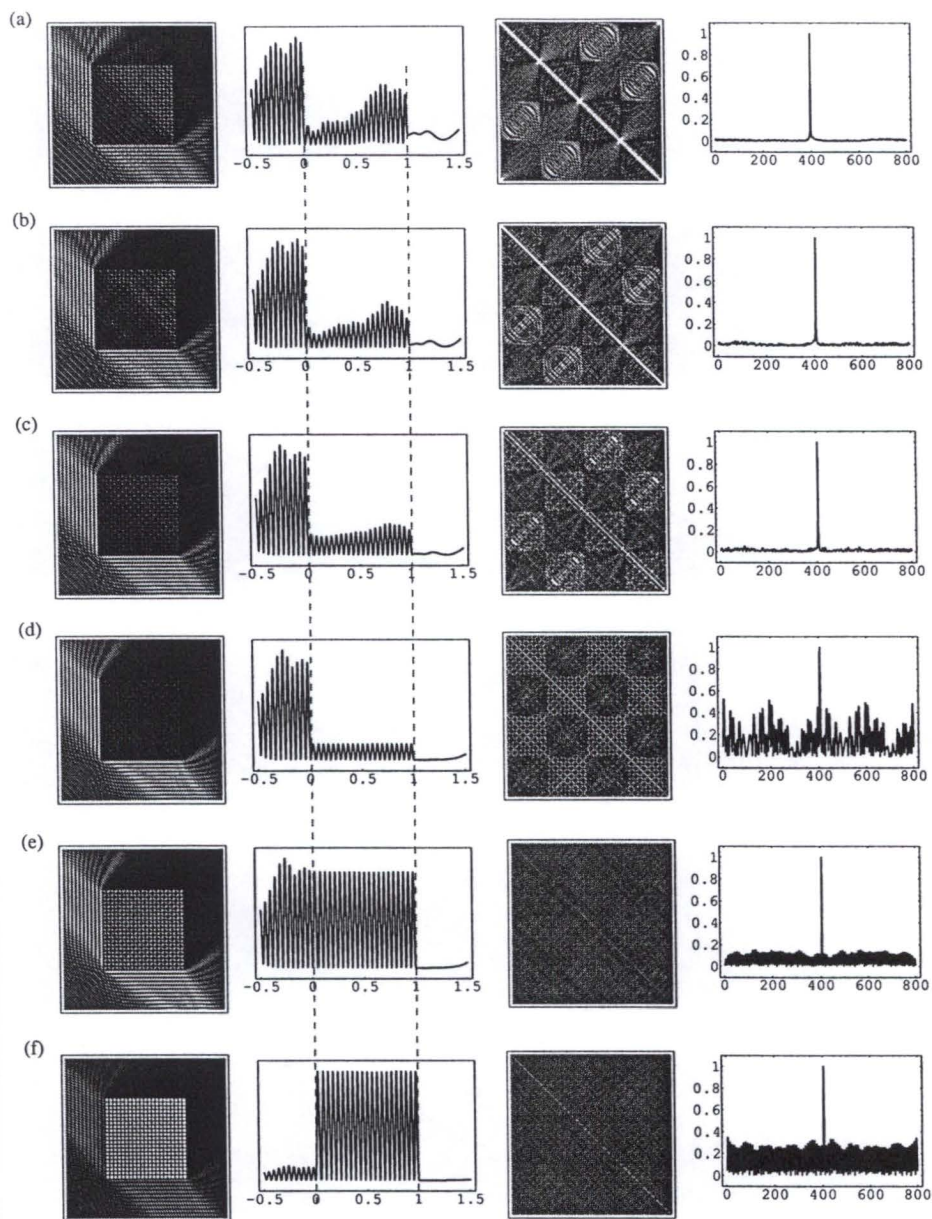


Figura 3.5: Gráficos de  $|\psi(\mathbf{r})|^2$ ,  $|T|^2$  e seus respectivos cortes para transmissão de (a) 70%, (b) 50%, (c) 30%, (d) 10%, (e) 0,01%, (f) 0,000001% (que já apresenta comportamento de uma barreira impenetrável,  $\gamma \rightarrow \infty$ ). Os cortes em  $\psi(\mathbf{r})$  foram todos feitos em  $y = 0,0$  (meio do bilhar circular) e para  $T$ ,  $i = 400$  em (a) e  $i = 200$  em (b). A onda incidente tem  $k = 93,3005417$  (ressonância  $21 \times 21$  do quadrado), com o ângulo de incidência correto para a ressonância. A linha pontilhada mostra a borda do bilhar.

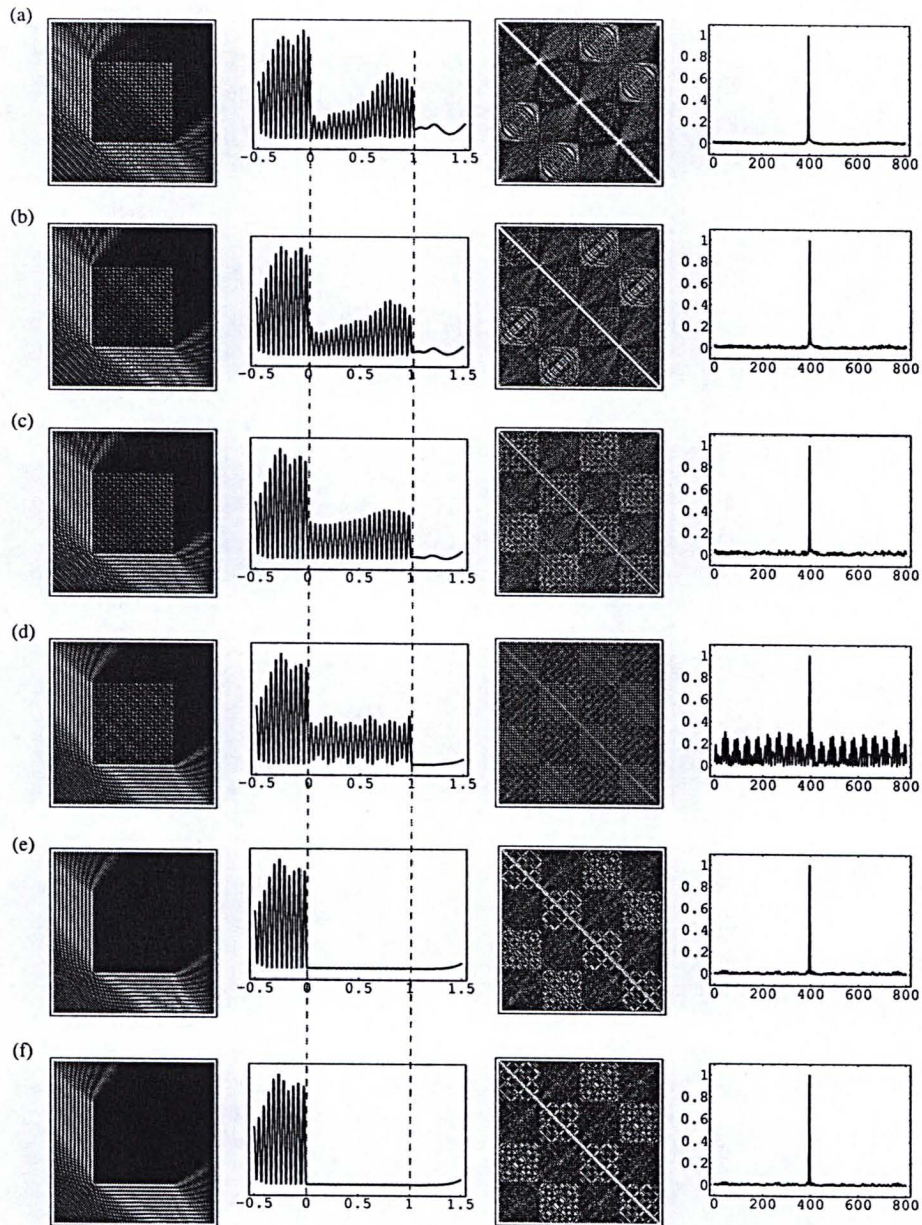


Figura 3.6: Gráficos de  $|\psi(\mathbf{r})|^2$ ,  $|T|^2$  e seus respectivos cortes para transmissão de (a) 70%, (b) 50%, (c) 30%, (d) 10%, (e) 0,01%, (f) 0,000001% (que já apresenta comportamento de uma barreira impenetrável,  $\gamma \rightarrow \infty$ ). Os cortes foram todos feitos em  $y = 0.5$  (meio do bilhar quadrado). A onda incidente tem  $k = 93,16$ , fora de qualquer ressonância do quadrado. A linha pontilhada mostra a borda do bilhar.

# Capítulo 4

## Outras aplicações

Os dois capítulos anteriores foram dedicados exclusivamente ao estudo do método do contorno de paredes em si e de suas características e comportamento de quando aplicado a certos casos. Percebemos, das análises executadas nestes capítulos, que o método tem grande utilidade no estudo do espalhamento, trazendo resultados interessantes principalmente para o caso em que a barreira espalhadora é um bilhar, caso no qual nos ativemos durante todo trabalho.

Uma vez provados os bons resultados que o método fornece para casos mais conhecidos, o próximo passo é sua aplicação em novos problemas.

Veremos, a seguir, duas aplicações a mais do método do contorno de paredes. Primeiro a um caso dos bilhares isoespectrais e depois para o caso de barreira espalhadora desconexa.

