

JIUSANDRO KÜHN

**ESTUDO DA DINÂMICA DE PACOTES DE ONDA EM
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 Ciências.

Orientador: Prof. Dr. Marcos Gomes Eleutério da Luz

CURITIBA

2004

DEFESA DE DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

JUSANDRO KUHN

TITULO: "ESTUDO DA DINÂMICA DE PACOTES DE ONDA EM BILHARES QUÂNTICOS".

Em sessão pública iniciada às quatorze horas, nesta data, após um Seminário sob o título acima, e posterior arguição por esta banca examinadora, esta decidiu atribuir ao candidato o conceito global A

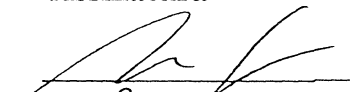

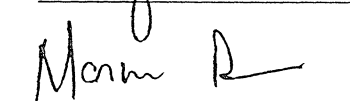
Banca Examinadora

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

Prof. LUIS GUILHERME DE CARVALHO REGO
(UFSC)

Prof. MARCUS WERNER BEIMS
(UFPR)

Assinatura

Conceito

A
A
A



Curitiba, 26 de fevereiro de 2004.

RESUMO

Neste trabalho apresentamos um estudo numérico das propriedades de reconstrução e aprisionamento de pacotes de onda *Gaussianos* em duas classes de sistemas do tipo bilhares (isto é, sistemas confinados por potenciais constituídos de paredes infinitas). Investigamos alguns sistemas unidimensionais, cuja energia depende de um único número quântico, e dois sistemas bidimensionais onde a energia é rotulada por dois números quânticos. Os sistemas unidimensionais aqui tratados foram: Poço quadrado, poço degrau, poço degrau assimétrico e poço delta. Os sistemas bidimensionais foram: bilhar retangular (quadrado) e bilhar degrau com potencial linear. Propomos também um método simples de classificação das escalas de tempo de reconstrução do pacote, que consiste na modificação do centro (x_0) do pacote de onda no interior do poço, bem como uma generalização do tratamento dado ao poço delta, permitindo estudar, por exemplo, as propriedades de aprisionamento do pacote.

ABSTRACT

In this work we present a numerical study of the revival and trapping of *Gaussian* wave packets for two classes of billiard types systems (by a billiard we mean that a quantum particle is spatially confined by infinite wall potentials). We first investigate some one-dimensional systems, whose energies depend only on a single quantum number. Then we analyze two-dimensional cases, where the energy is labeled by two quantum numbers. The one-dimensional examples treated here are: square well potential, step well potential, asymmetric step well potential and delta potential. The two-dimensional examples are: rectangular and square billiards and a step billiards with a linear potential. We consider a simple method to classify the time scales for which the revival phenomenon takes place. We also generalize the usual approach used to the delta well. This new approach allows us to study different aspects of localization of wave packets.

AGRADECIMENTOS

Faço aqui um agradecimento a todos aqueles que colaboraram para que essa dissertação pudesse ser elaborada:

Aos colegas da Pós-Graduação
Ao Grupo de Física Atômica e Molecular
Aos meus professores
Prof. Dr. Carlos de Carvalho (Suporte computacional)
CNPq (Financiamento da Pesquisa)
Guilherme Jurkevics Delben (Iniciação Científica)
Jane Rosa (Pelas discussões teóricas)
Marcos Cesar Santos (Ajuda Computacional)

A banca de qualificação:
Prof. Dr. Alexandre G. M. Schmidt
Prof. Dr. Márcio H. F. Bettega

A banca de defesa:
Prof. Dr. Marcus Werner Beims
Prof. Dr. Luiz Guilherme de Carvalho Rego

Ao meu orientador:
Prof. Dr. Marcos Gomes Eleutério da Luz

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO	7
2	DESENVOLVIMENTOS TEÓRICOS	14
2.1	EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER	14
2.2	PACOTE DE ONDA	15
2.2.1	OS COEFICIENTES u_j	16
2.3	SOLUÇÃO DO PROBLEMA INDEPENDENTE DO TEMPO	18
2.4	A FUNÇÃO DE AUTOCORRELAÇÃO	19
2.5	RECONSTRUÇÃO DO PACOTE DE ONDA	20
2.5.1	SISTEMAS UNIDIMENSIONAIS	20
2.5.2	SISTEMAS BIDIMENSIONAIS	22
3	POÇOS UNIDIMENSIONAIS	23
3.1	POÇO QUADRADO INFINITO	23
3.1.1	AUTOVALORES E AUTOFUNÇÕES	24
3.1.2	PACOTE DE ONDA	24
3.1.3	OS TEMPOS DE RECONSTRUÇÃO	25
3.1.4	RESULTADOS	26
3.2	POÇO DEGRAU INFINITO	33
3.2.1	AUTOVALORES E AUTOFUNÇÕES	33
3.2.2	PACOTE DE ONDA	35
3.2.3	RESULTADOS	36
3.3	POÇO DELTA INFINITO	44
3.3.1	AUTOVALORES E AUTOFUNÇÕES	44
3.3.2	PACOTE DE ONDA	45
3.3.3	RESULTADOS	46
3.4	POÇO DEGRAU ASSIMÉTRICO INFINITO	55
3.4.1	SOLUÇÃO EXATA	55