### 4.1 Bilhares isoespectrais

A equação de Helmholtz

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(\mathbf{r}) = 0 \tag{4.1}$$

tem uma grande importância em várias áreas da física.

Uma de suas aplicações, como visto nos capítulos anteriores, é na resolução dos problemas de bilhares. Para um bilhar no  $\mathbb{R}^2$ , a solução para as autofunções da parte interna seguem esta equação com condições de contorno de Dirichlet, ou seja, uma partícula fechada dentro de uma barreira intransponível, problema este que se assemelha ao de uma membrana vibrante com as bordas presas.

É sabido que nesse tipo de problema a solução para as autoenergias tem grande dependência na forma da barreira [39]. Neste contexto M. Kac [40] fez a seguinte pergunta em 1966: *Podemos ouvir a forma de um tambor?*. Pode-se interpretar tal indagação como considerando se duas formas distintas podem emitir o mesmo

espectro sonoro, ou, na analogia dos bilhares, se dois bilhares podem ter o mesmo espectro de energia.

No caso dos bilhares, a densidade de níveis de energia tem dependência na área, perímetro e outras características geométricas da barreira [20][39][41][42]. É de se esperar que certos pares de bilhares tenham certas dessas características geométricas iguais. Terão esses pares, então, o mesmo espectro de energias, apesar de possuírem formas diferentes, respondendo negativamente a pergunta de Kac?

Na década de 90 foi provada que a pergunta tem um resposta negativa. A primeira prova veio analiticamente [18] em 1992 pela construção de um contra-exemplo. A partir daí várias provas experimentais [19][39][43] e numéricas [41][44][45] tem sido efetuadas para vários pares de bilhares. Estes contra-exemplos então geram as chamadas famílias de bilhares isoespectrais.

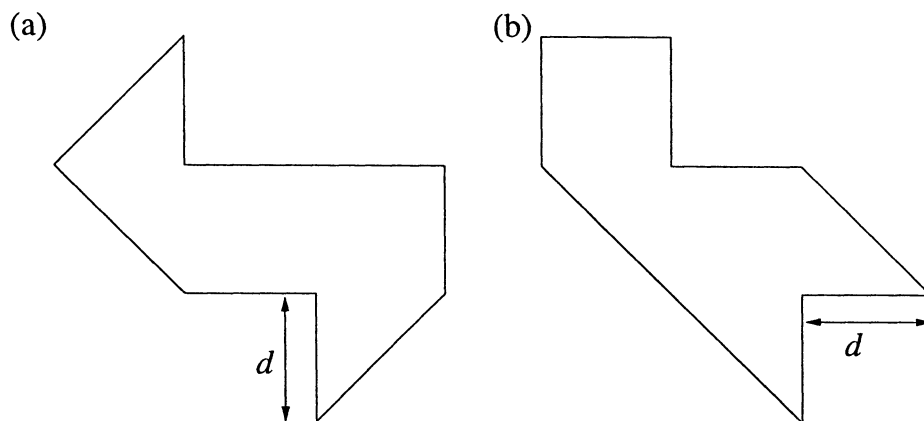


Figura 4.1: Par de bilhares isoespectrais *GW*.

#### 4.1.1 Bilhar isoespectral

Bilhares isoespectrais são classes de sistemas planares confinados e com formas diferentes, mas que possuem espectros de energia idênticos. Vários pares de bilhares isoespectrais têm sido construídos [41][44][45] e resolvidos numérica e analiticamente.

No nosso trabalho, concentramo-nos no par de bilhares mostrados em (4.1). Este par de bilhares é construído a partir de uma junção de 7 triângulos retos de lado  $d$  cada, de modo que eles possuem o mesmo perímetro e área. Vários métodos têm sido usados para obter suas autofunções e autoenergias, como “mode-matching method” [41].

Neste capítulo vamos analisar este par de bilhares a partir da visão do método do contorno de paredes, discutindo o comportamento da matriz  $T$  para os mesmos.



### 4.1.2 Resultados numéricos

Os cálculos numéricos aqui mostrados foram efetuados para bilhares do tipo (4.1) com  $d = 2$  e  $N = 399$ . Referiremo-nos aos bilhares  $GW$  (a) da figura (4.1) como  $A$  e ao (b) como  $B$ .

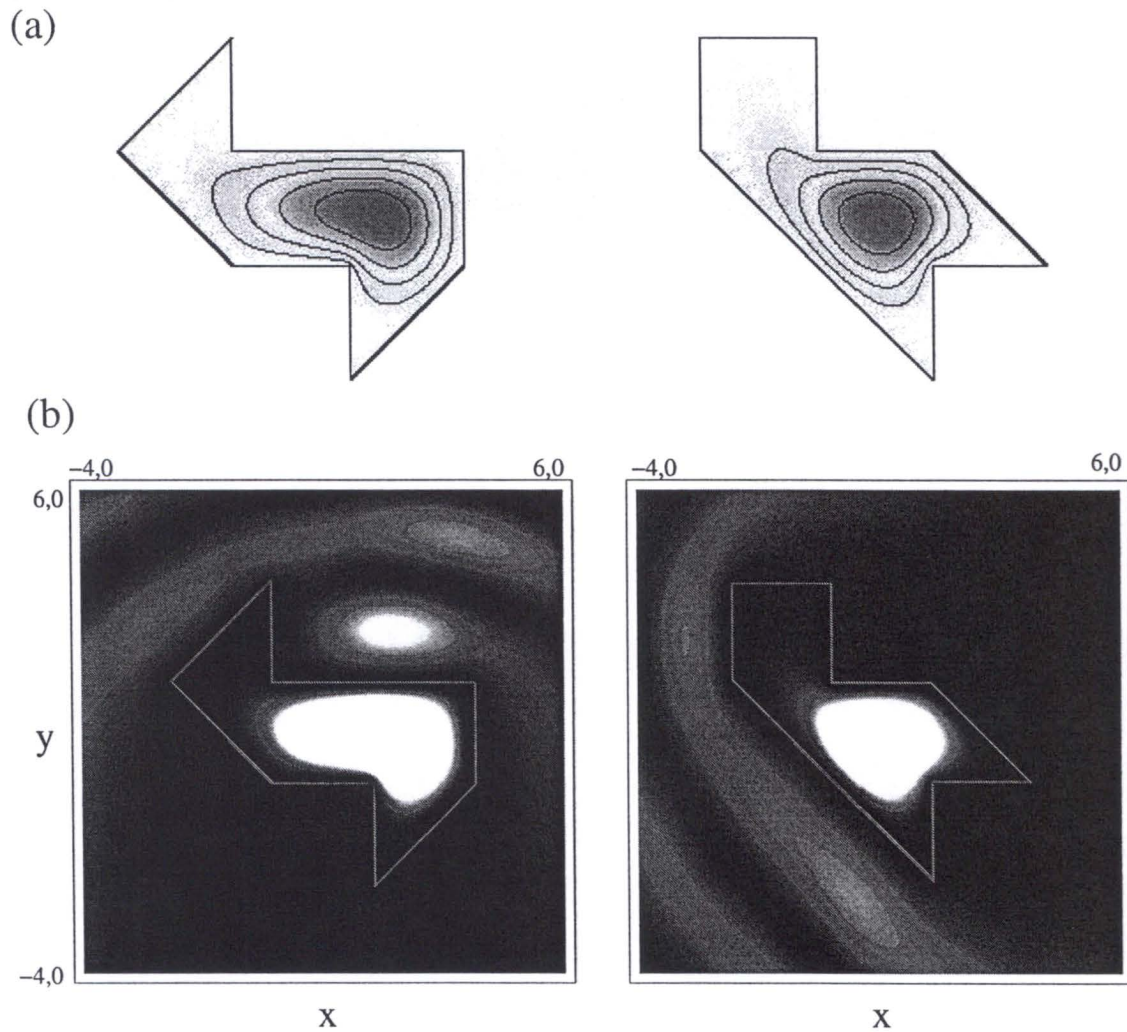


Figura 4.2: Comparação do cálculo de (a) Driscoll [45] com o cálculo (b) pelo método do contorno de paredes para o par de bilhares  $GW$ . Autovalor  $k = 1.593092$ , primeira ressonância.

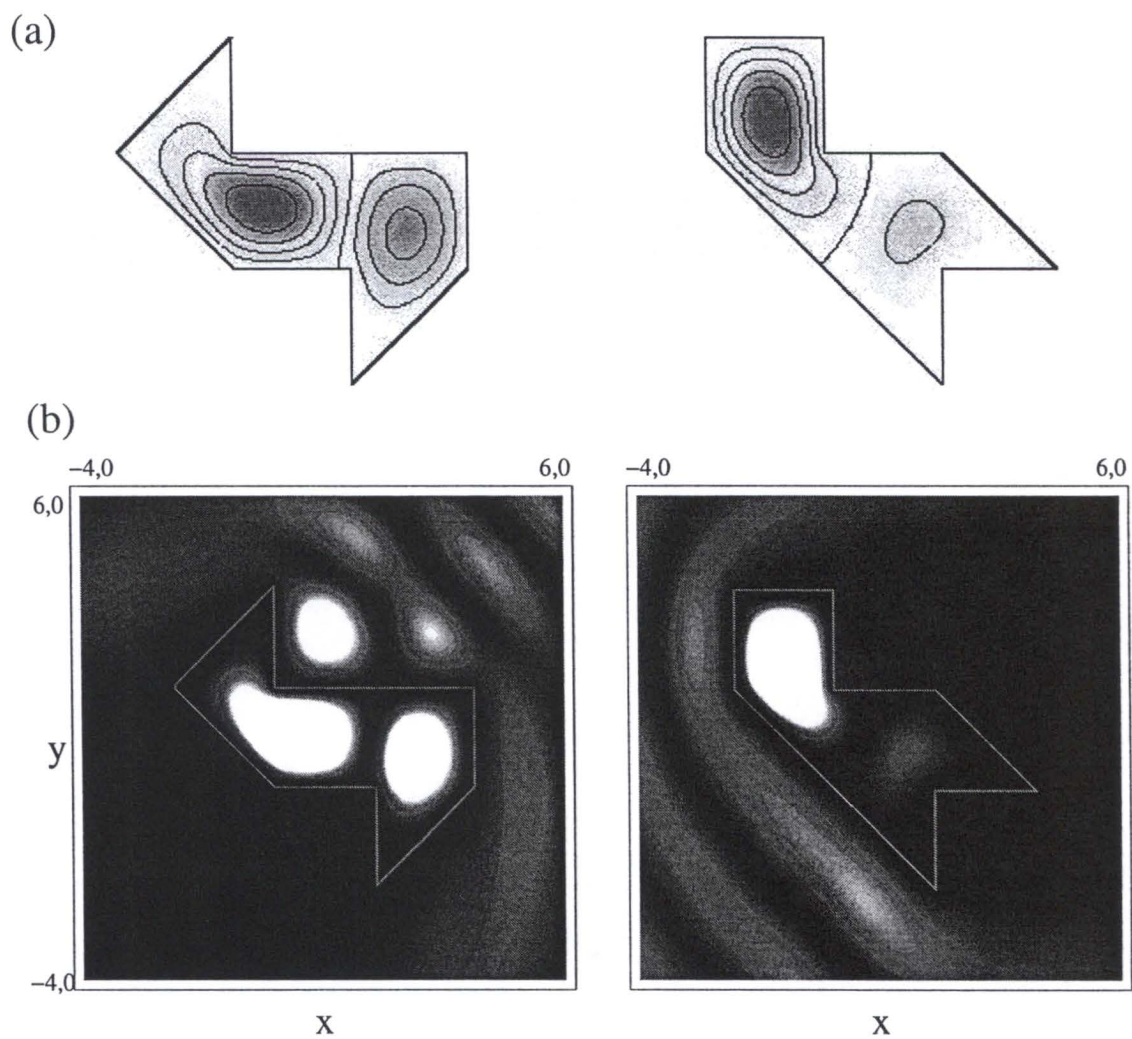


Figura 4.3: Comparação do cálculo de (a) Driscoll [45] com o cálculo (b) pelo método do contorno de paredes para o par de bilhares  $GWW$ . Autovalor  $k = 1.911961$ , segunda ressonância.

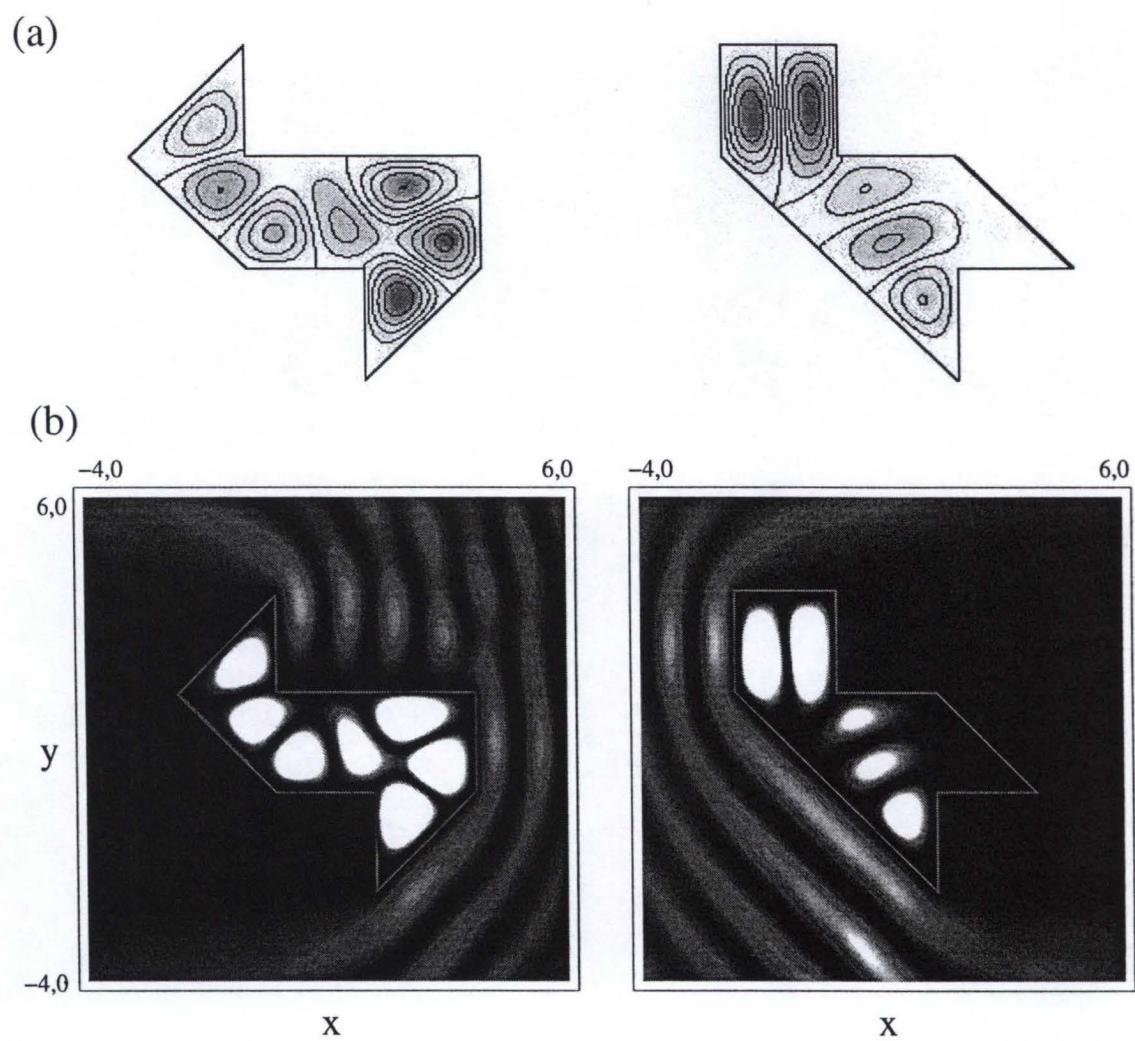


Figura 4.4: Comparação do cálculo de (a) Driscoll [45] com o cálculo (b) pelo método do contorno de paredes para o par de bilhares  $GW$ . Autovalor  $k = 3.397263$ , oitava ressonância.

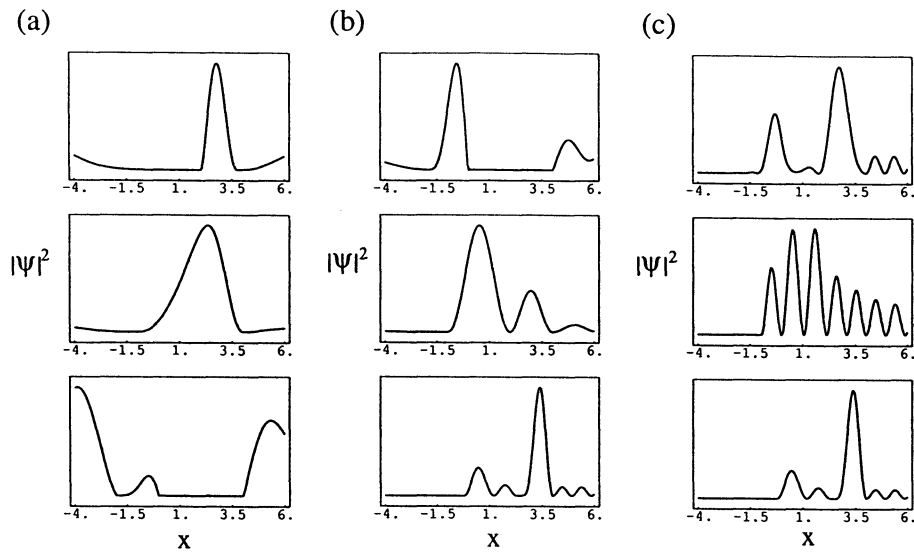


Figura 4.5: Corte em  $\psi(\mathbf{r})$  do bilhar  $A$ , para as 3 ressonâncias mostradas anteriormente. Temos em (a), primeira ressonância, cortes em  $y = 2,01$ ,  $y = 0,00$  e  $y = -0,24$ ; (b), segunda ressonância, cortes em  $y = 2,01$ ,  $y = 0,00$  e  $y = 0,26$ ; e (c), oitava ressonância, cortes em  $y = 1,76$ ,  $y = 0,00$  e  $y = 0,26$ .