3.4.2	SOLUÇÃO NUMÉRICA	57
3.4.3	COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS	59
4	POÇOS BIDIMENSIONAIS	61
4.1	BILHAR RETANGULAR	61
4.1.1	OPERADOR DE ENERGIA	62
4.1.2	AUTOVALORES E AUTOFUNÇÕES	62
4.1.3	PACOTE DE ONDA	63
4.1.4	OS TEMPOS DE RECONSTRUÇÃO	63
4.1.5	RESULTADOS	64
4.2	POÇO DEGRAU ASSIMÉTRICO	74
4.2.1	AUTOVALORES E AUTOFUNÇÕES	76
4.2.2	PACOTE DE ONDA	76
4.2.3	RESULTADOS	77
5	CONSIDERAÇÕES FINAIS	80
A	DEMONSTRAÇÃO	83
B	FUNÇÕES DE AIRY	84
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	86

1

INTRODUÇÃO

MOTIVAÇÃO

Existem muitos sistemas na natureza onde partículas são confinadas em uma certa região do espaço. Como exemplo podemos citar os elétrons em semicondutores, elétrons em átomos, e núcleons em núcleos atômicos [1]. As partículas são confinadas nessa região devido a ação de forças, que em mecânica quântica são representadas por operadores ou funções de energia. Tais sistemas cujo potencial de aprisionamento tem origens quânticas são denominados poços quânticos. A Fig.1.1 mostra um diagrama esquemático de uma partícula confinada em um poço quântico unidimensional.

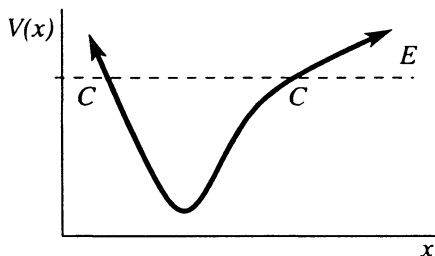


Fig. 1.1: Diagrama esquemático de um poço quântico.

A curva $V(x)$ representa a energia potencial em função da posição, mostrando também a energia total E , e os pontos de retorno clássicos C . Esses pontos denotam os limites clássicos de movimento da partícula cuja energia cinética é dado por $E - V$. Como a energia cinética é sempre maior ou igual a zero, então a partícula permanece classicamente confinada na região entre os dois pontos de retorno.

Nesta dissertação utilizaremos linhas verticais para delimitar os pontos de retorno clássico. Nesse caso, a partícula inverte o sentido do movimento instantaneamente adquirindo nesses pontos uma aceleração infinita. É claro que essa não é uma situação física real, não obstante, esses modelos apresentam simplificações matemáticas que em alguns casos particulares permitem um estudo analítico do espectro de energia.

O estudo da evolução temporal de uma partícula em um poço quântico depende criticamente das soluções do espectro quantizado de energia, já que estamos tratando apenas de estados ligados. Esse espectro pode ser obtido através da solução da equação de *Schrödinger* para uma determinada energia potencial. Sistemas cujas energias são rotuladas por dois números quânticos n e m , são freqüentemente referidos na literatura como bilhares quânticos ou “*quantum billiards*”. O grau de dificuldade em resolver o problema de autovalores depende da forma do potencial. Para sistemas muito regulares, como por exemplo nos bilhares quadrado, retangular [2], ou circular [3], a equação de *Schrödinger* conduz a uma solução analítica para os autovalores de energia.

O problema agora consiste em determinar os estados estacionários de um sistema quântico mais geral, com forma arbitrária para energia potencial. Presumidamente, esses bilhares não podem ser resolvidos analiticamente, sendo tedioso e custoso resolver a equação diferencial (equação de *Schrödinger*) numericamente com o propósito de obtermos os autovalores de energia. Embora os estados estacionários de um bilhar genérico possam ser determinados apenas numericamente, apresentamos nesta dissertação um método para a obtenção dos autovalores de energia e das autofunções, conhecido na literatura como “*expansion method*” ou método da expansão [4]. Esse método consiste em resolver o problema de autovalores através da diagonalização do operador de energia.

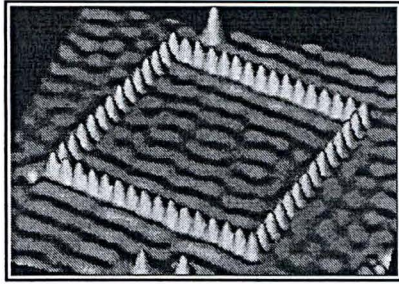
Bilhares são sistemas freqüentemente empregados como primeiro modelo nas mais diversas áreas do conhecimento científico e tecnológico, atraíndo interesses de áreas distintas, como a eletrônica e a nanotecnologia. Em anos recentes, com o desenvolvimento de sofisticadas técnicas de crescimento de cristais, como por exemplo, a Epitaxia por Feixes Moleculares (MBE) [5], e as técnicas de litografia [6], tornou-se possível a fabricação de heteroestruturas [7, 8] conhecidas como “*nanodevices*” (nanodispositivos), nas quais elétrons ficam confinados espacialmente em uma e duas dimensões. Em alguns casos esses dispositivos são construídos cuidadosamente de modo a apresentar uma estrutura geométrica simples, como por exemplo, a de um bilhar retangular, circular, etc [9, 10]. Alguns desses sistemas podem ser observados na Fig. 1.2. Os nanodispositivos mostrados na Fig. 1.2 (a) e na Fig. 1.2 (b) são conhecidos na literatura como currais quânticos e foram construídos com as técnicas de microscopia de tunelamento de varredura “*Scanning Tunnelling Microscope — STM*” [11, 12]. Essa, é a mesma técnica empregada em 1990 por pesquisadores da IBM,

onde foi construído o logotipo da empresa com 35 átomos de Xenônio sobre uma superfície de Níquel — Fig. 1.2 (c) — publicado na revista *Nature* [13]. Estruturas nanométricas podem ser obtidas ainda através de processos físico-químicos [14], como no caso dos nanotubos de carbono mostrados na Fig. 1.2 (d). A Fig. 1.2 (e), tirada por microscopia eletrônica, mostra um fio de cabelo sobre um chip de memória DRAM inacabado e de tecnologia do ano de 1986, ilustrando estruturas gravadas de largura de $2\mu m$. A Fig. 1.2 (f) mostra a fotografia de um microdispositivo, obtida por microscopia eletrônica de varredura, cujo rotor central mede aproximadamente $150\mu m$ construído com a técnica de litografia.