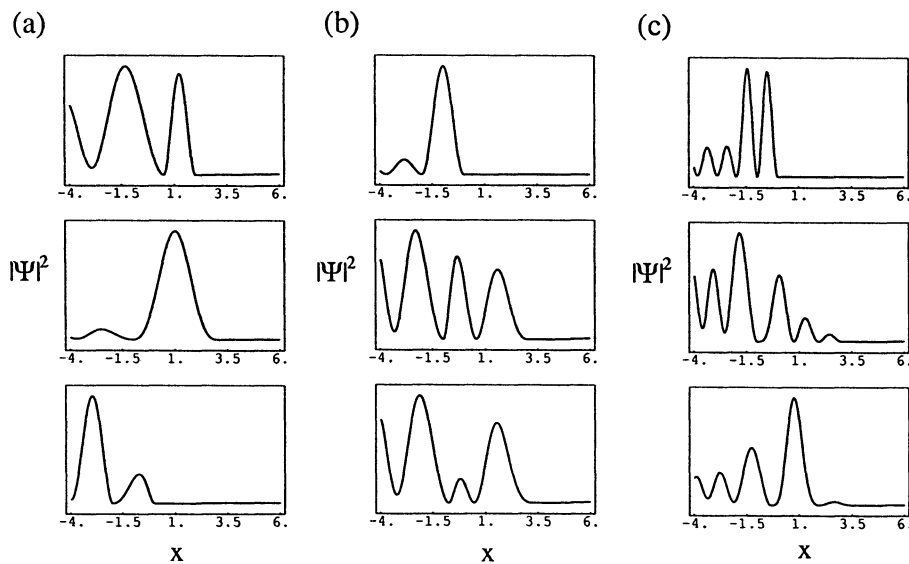


Figura 4.6: Corte em  $\psi(\mathbf{r})$  do bilhar  $B$ , para as 3 ressonâncias mostradas anteriormente. Temos em (a), primeira ressonância, cortes em  $y = 2,26$ ,  $y = 0,00$  e  $y = -0,49$ ; (b), segunda ressonância, cortes em  $y = 3,02$ ,  $y = 0,00$  e  $y = 0,76$ ; e (c), oitava ressonância, cortes em  $y = 2,01$ ,  $y = 0,00$  e  $y = 0,39$ .

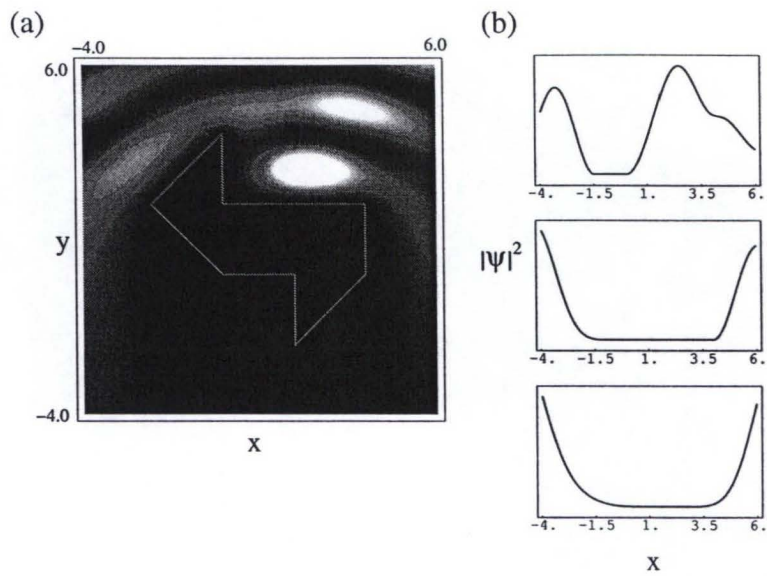


Figura 4.7: (a) Gráfico de  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  de  $A$  fora da ressonância,  $k = 1,75226$  (entre a primeira e segunda ressonância), e (b) cortes em  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  para  $y = 2,51$ ,  $y = 0,00$  e  $y = -0,99$ .

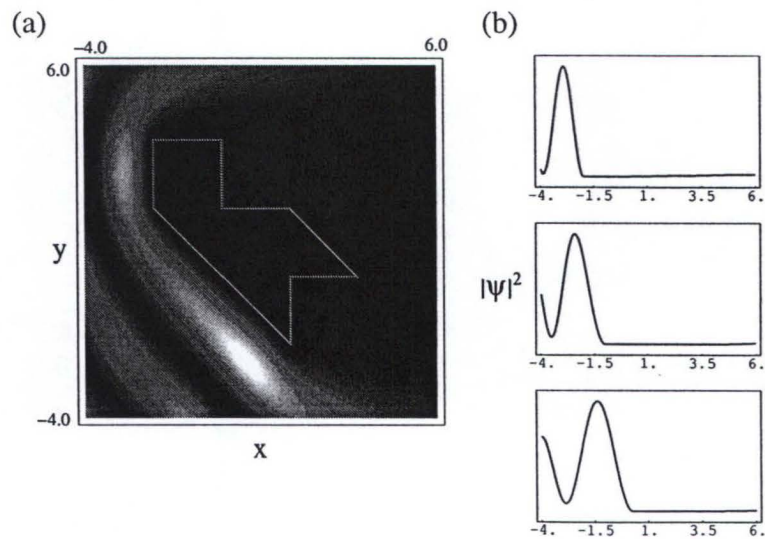


Figura 4.8: (a) Gráfico de  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  de  $B$  fora da ressonância,  $k = 1,75226$  (entre a primeira e segunda ressonância), e (b) cortes em  $\psi$  para  $y = 3,02$ ,  $y = 0,00$  e  $y = -0,24$ .

Nas figuras (4.2), (4.3) e (4.4) é feita uma comparação entre as autofunções do par de bilhares  $GW$  calculadas por Driscoll (através de um método numérico para cálculo de autovalores de polígonos) [45] e pelo método do contorno de paredes, para alguns valores de  $k$ . Podemos ver pelas figuras a concordância entre os resultados. Todas as ressonâncias foram encontradas com diferença de menos de 0,001% na sua localização no espectro. Tal discrepância pode ser diminuída ainda mais se aumentarmos  $N$ , o que, como já vimos, faz com que o resultado numérico aproximado seja mais próximo ainda da forma correta de  $\psi(\mathbf{r})$ .

Em seguida são mostrados cortes em  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  para todos os valores de  $k$  mostrados. Como visto antes, podemos utilizar a diferença entre a função de onda dentro e fora do bilhar para verificar o quão acurados fomos na obtenção do autovalor associado a tal autofunção analisada. Quando maior a diferença, maior o sucesso que tivemos na determinação. Em todos os casos a onda fora do bilhar é muito menor que as autofunções na região interna, isto prova mais uma vez os bons resultados obtidos.

As figuras (4.8) e (4.7) mostram como a autofunção anula-se na região interna quando  $k$  não é um autovalor do bilhar.

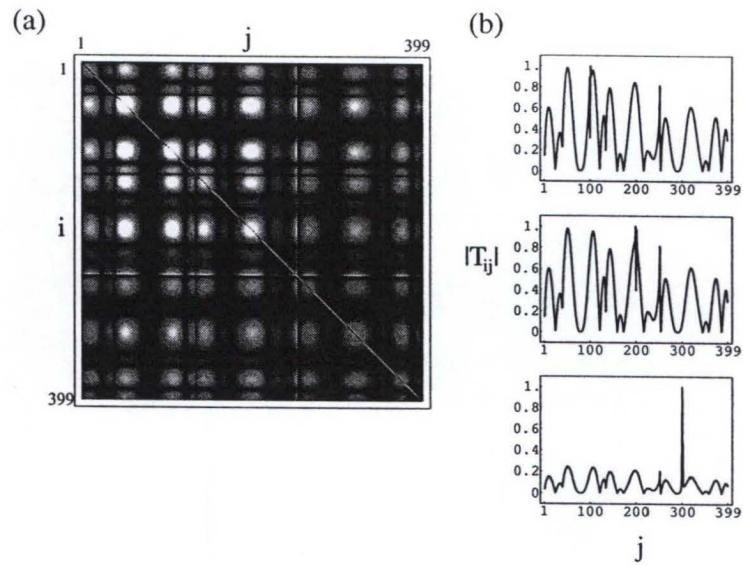


Figura 4.9: (a)  $|T|^2$  na oitava ressonância ( $k = 3.397263$ ) de  $A$  e (b) cortes em  $T_{ij}$  para  $i = 100$ ,  $i = 200$  e  $i = 300$ , respectivamente.

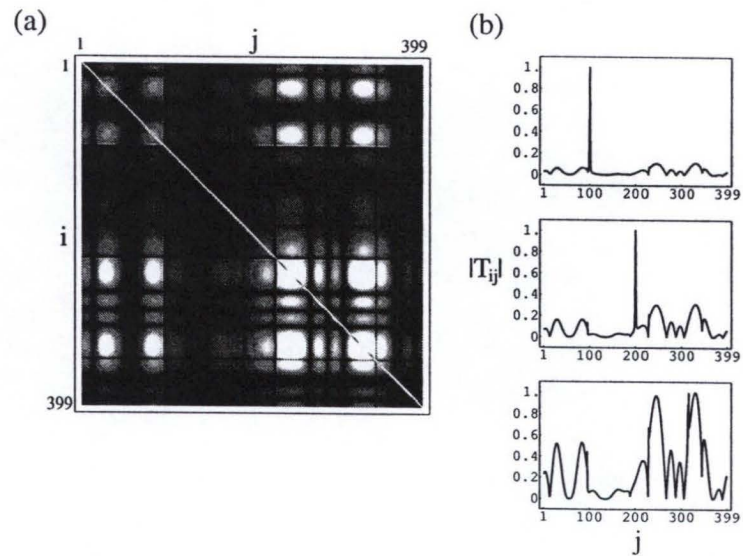


Figura 4.10: (a)  $|T|^2$  na oitava ressonância ( $k = 3.397263$ ) de  $B$  e (b) cortes em  $T_{ij}$  para  $i = 100$ ,  $i = 200$  e  $i = 315$ , respectivamente.

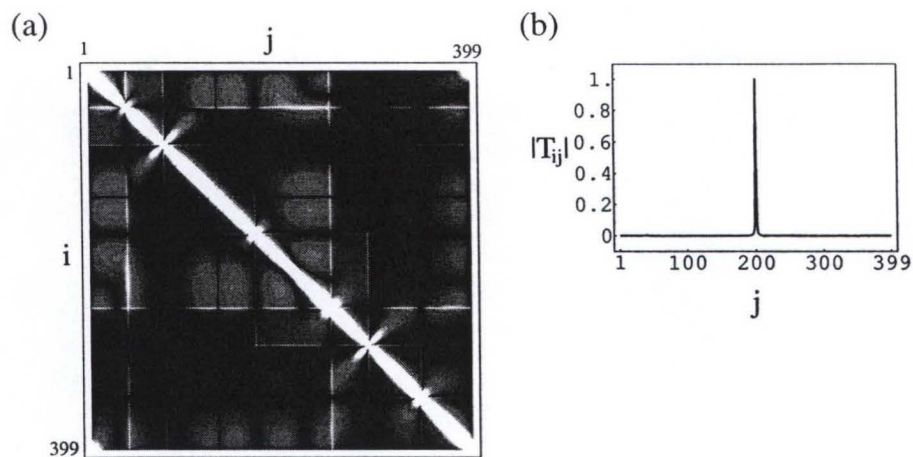


Figura 4.11: (a)  $|T|^2$  de  $A$  fora da ressonância,  $k = 1,75226$  (entre a primeira e segunda ressonância), e (b) corte em  $T_{ij}$  para  $i = 200$ .

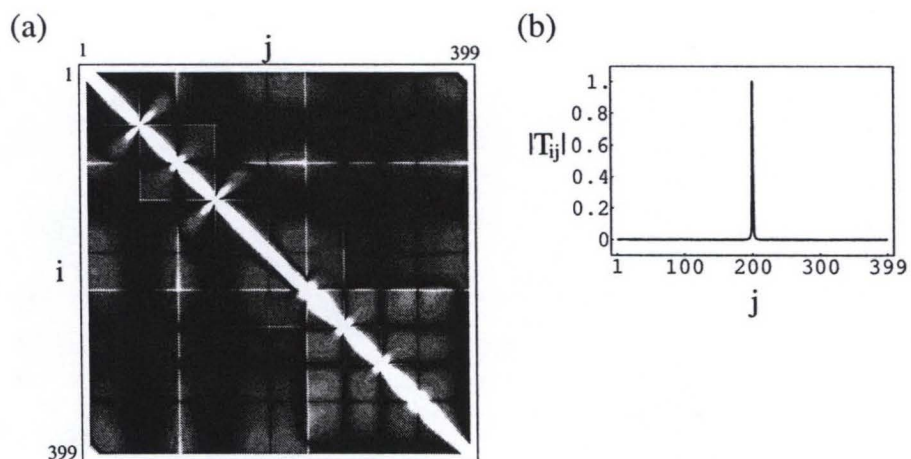


Figura 4.12: (a)  $|T|^2$  de  $B$  fora da ressonância,  $k = 1,75226$  (entre a primeira e segunda ressonância), e (b) corte em  $T_{ij}$  para  $i = 200$ .



Pelas figuras (4.9),(4.10),(4.11) e (4.12) podemos constatar que, no caso dos bilhares isoespectrais, a matriz  $T$  apresenta o mesmo comportamento e características qualitativas vistas anteriormente para as outras classes de bilhares. Portanto, podemos aqui também utilizar a análise da variação de  $|T_{ij}| \times k$  para determinar o espectro de autovalores dos dois bilhares.

A figura (4.13) mostra o gráfico de  $|T_{10,10}| \times k$  para os dois bilhares  $GWW$ , com a curva pontilhada representando a variação do módulo de  $T_{10,10}$  para o bilhar isoespectral  $A$  e a curva cheia correspondendo ao bilhar isoespectral  $B$ . Neste gráfico podemos ver claramente a coincidência das descontinuidades das duas curvas, que indicam os autovalores  $k$  dos dois bilhares. Até o  $k$  mostrado (e para maiores) todas as ressonâncias de um bilhar têm correspondência no seu par, o que é uma boa mostra da coincidência total dos espectros dos dois bilhares [18][20].

A natureza quase-integrável e a geometria (mais notavelmente a presença de pontas) do par de bilhares dificulta sua resolução, tanto analítica quanto numérica, para obtenção do espectro [39]. Este método de determinação dos autovalores dos bilhares pode ser de grande ajuda neste aspecto, visto que a matriz  $T$  é de relativamente fácil obtenção para qualquer bilhar.

Um fato não observado em outros bilhares, que se mostrou no par de bilhares isoespectrais, é que para certas regiões a matriz  $T$  possui elementos de “fora da diagonal” maiores que os da diagonal. Esta é uma característica que merece mais estudo para concluirmos se ela é devida à geometria mais complicada dos bilhares estudados aqui ou se podemos associá-la, de algum modo, a isoespectralidade do par.

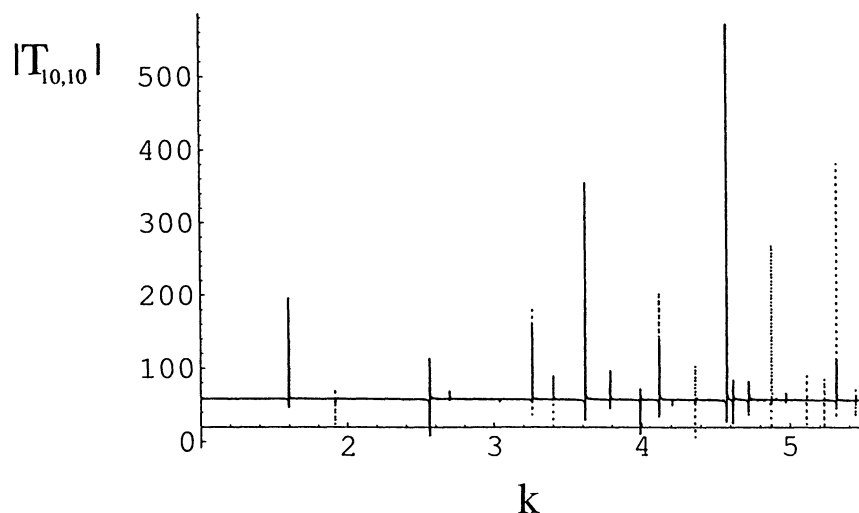


Figura 4.13: Gráfico de  $|T_{10,10}| \times k$  para um bilhar com  $d = 2$ . Com a curva pontilhada referindo-se ao bilhar  $A$  e a cheia ao bilhar  $B$ .

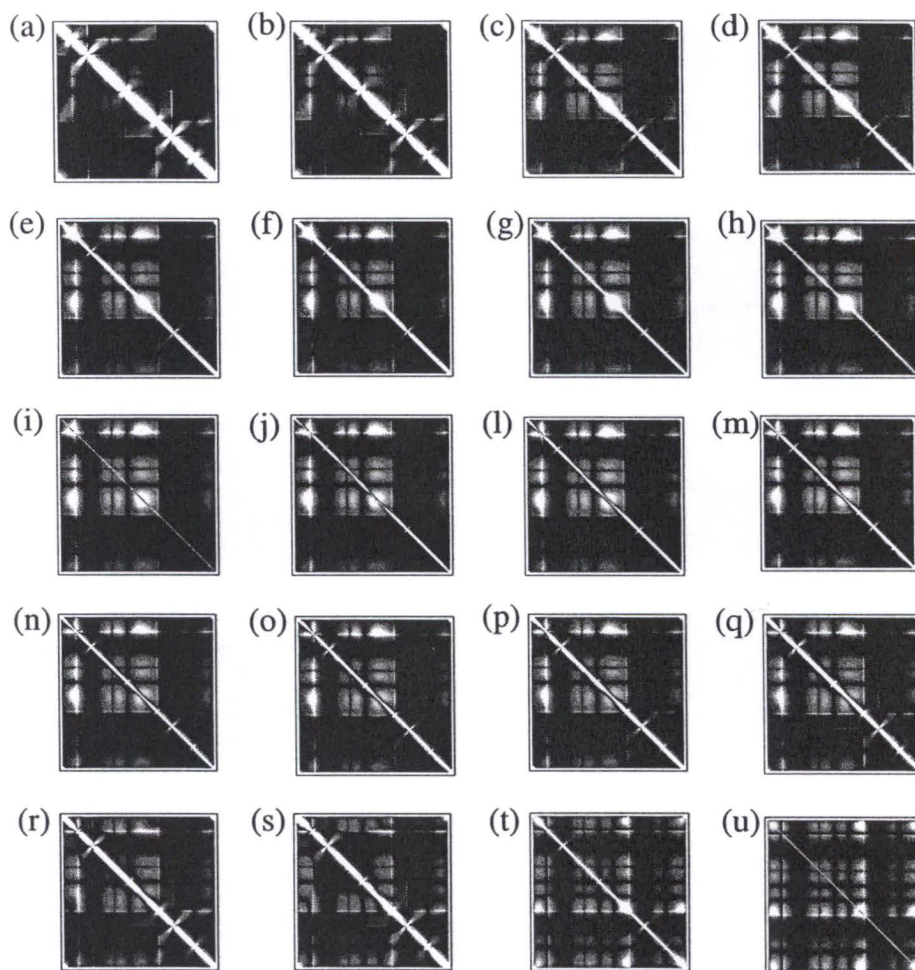


Figura 4.14: Evolução da matriz  $T$  do bilhar isoespectral  $A$  com  $k$  variando de  $+0,005$  (ou  $0,01$ , nos casos mais distantes das ressonâncias) a cada gráfico, passando pela primeira ressonância ( $k = 1,593092$ ) em (i) e chegando na segunda ( $k = 1,911961$ ) em (u).