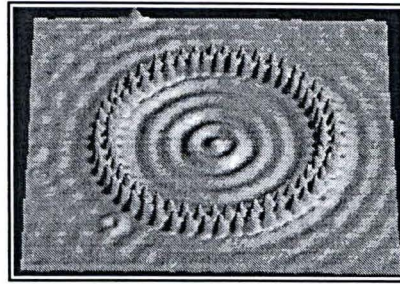
Para melhor utilização desses dispositivos, geralmente constituídos de Arseneto de Gálio (GaAs) ou Silício (Si), no caso das heteroestruturas, e de Carbono (C) no caso dos nanotubos, faz-se necessário o estudo de modelos que descrevam o comportamento dos elétrons em confinamento. Então o que era um problema acadêmico, de encontrar as soluções da equação de *Schrödinger* para o elétron, passou a ter um interesse prático. Um problema relevante, abordado em muitos trabalhos recentes, consiste no estudo da dinâmica de reconstrução¹ de pacotes de onda, bem como a criação, evolução e detecção desses pacotes. Como exemplo de trabalhos teóricos, podemos citar a observação de reconstrução em poços unidimensionais [15, 16, 17], bidimensionais [2, 3], e em estruturas atômicas [18, 19, 20], bem como em uma aplicação relativamente nova, o “caos quântico” [21, 22].

Como esse tema não é apenas de interesse teórico, podemos citar alguns trabalhos experimentais que mostram o estudo de pacotes em alguns sistemas quânticos particulares. Como exemplo de sistema experimental realístico, podemos citar um elétron em estados de *Rydberg* [23, 24], onde o pacote de onda corresponde a uma superposição de n estados quânticos coerentes, sendo n o número quântico principal. Podemos citar também o estudo de pacotes de onda em sistemas moleculares [25, 26], em sistemas de fótons em cavidades [27] e no aprisionamentos de íons [28]. A criação, observação e evolução desses pacotes dependem da possibilidade de geração de estados coerentes localizados e de um apurado controle de detecção da distribuição do pacote em um instante de tempo posterior. Esses sistemas podem ser gerados pela excitação do elétron de um dos estados atômicos de baixas energias através de um pulso curto de laser, e sua detecção se dá por um segundo feixe de laser de curta duração. Uma discussão sobre a formação de pacotes de onda pode ser encontrada na Ref. [29].

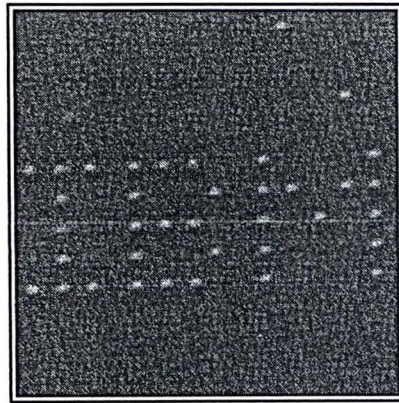
¹A reconstrução ocorre quando após um intervalo de tempo o pacote de onda retorna a sua condição (forma) inicial.



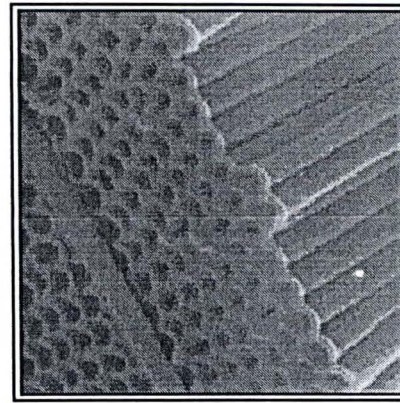
(a)



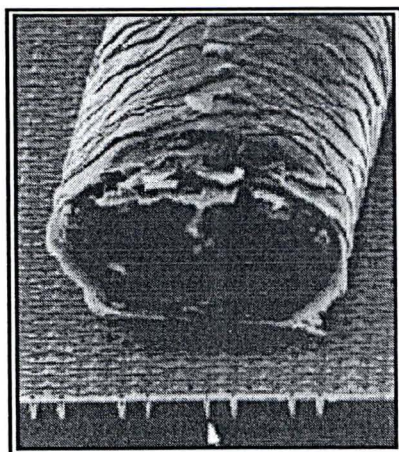
(b)



(c)



(d)



(e)



(f)

Fig. 1.2: Gravuras de nanodispositivos e microdispositivos construídos por diferentes técnicas, ilustrando a atual capacidade de manipulação nessas escalas.

Dispositivos (2D) nos quais elétrons são confinados em um domínio de tamanho microscópico podem ser estudados como um exemplo experimental de bilhar quântico, onde o movimento do elétron é balístico, isto é, a partícula é espalhada pelas paredes do sistema [30]. Por isso os bilhares podem fornecer modelos de nanodispositivos, que possuem importantes aplicações na indústria de semicondutores. O aprimoramento nos conhecimentos sobre esse tipo de sistema contribui, então, para o entendimento dos fundamentos da mecânica quântica, bem como para os avanços tecnológicos dela decorrentes.

OS POÇOS QUÂNTICOS

Este trabalho trata especificamente de sistemas em uma e duas dimensões, onde estudaremos essencialmente as soluções da equação de *Schrödinger*, a construção, reconstrução e a evolução de pacotes de onda em bilhares quânticos. Os sistemas aqui estudados são:

- | | |
|---|--|
| <ul style="list-style-type: none"> • Unidimensionais — Poço quadrado; — Poço degrau ; — Poço delta; — Poço degrau assimétrico; | <ul style="list-style-type: none"> • Bidimensionais — Bilhar retangular (quadrado); — Bilhar degrau com interação ; |
|---|--|

O estudo desses sistemas simples, nos permite focar atenção em aspectos relevantes da reconstrução de pacotes de onda, já que os fenômenos de interesse aparecem nesse tipo de problema. Embora a maior parte dos bilhares investigados aqui possam ser encontrados na literatura, em nosso trabalho, freqüentemente, fizemos algumas modificações, como por exemplo, na forma inicial do pacote de onda, que em nosso caso definimos como sendo descrito por uma distribuição *Gaussiana*. Outro aspecto importante que podemos ressaltar é a forma de classificação das escalas de tempo de reconstrução, que em nosso trabalho foi realizada através da modificação da posição média inicial (x_0) do pacote de onda no interior do bilhar.

O arquétipo de um sistema unidimensional para o estudo da reconstrução de pacotes de onda, é o poço quadrado infinito — veja a Fig. 3.1 na página 23. Esse sistema apresenta soluções matemáticas simples, onde os autovalores de energia, autofunções [1], e o tempo de reconstrução total [17] podem ser obtidos analiticamente. Esse sistema será nosso laboratório, por se tratar de um problema de fácil implementação computacional, com resultados conhecidos na literatura, onde a maior parte dos fenômenos de interesse são observados. Esse problema também é usado freqüentemente como primeira aproximação para muitos problemas em física e engenharia. Através de análises numéricas foi possível obter o tempo de reconstrução total do pacote de onda, corroborando os resultados obtidos analiticamente.

O poço degrau infinito unidimensional — veja a Fig. 3.7 na página 33 — não apresenta uma solução analítica para os autovalores de energia. Para obtê-los precisamos resolver uma equação transcendental. Como efeito, os tempos de reconstrução do pacote de onda só poderão ser obtidos numericamente. Estudaremos também o comportamento da partícula para diferentes valores de energia da barreira.

O poço degrau assimétrico infinito unidimensional — Fig. 3.21 na página 55 — também não apresenta soluções completamente analíticas para os autovalores de energia, ou seja, a analiticidade vai até encontrarmos uma equação transcendental cuja solução numérica fornece os autovalores de energia. O principal objetivo nesse sistema será comparar os autovalores de energia obtidos numericamente pelo método da expansão com os resultados obtidos através da equação transcendental. Esse procedimento evidenciará, então, a eficiência do método da expansão (diagonalização do *Hamiltoniano*) na obtenção dos estados estacionários desse problema.

O poço delta infinito unidimensional — Fig. 3.14 na página 44 — não apresenta solução analítica para os autovalores de energia, portanto a obtenção dos tempos de reconstrução do pacote foram obtidos apenas numericamente. Nesse problema mostraremos que a presença da delta não destrói a reconstrução total do pacote de onda, apenas modifica os instantes de sua ocorrência. Mostraremos também que esse instante depende sensivelmente da constante de acoplamento λ . Esse fato já foi mostrado analiticamente por [3], mas com algumas restrições, como por exemplo, a presença da delta apenas no centro do poço e o pacote de onda construído com níveis de energia muito maiores ou muito menores que a energia da barreira. Em nosso trabalho não há restrições dessa natureza, pois chegamos a expressões mais gerais, onde uma possibilidade introduzida, consiste na modificação da posição da barreira no interior do poço, possibilitando estudar a propriedade de aprisionamento do pacote via manipulação das dimensões (larguras) do poço.

O problema bidimensional mais simples a ser estudado é o poço retangular (quadrado) infinito bidimensional [2], veja a Fig. 4.1 na página 61. Esse problema pode ser tratado como uma generalização do problema unidimensional. Esse sistema é um dos poucos bilhares onde há solução analítica para os autovalores de energia e para as autofunções [31], e conseqüentemente para os tempos de reconstrução do pacote. Fizemos uma análise numérica da evolução do pacote de onda, onde os resultados numéricos concordaram com os resultados obtidos analiticamente.

O poço degrau assimétrico bidimensional, mostrado na Fig. 4.8 na página 74, não tem solução analítica para os autovalores de energia e portanto todos os procedimentos são realizados numericamente. Esse problema permitiu-nos estudar a dinâmica de um pacote de onda em um sistema mais geral. Nesse caso observamos que pacotes de onda com ener-

gia média menores que a altura da barreira permanecem aprisionados na região de menor potencial, mesmo para potenciais de acoplamento entre os estados em x e os estados em y significativamente intenso.

2

DESENVOLVIMENTOS TEÓRICOS

2.1 EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER

Considere uma partícula sujeita a uma energia potencial $V(\vec{r}; t)$. Em um limite não relativístico sua dinâmica pode ser descrita pela equação de *Schrödinger* [32]

$$i\hbar \frac{\partial |\Phi\rangle}{\partial t} = H|\Phi\rangle \quad . \quad (2.1)$$

Particularizando esse sistema para o caso em que a energia potencial não depende explicitamente do tempo, ou seja, $V(\vec{r}; t) = V(\vec{r})$ podemos reescrever a Eq. (2.1) como

$$H|\phi\rangle = E|\phi\rangle \quad , \quad (2.2)$$

onde H é o operador de energia, $|\phi\rangle$ representa os autoestados e E são os autovalores de energia de H . O *Hamiltoniano* do sistema é dado por

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2M} + V(\vec{r}) \quad , \quad \text{onde} \quad \vec{p} = -i\hbar\nabla \quad ,$$

então

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + V(\vec{r}) \quad . \quad (2.3)$$