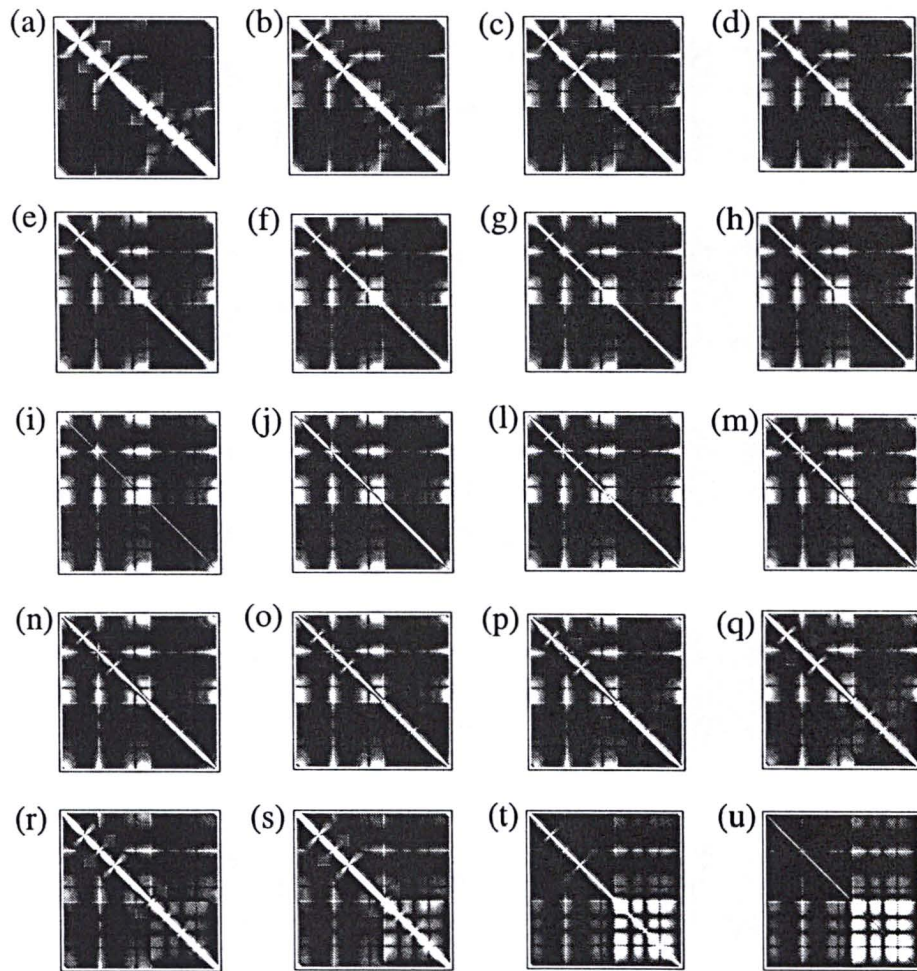


Figura 4.15: Evolução da matriz  $T$  do bilhar isoespectral  $B$  com  $k$  variando de  $+0,005$  (ou  $0,01$ , nos casos mais distantes das ressonâncias) a cada gráfico, passando pela primeira ressonância ( $k = 1,593092$ ) em (i) e chegando na segunda ( $k = 1,911961$ ) em (u).

Nas figuras (4.15) e (4.14) é mostrada a evolução da matriz  $T$  para o bilhar  $A$  e  $B$ , respectivamente. Nestes podemos ver como a matriz comporta-se quando se aproxima (“estreitando” a diagonal) e se afasta (“alargando” novamente a diagonal) de uma ressonância. Podemos ver como vão se formando, a partir da diagonal novas estruturas entre uma ressonância e a seguinte.

## 4.2 Rede de círculos

O estudo de redes é um ramo importante na física. Casos como o de transporte [21], condutância [22], transmissão em meios ou sistemas ordenados e desordenados [23][24][25], etc, podem ser tratados como problemas envolvendo redes. Em várias situações (como nas citados acima) o problema físico pode ser modelado como a solução de espalhamento de uma onda por uma série de obstáculos.

Do modo como foi formulado, o método do contorno de paredes torna-se muito versátil no tocante à forma da curva espalhadora, podendo ela, inclusive, ser desconexa (divida em várias partes) [14]. Deste modo a curva  $\mathcal{C}$  pode ser formada por vários espalhadores, podendo assim formar uma rede. Desse modo, podemos aplicar o método ao estudo de redes de espalhadores. Em termos numéricos, precisamos calcular uma única matriz  $T$ , que obviamente engloba todos os espalhadores do sistema.

Estudaremos aqui o caso de uma rede ordenada formada por círculos igualmente espaçados uns dos outros. Aqui estamos interessados no estudo da solução de espalhamento dessa onda para redes formadas de círculos rígidos e também para o caso de espalhadores permeáveis. A permeabilidade dos espalhadores será tratada aqui da mesma forma utilizada para o estudo das barreiras conexas permeáveis, vistas no capítulo anterior. Destas soluções podemos estudar, por exemplo, como a onda é transmitida através da rede.

Serão mostradas aqui figuras de redes onde foram utilizados um valor de  $\gamma$  igual para todas os círculos. Porém, como sabemos da formulação do método, o parâmetro que controla a permeabilidade da parede de bilhar pode apresentar uma dependência da posição  $s$  sobre a barreira espalhadora. Sendo assim, podemos mudar nossos cálculos de modo que tenhamos permeabilidades diferentes para cada espalhador da rede. Isto pode ser útil no estudo de redes formadas por diferentes átomos, ou espalhadores de diferentes materiais, simulando diferentes índices de refração.

### 4.2.1 Resultados numéricos

As redes aqui mostradas são formadas por 16 círculos ( $4 \times 4$ ), com raio  $r = 0,0165$  com distância de 1,667 entre seus centros.

Na primeira coluna da figura (4.16)  $\lambda$  é aproximadamente 4 vezes menor que a

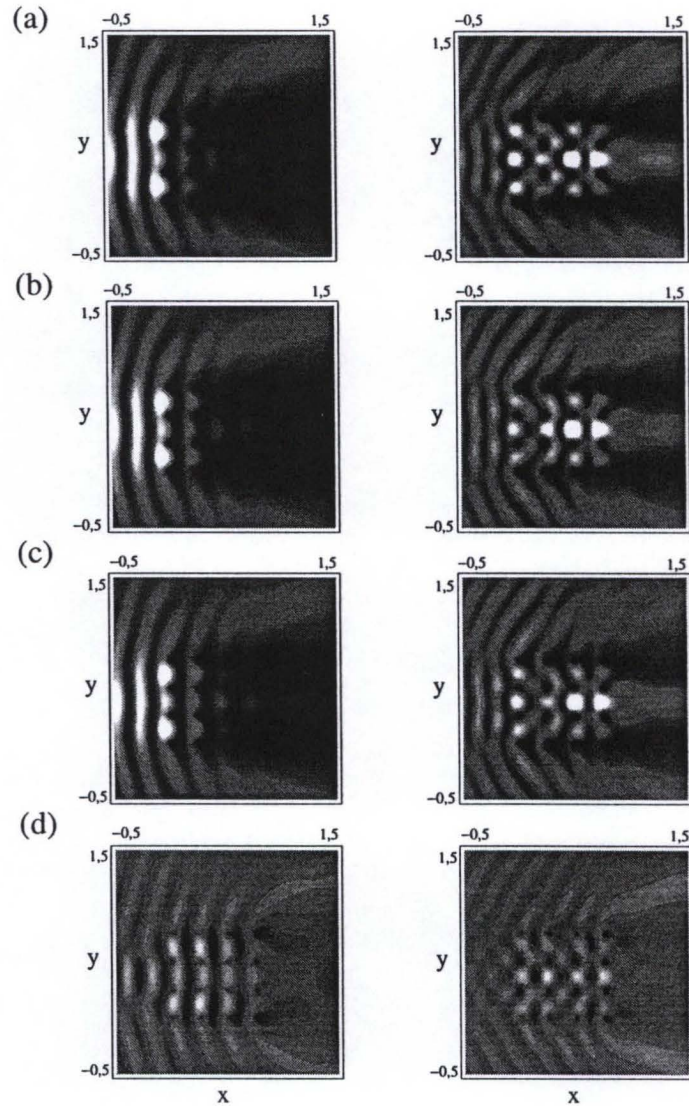


Figura 4.16: Gráfico  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  no espalhamento por uma rede de círculos ordenados. Nos gráficos temos a transmissão dos círculos variando. Em (a)  $\mathcal{T} = 0.00001\%$ , (b)  $\mathcal{T} = 10\%$ , (c)  $\mathcal{T} = 50\%$  e (d)  $\mathcal{T} = 90\%$ , com  $k = 15$  (primeira coluna) e  $k = 20$  (coluna segunda).

separação entre os círculos (medindo a partir de suas bordas mais próximas) e na segunda coluna  $\lambda$  é aproximadamente 5 vezes menor. Como era de se esperar, quanto maior o número de onda  $k$  (menor o comprimento de onda  $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ ) em comparação com a separação dos espalhadores, mais a onda é transmitida por entre os elementos da rede. Da mesma figura, no gráfico (d), pode-se perceber que apesar de a transmissão na rede ser maior, a permeabilidade dos espalhadores diminui com o aumento do número de onda  $k$ , visto a dependência linear de  $\gamma$  com  $k$  ( $\gamma = 2k\sqrt{\frac{1}{T} - 1}$ ).