Aplicando a Eq. (2.3) em (2.2), obtemos a parte espacial da equação de *Schrödinger*

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2\phi(\vec{r}) + V(\vec{r})\phi(\vec{r}) = E\phi(\vec{r}) \quad . \quad (2.4)$$

A solução geral da equação de *Schrödinger* será dada pelo produto entre a solução espacial $\phi(\vec{r})$ e a solução temporal $\tau(t)$, então

$$\begin{aligned} \Phi(\vec{r}; t) &= \phi(\vec{r})\tau(t) \\ &= \phi(\vec{r})e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \quad . \end{aligned}$$

A Eq. (2.4) é também conhecida como equação de *Schrödinger* estacionária, sendo válida para $V(\vec{r}; t) = V(\vec{r})$, onde h é a constante de *Planck* ($\hbar = h/2\pi$), M é a massa da partícula e $\phi(\vec{r})$ são as autofunções. Essa equação será amplamente utilizada neste trabalho porque tratamos exclusivamente de potenciais independentes do tempo. Nosso objetivo agora, será encontrar os autovalores de energia e suas autofunções. Para isso precisamos resolver a equação diferencial (2.4) para uma determinada energia potencial $V(\vec{r})$.

EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER UNIDIMENSIONAL

A equação de *Schrödinger* unidimensional pode ser obtida através da simplificação da Eq. (2.4). Consideremos agora uma partícula sujeita a uma energia potencial $V(x)$. O operador de energia para esse sistema será

$$H = \frac{p^2}{2M} + V(x) \quad , \quad \text{onde} \quad p = -i\hbar \frac{d}{dx} \quad ,$$

então

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad . \quad (2.5)$$

Aplicando a Eq. (2.5) em (2.2), obtemos

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + V(x) \phi(x) = E \phi(x) \quad . \quad (2.6)$$

Esta é a parte espacial da equação de *Schrödinger* unidimensional, onde a parte temporal é análoga ao caso mostrado anteriormente.

2.2 PACOTE DE ONDA

A dinâmica de uma partícula em um poço quântico pode ser estudada através da evolução temporal de um pacote de onda [33]. Esse pacote pode ser definido como a superposição de estados quânticos localizados no espaço, que no caso da incerteza mínima (pacotes *Gaussianos* por exemplo) pode fornecer uma ponte entre a mecânica quântica e o conceito clássico de trajetória.

A seguir apresentaremos as ferramentas básicas necessárias à investigação da dinâmica de uma partícula descrita por um pacote de onda. Vamos então descrever o estado do pacote como uma combinação linear dos autoestados do problema. Ou seja

$$|\Psi\rangle = \sum_j u_j |\Phi_j\rangle \quad . \quad (2.7)$$

Para sistemas cuja energia potencial não depende explicitamente do tempo, a função de onda pode ser escrita como

$$\begin{aligned}\Phi_j(\vec{r}; t) &= \phi_j(\vec{r}) \tau_j(t) \\ &= \phi_j(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_j t} .\end{aligned}\quad (2.8)$$

Substituindo agora a Eq. (2.8) na função de onda do pacote (2.7) obtemos

$$\Psi(\vec{r}; t) = \sum_j u_j \phi_j(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_j t} .\quad (2.9)$$

Essa, é a expressão matemática que descreve o comportamento do pacote e conseqüentemente da partícula. A densidade de probabilidade pode ser obtida fazendo-se

$$|\Psi|^2 = \Psi^*(\vec{r}; t) \Psi(\vec{r}; t)\quad (2.10)$$

$$= \sum_{j', j''} u_{j'}^* u_{j''} \phi_{j'}^*(\vec{r}) \phi_{j''}(\vec{r}) e^{-i\omega_{j'j''} t} ,\quad (2.11)$$

onde $\omega_{j'j''} \equiv (E_{j''} - E_{j'})/\hbar$ é a frequência de *Bohr*.

Estruturas semelhantes a Eq. (2.11), ou seja, onde temos múltiplos somatórios, aparecem com frequência em problemas de mecânica quântica. Esse tipo de operação geralmente é ineficiente computacionalmente. Em nosso caso, a densidade de probabilidade pode ser obtida mais facilmente calculando-se $\Psi(\vec{r}; t)$ através da Eq. (2.9) e depois $|\Psi|^2$ através da Eq. (2.10). Note que nesse caso trocamos um somatório por uma única operação complexa. A eficiência de um algoritmo calculado dessa forma fica mais evidente quando trabalhamos com sistemas bidimensionais.

Até agora não mencionamos nada a respeito das constantes u_j que aparece nas equações do pacote de onda. De imediato, podemos dizer que esses coeficientes são em geral números complexos e estão relacionados com a forma inicial do pacote, ou seja, “escolhendo” adequadamente os valores dessas constantes, podemos obter qualquer função que desejarmos.

2.2.1 OS COEFICIENTES u_j

Vamos então obter os coeficientes u_j para um instante de tempo $t = 0$. Essa escolha simplifica os cálculos já que nesse caso temos $\tau_j(t = 0) = 1$. Esses coeficientes podem ser obtidos da Eq. (2.7), multiplicando-se esse equação por $\langle \phi_k |$ tal que

$$\begin{aligned}\langle \phi_k | \Psi \rangle &= \sum_j u_j \underbrace{\langle \phi_k | \phi_j \rangle}_{\delta_{kj}} , \\ \langle \phi_j | \Psi \rangle &= u_j .\end{aligned}\quad (2.12)$$

Inserindo a relação de completeza $\int_{-\infty}^{+\infty} d^3r |\vec{r}\rangle \langle \vec{r}| = \mathbb{1}$ em (2.12), teremos

$$u_j = \int_{-\infty}^{+\infty} d^3r \phi_j^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r}; 0) \quad (2.13)$$

onde $\Psi(\vec{r}; 0)$ é a função de onda do pacote em $t = 0$ e $\phi_j(\vec{r})$ é a base na qual queremos expandir $\Psi(\vec{r}; t)$.

A DISTRIBUIÇÃO GAUSSIANA

Vamos impor que Ψ em $t = 0$ seja descrita por uma distribuição normal *Gaussiana* [32, 34, 35], ou seja, estamos atribuindo agora a forma específica para o pacote de onda inicial. Podemos escrever então

$$\Psi(\vec{r}; 0) = g(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{-(\vec{r}-\vec{r}_0)^2/4\sigma^2}$$

onde \vec{r}_0 é o centro do pacote *Gaussiano*, \vec{k} é o vetor de onda e σ é a variância de \vec{r} em torno de \vec{r}_0 . Vamos considerar também a velocidade média do pacote igual zero, isto é, $\vec{k} = \vec{0}$, com isso $\Psi(\vec{r}; 0)$ torna-se uma função real, cuja a forma é

$$\Psi(\vec{r}; 0) = g(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\sigma^2)^{1/4}} e^{-(\vec{r}-\vec{r}_0)^2/4\sigma^2} \quad . \quad (2.14)$$

Para o caso bidimensional temos $\vec{r}_0 = (x_0, y_0)$ e $\vec{r} = (x, y)$, então podemos escrever a Eq. (2.14) como

$$\Psi(\vec{r}; 0) = g(x)g(y) \quad , \quad (2.15)$$

onde

$$g(x) = \frac{1}{(2\pi\sigma_x^2)^{1/4}} e^{-(x-x_0)^2/4\sigma_x^2} \quad , \quad e \quad g(y) = \frac{1}{(2\pi\sigma_y^2)^{1/4}} e^{-(y-y_0)^2/4\sigma_y^2} \quad .$$

Para o caso unidimensional temos

$$\Psi(x; 0) = g(x) \quad . \quad (2.16)$$

2.3 SOLUÇÃO DO PROBLEMA INDEPENDENTE DO TEMPO

O método da expansão ou “*expansion method*” é uma poderosa ferramenta para o cálculo numérico dos níveis de energia de uma partícula sujeita a potenciais em uma e duas dimensões. Embora esse método seja amplamente conhecido na literatura [4, 31], iremos descrevê-lo aqui brevemente. De acordo com o método, as funções de onda dentro do bilhar são expressas em termos da expansão de um conjunto completo de funções ortonormais para os quais as condições de fronteira de *Dirichlet* são aplicáveis, isto é, quando as funções de onda se anulam nas fronteiras do bilhar.

O problema então consiste em encontrar os estados estacionários de um bilhar de forma arbitrária. Assumindo que a energia potencial seja independente do tempo, podemos aplicar a equação de *Schrodinger* estacionária (2.2). O operador de energia pode ser escrito como

$$H = H_0 + V \quad .$$

Escrevendo o operador de energia na base de H_0 , temos

$$\begin{aligned} \langle \phi_k^{(0)} | H | \phi_j^{(0)} \rangle &= E_j^{(0)} \langle \phi_k^{(0)} | \phi_j^{(0)} \rangle + \langle \phi_k^{(0)} | V | \phi_j^{(0)} \rangle \quad , \\ H_{kj} &= E_j^{(0)} \delta_{kj} + V_{kj} \quad . \end{aligned} \quad (2.17)$$

Os elementos de matriz que compõem o operador de energia H , são dados então pela Eq. (2.17). Com isso, podemos determinar os autovalores de energia, e as autofunções, através da diagonalização da matriz H , ou seja, precisamos resolver a equação

$$\det(H - E\mathbb{1}) = 0 \quad , \quad (2.18)$$

conhecida como equação secular. As autofunções do bilhar de forma arbitrária são dadas então pela combinação linear dos autoestados de H_0 , ou seja,

$$\Phi_j(\vec{r}) = \sum_k C_{kj} \phi_k^{(0)}(\vec{r}) \quad (2.19)$$

onde C é a matriz que diagonaliza H .

EVOLUÇÃO DO PACOTE DE ONDA E OS AUTOESTADOS DO HAMILTONIANO TOTAL

A evolução do pacote de onda é fornecida pela Eq. (2.7), onde $|\Phi_j\rangle$ representam os autoestados do operador H , dados pela Eq. (2.19). O pacote de onda pode ser escrita como

$$\Psi(\vec{r}; t) = \sum_{j,k} u_j C_{kj} \phi_k^{(0)}(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_j t} \quad . \quad (2.20)$$

A densidade de probabilidade é calculada através das Eqs. (2.10) e (2.20).

OS COEFICIENTES u_j

O procedimento aqui é analogo ao caso já estudado na seção 2.2.1. Partindo da Eq. (2.13), com $\phi_j(\vec{r})$ é dado pela Eq. (2.19), temos

$$u_j = \int_{-\infty}^{+\infty} d^3r \sum_k C_{kj}^* \phi_k^{*(0)}(\vec{r}) \Psi(\vec{r}; 0) \quad .$$