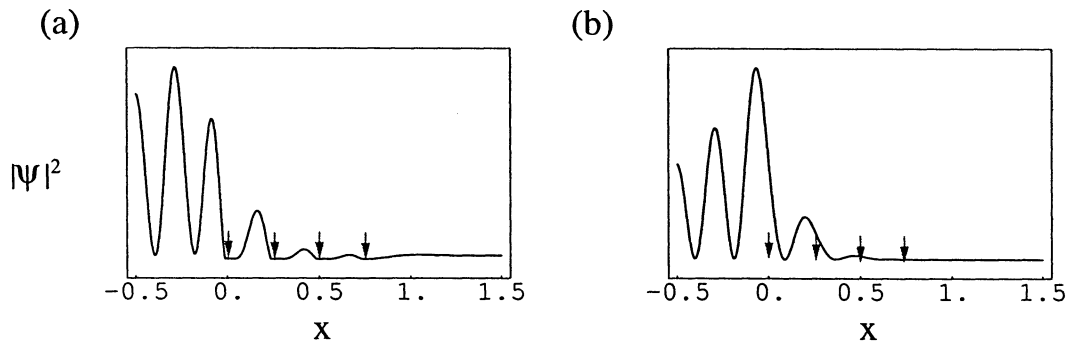


Figura 4.17: Cortes em  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  no espalhamento por uma rede de círculos impenetráveis ordenados para  $k = 15$ . Em (a)  $y = 0,0$  (o corte passa pelo meio da primeira linha de círculos), (b)  $y = 0,125$  (o corte passa entre a primeira e a segunda linha de círculos). As flexas indicam o centro de cada círculo.

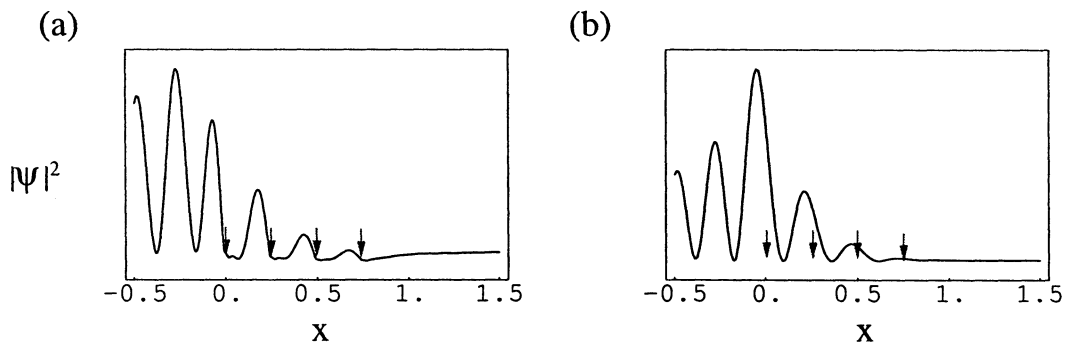


Figura 4.18: Cortes em  $|\psi(\mathbf{r})|^2$  no espalhamento por uma rede de círculos ordenados com  $T = 50\%$  e  $k = 15$ . Em (a)  $y = 0,0$  (o corte passa pelo meio da primeira linha de círculos), (b)  $y = 0,125$  (o corte passa entre a primeira e a segunda linha de círculos). As flexas indicam o centro de cada círculo.

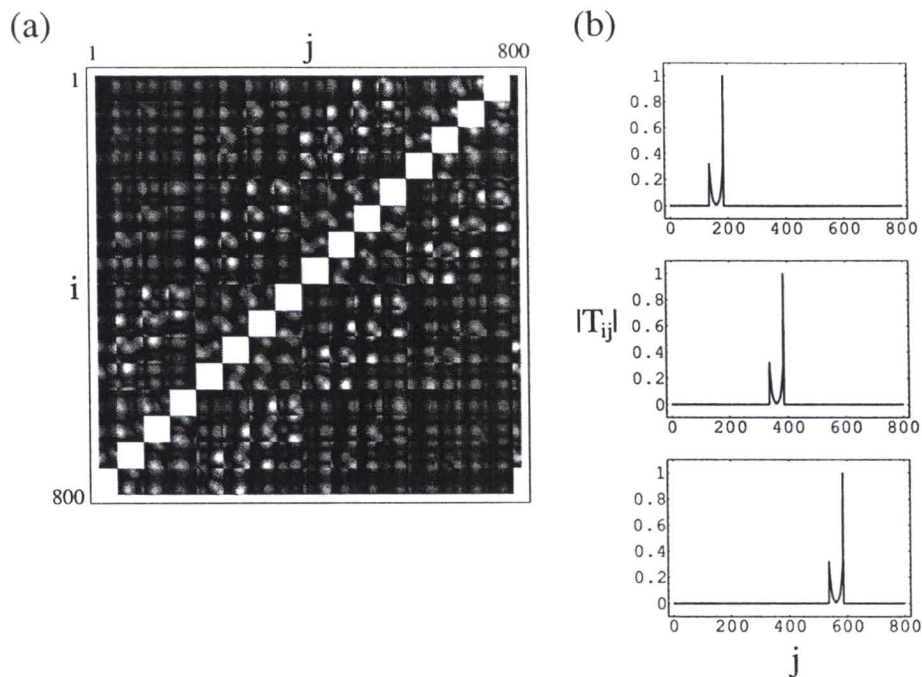


Figura 4.19: (a) Gráfico de  $|T|^2$  no espalhamento por uma rede de círculos impenetráveis ordenados e (b) cortes em  $i = 200$ ,  $i = 400$  e  $i = 600$  com  $k = 20$ .

Pelas figuras (4.17) e (4.18) podemos perceber como a função de onda  $\psi(\mathbf{r})$  realmente se anula no interior de cada círculo da rede quando os obstáculos são rígidos ( $\gamma \rightarrow \infty$ ) e como  $\psi(\mathbf{r})$  é diferente de zero no interior dos círculos quando os obstáculos são permeáveis. A partir de análises mais detalhadas de gráficos desse tipo, podemos ter resultados interessantes para o exame de como se dá a transmissão da função de onda através da rede.

O gráfico da matriz  $T$  é mostrado apenas por motivo ilustrativo, ver figura (4.19). Podemos perceber que, devido ao grande número de divisões na barreira (lembrando que todos os espalhadores são considerados como um único obstáculo no método), a matriz torna-se bastante complexa, sendo que cada subdivisão (cada um dos pequenos quadrados) que observamos na matriz refere-se a interação da parte espalhada por um círculo com os círculos componentes da rede, na diagonal a interação se dá entre os pontos de um mesmo círculo.



# Capítulo 5

## Sumário e conclusões

O intuito principal do trabalho desenvolvido foi a aplicação do método do contorno de paredes ao problema de bilhares quânticos no plano. Através da análise analítica e numérica mostramos as sutilezas do método bem como sua aplicabilidade.

No início do segundo capítulo foi mostrado o desenvolvimento teórico do método, chegando às equações básicas do problema para o espalhamento de uma onda por um bilhar com forma geral e permeabilidade variável sobre todo o contorno. Em seguida particularizamos o resultado para o caso de bilhares impenetráveis. A partir desses resultados, pudemos verificar analiticamente certas propriedades importantes do problema de bilhares quânticos através dessa nova abordagem, tais como a transparência e a dualidade dentro/fora. Uma das vantagens do método é que estes pontos foram discutidos de forma matematicamente correta, que, porém, usa uma argumentação muito mais física do que as abordagens extremamente formais presentes na literatura.

A princípio a formulação desenvolvida para a prova do mecanismo de filtro, do princípio da transparência e da dualidade dentro/fora foi dirigida aos bilhares convexos, para os quais a aplicação teve ótimos resultados. Porém, através dos exemplos numéricos, pudemos ver que o mecanismo de filtro da matriz  $T$  também se aplica aos bilhares côncavos.

O ponto chave no método é o cálculo da matriz  $T$ , que só depende da energia e da forma do bilhar. Os pontos mais importantes de sua análise são: sua propriedade de filtro para o problema das autofunções do problema interno e a obtenção do espectro de autovalores dos bilhares através da análise da variação de um dos elementos de  $T$  conforme o número de onda  $k$  varia. Como a matriz  $T$  é de fácil cálculo numérico, este se apresenta como uma alternativa poderosa para a determinação do espectro de autovalores de bilhares de difícil solução analítica e/ou numérica.

No segundo capítulo nos ativemos somente ao caso de bilhares com paredes impenetráveis. Este caso é uma particularização do método para quando fazemos a

permeabilidade tender a zero. Bilhares com paredes permeáveis, que nos remetem a forma mais geral do método, foram estudados no terceiro capítulo mostrando a versatilidade em nosso tratamento de bilhares.

Os segundo e terceiro capítulos tiveram como finalidade a exploração da aplicabilidade do método do contorno de paredes mostrando como ele se mostra funcional para uma vasta gama de formas de barreiras e tipos de paredes.