Admitindo agora o caso bidimensional, onde a função de onda inicial do pacote obedece a lei de distribuição *Gaussiana*, podemos escrever u_j como

$$u_j = \int_{-\infty}^{+\infty} dx dy \sum_{n,m} C_{nm}^{*(j)} \phi_n^{*(0)}(x) \varphi_m^{*(0)}(y) \Psi(x, y; 0) \quad ,$$

onde $\Psi(x, y; 0)$ é dado pela Eq. (2.15) e C_{kj} é escrito em termos dos números quânticos n e m . Com isso temos

$$u_j = \sum_{n,m} C_{nm}^{*(j)} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dx \phi_n^{*(0)}(x) g(x)}_{a_n} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dy \varphi_m^{*(0)}(y) g(y)}_{b_m} \quad ,$$

onde finalmente obtemos

$$u_j = \sum_{n,m} C_{nm}^{*(j)} a_n b_m \quad . \quad (2.21)$$

2.4 A FUNÇÃO DE AUTOCORRELAÇÃO

Consideremos o produto interno entre dois estados do pacote de onda $|\Psi(\vec{r}; t)\rangle$ e $|\Psi(\vec{r}; 0)\rangle$, esse produto é definido como

$$C(t) = \langle \Psi(\vec{r}; 0) | \Psi(\vec{r}; t) \rangle \quad , \quad (2.22)$$

onde $C(t)$ é a função de autocorrelação [36]. Aplicando a relação de completeza em (2.22) ficamos com

$$C(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} d^3r \Psi^*(\vec{r}; 0) \Psi(\vec{r}; t) \quad . \quad (2.23)$$

A função Ψ que caracteriza o pacote é dada pela Eq. (2.9) tal que

$$\Psi^*(\vec{r}; 0) = \sum_i u_i^* \phi_i^*(\vec{r}) \quad \text{e} \quad \Psi(\vec{r}; t) = \sum_j u_j \phi_j(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} E_j t} \quad . \quad (2.24)$$

Aplicando as Eqs. (2.24) em (2.23) obtemos

$$\begin{aligned} C(t) &= \sum_{i,j} u_i^* u_j \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} d^3r \phi_i^*(\vec{r}) \phi_j(\vec{r})}_{\delta_{ij}} e^{-\frac{i}{\hbar} E_j t} \\ &= \sum_j |u_j|^2 e^{-\frac{i}{\hbar} E_j t} \quad . \end{aligned} \quad (2.25)$$

O módulo quadrado da função de autocorrelação é, $|C|^2 = C^*(t) C(t)$, tal que

$$|C|^2 = \left| \sum_j |u_j|^2 e^{-\frac{i}{\hbar} E_j t} \right|^2 . \quad (2.26)$$

A dinâmica quântica do pacote pode ser estudada examinando-se o módulo quadrado da função de autocorrelação, onde os pontos de reconstrução podem ser observados diretamente em um gráfico de $|C|^2 \times t$.

AUTOCORRELAÇÃO E O MÉTODO DA EXPANSÃO

A aplicação do método da expansão à função de autocorrelação (2.25) se dá mediante a constante u_j , onde agora é fornecido pela Eq. (2.21). Com isso, a Eq. (2.25) toma a forma

$$C(t) = \sum_j \sum_{n,m} |C_{mn}^{(j)}|^2 |a_n|^2 |b_m|^2 e^{-\frac{i}{\hbar} E_j t} .$$

2.5 RECONSTRUÇÃO DO PACOTE DE ONDA

2.5.1 SISTEMAS UNIDIMENSIONAIS

Suponha E_n as autoenergias de um sistema que dependa apenas de um número quântico [17, 36], e ϕ_n as autofunções correspondentes. Podemos expandir agora as autoenergias em série de *Taylor* em torno de \bar{n} , tal que

$$E(n) = E(\bar{n}) + E'(\bar{n})(n - \bar{n}) + \frac{1}{2} E''(\bar{n})(n - \bar{n})^2 + \frac{1}{6} E'''(\bar{n})(n - \bar{n})^3 + \dots . \quad (2.27)$$

onde \bar{n} representa o número quântico de maior contribuição na construção do pacote.

Suponha o pacote de onda construído inicialmente com os primeiros estados quânticos do sistema, e que o coeficiente u_j de maior contribuição seja $u_{\bar{n}}$ onde \bar{n} ficará próximo ao estado fundamental desse sistema. Uma representação esquemática dessa situação pode ser observada na Fig. 2.1 (a). Vamos supor, que esse mesmo pacote seja excitado por uma fonte externa de energia — como por exemplo, um pulso curto de *laser* —, nesse caso o pacote de onda passa a ser construído predominantemente de estados quânticos altos, e que poderiam estar centrados em torno de um novo \bar{n} . A representação dessa situação pode ser vista na Fig. 2.1 (b), (veja por exemplo Ref. [37]).

Substituindo diretamente a Eq. (2.27) em Eq. (2.9) ficamos

$$\Psi(\vec{r}; t) = \sum_j u_j \phi_j(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar} [E(\bar{n}) + E'(\bar{n})(n - \bar{n}) + \dots] t} . \quad (2.28)$$

Da Eq. (2.28) podemos identificar algumas escalas de tempo¹, proveniente dos termos da expansão presente na Eq. (2.27), as quais denominaremos tempo de reconstrução clássica T_{rc} ou “*classical period*”, tempo de reconstrução total T_{rt} ou “*revival*” e tempo de super-reconstrução T_{sr} ou “*super-revival*”. Esses períodos são dados por

$$T_{rc} = \frac{2\pi\hbar}{|E'(\bar{n})|} \quad , \quad T_{rt} = \frac{2\pi\hbar}{|E''(\bar{n})|/2} \quad \text{e} \quad T_{sr} = \frac{2\pi\hbar}{|E'''(\bar{n})|/6} \quad . \quad (2.29)$$

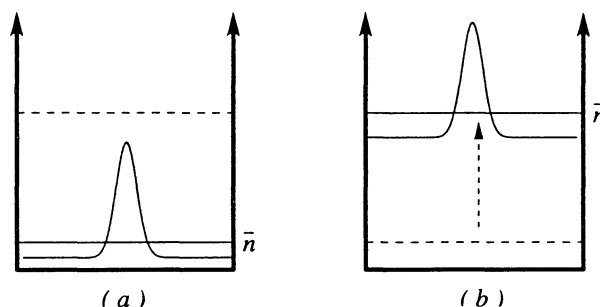


Fig. 2.1: A figura ilustra o significado do termo \bar{n} presente na Eq. (2.27). (a) O pacote Gaussiano é construído com os primeiros estados do sistema, nesse caso, \bar{n} assume um valor próximo do estado fundamental. (b) Uma vez excitado, as maiores contribuições ocorrem próximo de \bar{n} que nesse caso assume valores mais altos.