No penúltimo capítulo foram estudados o caso dos bilhares isoespectrais e o caso de uma rede de espalhadores. A análise dos bilhares isoespectrais reproduziu resultados encontrados na literatura, mas também mostrou-se promissor no possível entendimento físico do porque da ocorrência deste fenômeno tão curioso. Eventualmente o estudo do rearranjo dos elementos da matriz  $T$  para pares de bilhares isoespectrais possa fornecer alguma pista nesse sentido. O caso da rede de círculos foi o único caso estudado em que estávamos interessados unicamente na solução externa (de espalhamento). Neste caso obtivemos resultados para uma rede de círculos impenetráveis e para uma rede de círculos permeáveis.

Finalmente, é importante mencionar que o método aqui desenvolvido e discutido abre um vasto campo para aplicações. Podemos exemplificar, citando:

- aplicar a permeabilidade a outras formas de bilhares, tal como o Stadium e o Sinai de Bunimovich;
- estudar bilhares com a permeabilidade variável sobre seu contorno visando sua aplicação aos “soft wall billiards”;
- estudar redes com permeabilidade diferente para cada espalhador para aplicação ao estudo do problema da transmissão em redes formadas por espalhadores com índices de refração diferentes;
- estender a aplicação já feita aos bilhares isoespectrais, fazendo uma análise mais detalhada da matriz  $T$ , a fim de estudar o rearranjo de seus elementos tentando ter mais algum indício de como se dá a isoespectralidade nestes bilhares;
- tentar usar métodos numéricos diferentes para resolver a equação integral e assim tentar calcular níveis de energia mais altos;
- aplicação do método a um estudo mais detalhado das características de caos quântico presente nos bilhares, como análise de níveis de energia, influência da geometria, etc.

## Referências Bibliográficas

- [1] Y.-H. Kim, M. Barth, H.-J. Stöckmann, and J. P. Bird, “Wave function scarring in open quantum dots: A microwave-billiard analog study,” *Physical Review B*, vol. 65, p. 195301, 2001.
- [2] G. C. des Francs, C. Girard, C. J.-C. Weeber, T. David, A. Dereux, and D. Peyrade, “Optical analogy to electronic quantum corrals,” *Physical Review Letters*, vol. 86, p. 4950, 2000.
- [3] C. Chicanne, T. David, R. Quidant, J. C. Weeber, Y. Lacroute, E. Bourillot, and A. Dereux, “Imaging the local density of states of optical corrals,” *Physical Review Letters*, vol. 88, p. 09740, 2002.
- [4] M. V. Berry, “Evanescent and real waves in quantum billiards and gaussian beams,” *Journal of physics A*, vol. 27, no. 11, p. L391, 1994.
- [5] I. Kosztin and K. Schulten, “Boundary wall method for stationary states of two-dimensional quantum systems,” *Journal of modern physics*, vol. C8, p. 293, 1997.
- [6] R. Goloskie, T. Thio, and L. R. Ram-Mohan, “Boundary elements and surface plasmons,” *Computers in physics*, vol. 10, p. 477, 1996.
- [7] F. Hartmann, *Introduction to boundary elements: Theory and applications*. Springer, 1997.
- [8] G. S. Gipson, *Boundary Element Fundamentals*. Computational mechanics, 1987.
- [9] E. Heller, *Chaos and Quantum Physics*. eds. M.J. Giannoni, A. Voros, and J. Zinn-Justin (Elsevier Science Publishers), 1990.
- [10] B. Li, M. Robnik, and B. Hu, “Relevance of chaos in numerical solutions of quantum billiards,” *Physical Review E*, vol. 57, p. 4095, 1998.

- [11] S. Tasaki, T. Harayama, and A. Shudo, “Interior dirichlet eigenvalue problem, exterior neumann scattering problem, and boundary element method for quantum billiards,” *Physical Review E*, vol. 56, p. R13, 1997.
- [12] G. Hackenbroich, E. Narimanov, and A. D. Stone, “Quantum perturbation theory for the level splitting in billiards,” *Physical Review E*, vol. 57, p. R5, 1998.
- [13] E. Vergini and M. Saraceno, “Calculation by scaling of highly excited states of billiards,” *Physical Review E*, vol. 52, p. 2204, 1998.
- [14] M. G. E. da Luz, A. S. Lupu-Sax, and E. J. Heller, “Quantum scattering from arbitrary boundaries,” *Physical Review E*, vol. 56, no. 3, p. 2496, 1997.
- [15] J. P. Eckmann and C. A. Pillet, “Spectral duality for billiards,” *Communication in mathematical physics*, vol. 170, p. 283, 1995.
- [16] B. Dietz, J. P. Eckmann, C. A. Pillet, U. Smilansky, and I. Ussishkin, “Inside-outside duality for planar billiards: A numerical study,” *Physical Review E*, vol. 46, no. 11, p. 4222, 1995.
- [17] B. Dietz and U. Smilansky, “A scattering approach to the quantization of billiards - the inside-outside duality,” *CHAOS*, vol. 3, no. 4, p. 581, 1993.
- [18] C. Gordon, D. L. Webb, and S. Wolpert, “One cannot hear the shape of a drum,” *Bulletin of the American Mathematical society*, vol. 27, no. 1, p. 134, 1992.
- [19] A. Dhar, D. Rao, U. Shankar, and S. Sridhar, “Isospectrality in chaotic billiards,” *Physical Review E*, vol. 68, no. 1, pp. 026208–1, 2003.
- [20] H. J. Stöckmann, *Quantum Chaos: An introduction*. Cambridge University Press, 1999.
- [21] A. Kusy, A. W. Stadler, G. Haldas, and R. Sikora, “Quantum percolation in electronic transport of metal-insulator system: numerical studies of conductance,” *Physica A*, vol. 241, p. 403, 1997.
- [22] P. Markos, “Probability distribution of the conductance at the mobility edge,” *Physical review letters*, vol. 83, no. 3, p. 588, 1999.
- [23] S. Pilgram, W. Belzig, and C. Bruder, “The density of states of a proximity system,” *Physica C*, vol. 352, p. 37, 2001.
- [24] H. Yamada and M. Goda, “Statistical properties of phonon transmission in one-dimensional disordered systems with long-range correlation,” *Physica B*, vol. 219 and 220, p. 364, 1996.

- [25] X. Chen, “Delocalized states in the continuous disordered superlattices,” *Physics letters A*, vol. 257, p. 317, 1999.
- [26] B. Li and M. Robnik, “Boundary integral method in chaotic quantum billiards,” *eprint-arXiv/Submitted to J. Phys. A; Math. Gen*, 1995.
- [27] E. Butkov, *Física matemática*. Editora Guanabara Koogan S.A., 1988.
- [28] G. Arfken, *Mathematical methods for physicists*. Academic, 1970.
- [29] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik, *Table of integral, Series and products*. Ed. Alan Jeffrey, 1994.
- [30] E. Doron and U. Smilansky, “Semiclassical quantization of chaotic billiards: a scattering theory approach,” *Nonlinearity*, vol. 5, p. 1055, 1992.
- [31] M. C. Guzwiller, *Chaos in classical and quantum mechanics*. Springer-Verlag, 1991.
- [32] P. Seba and K. Zyczkowski, “Wave chaos in quantized classically nonchaotic systems,” *Physical Review A*, vol. 44, p. 3457, 1991.
- [33] J. S. E. Ortiz and A. M. O. de Almeida, “Bogolomy section for the stadium: I. quantum theory,” *Journal of Physics A*, vol. 30, p. 7301, 1997.
- [34] P. Seba and K. Zyczkowski, “Wave chaos in quantized classically nonchaotic systems,” *Physical review A*, vol. 44, p. 3457, 1991.
- [35] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë, *Quantum Mechanics*, vol. 2. John Wiley and Sons, 1977.
- [36] J. U. Nöckel and A. D. Stone, “Ray and wave chaos in assymetic resonant optical cavities,” *Nature*, vol. 385, p. 45, 1997.
- [37] A. Kaplan, N. Friedman, M. Andersen, and N. Davidson, “Observation of islands of stability in soft wall atom-optics billiards,” *Physical review letters*, vol. 87, pp. 274101–1, 2001.
- [38] J. S. E. Ortiz and A. M. O. de Almeida, “Quantum section method for the soft stadium,” *Physica D*, vol. 145, p. 293, 2000.
- [39] S. Sridhar and A. Kudrolli, “Experiment on not ‘hearing the shape’ of drums,” *Physical Review Letters*, vol. 72, p. 2175, 1994.
- [40] M. Kac, “Can one hear the shape of the drum?,” *American Mathematics Monthly*, vol. 73, p. 1, 1966.

- [41] H. Wu, W. L. Sprung, and J. Martorell, "Numerical investigation of isospectral cavities built from triangles," *Physical Review E*, vol. 51, no. 1, p. 703, 1995.
- [42] E. Ott, *Chaos in dynamical systems*. Cambridge University Press, 1993.
- [43] H. J. Stöckmann and J. Stein, "Quantum chaos in billiards studied by microwave absorption," *Physical Review Letters*, vol. 64, p. 2215, 1990.
- [44] T. A. Driscoll and P. W. Gottlieb, "Isospectral shapes with neumann and alternating boundary conditions," *Physical Review E*, vol. 68, no. 1, pp. 016702–1, 2003.
- [45] T. A. Driscoll, "Eigenmodes of isospectral drums," *Society for industrial and applied mathematics*, vol. 39, no. 1, p. 1, 1997.