Podemos observar a evolução temporal do pacote de onda reescrevendo a Eq. (2.9) em termos dessas escalas de tempo, cuja dependência é controlada pelo número quântico principal n , presente na equação da energia quantizada (2.27).

AS RECONSTRUÇÕES CLÁSSICAS

A reconstrução clássica está associado com o movimento clássico de uma partícula com energia $E = E_{\bar{n}}$ cuja velocidade pode ser escrita como $v = \sqrt{2E/M}$. Ou seja, se colocarmos uma partícula em um poço na posição x_0 , deslocando-se em uma determinada direção — veja a ilustração 2.2(a)—, a partícula (●) colide com a parede 2 — Fig. 2.2(b) —, viajando em direção oposta até colidir com a parede 1 — Fig. 2.2(c) —, quando então retorna a posição inicial x_0 , completando um período clássico de movimento. Se usarmos a Eq. (2.27) para os níveis de energia quantizado, então encontraremos que $T_{rc} = T_{ret}$, onde T_{ret} é denominado tempo de retorno clássico.

¹Chamamos a atenção do leitor para o fato que um dos objetivos dessa dissertação consiste na investigação numérica desses escalas de tempo, que será estudado nos próximos capítulos.

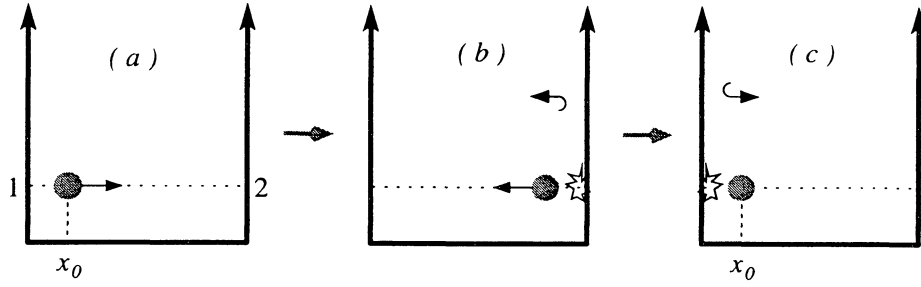


Fig. 2.2: Período clássico de movimento.

AS RECONSTRUÇÃO TOTAIS

A reconstrução total ocorre quando a função de onda que descreve a partícula (pacote de onda) em um tempo t retorna a sua condição inicial em $t = 0$. Pela substituição direta dos autovalores de energia expandido (2.27) em (2.9) observamos que, em $t = T_{rt}$ a função de onda é

$$\Psi(x; t = T_{rt}) = \Psi(x; t = 0) \quad . \quad (2.30)$$

2.5.2 SISTEMAS BIDIMENSIONAIS

Agora vamos tratar das escalas de tempo para sistemas que depende de dois números quânticos [2, 3]. Expandindo a energia do sistema em série de *Taylor* em torno de dois números quânticos médios \bar{n} e \bar{m} , com isso obtemos

$$E_{n,m} = E_{\bar{n},\bar{m}} + \frac{\partial E}{\partial n} \Big|_{\bar{n},\bar{m}} (n - \bar{n}) + \frac{\partial E}{\partial m} \Big|_{\bar{n},\bar{m}} (m - \bar{m}) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial n^2} \Big|_{\bar{n},\bar{m}} (n - \bar{n})^2 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 E}{\partial m^2} \Big|_{\bar{n},\bar{m}} (m - \bar{m})^2 + \frac{\partial^2 E}{\partial n \partial m} \Big|_{\bar{n},\bar{m}} (n - \bar{n})(m - \bar{m}) + \dots \quad (2.31)$$

De forma análoga ao caso unidimensional, podemos identificar algumas escalas de tempo na Eq. (2.31), as quais denominaremos tempo de reconstrução clássica T_{rc} e tempo de reconstrução total T_{rt} . Esses períodos são dados por

$$T_{rc}^{(1)} = \frac{2\pi\hbar}{(\partial E / \partial n)_{\bar{n},\bar{m}}} \quad , \quad T_{rc}^{(2)} = \frac{2\pi\hbar}{(\partial E / \partial m)_{\bar{n},\bar{m}}} \quad , \quad (2.32)$$

$$t_{rt}^{(1)} = \frac{2\pi\hbar}{\frac{1}{2}(\partial^2 E / \partial n^2)_{\bar{n},\bar{m}}} \quad , \quad t_{rt}^{(2)} = \frac{2\pi\hbar}{\frac{1}{2}(\partial^2 E / \partial m^2)_{\bar{n},\bar{m}}} \quad \text{e} \quad t_{rt}^{(12)} = \frac{2\pi\hbar}{(\partial^2 E / \partial m \partial n)_{\bar{n},\bar{m}}}$$

POÇOS UNIDIMENSIONAIS

3.1 POÇO QUADRADO INFINITO

Como já mencionamos na introdução, o poço quadrado infinito é muito utilizado como um primeiro modelo na descrição de vários sistemas físicos [17, 1, 38]. Apresentaremos portanto, uma completa descrição desse sistema.

Considere uma partícula sujeita a um potencial definido por

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (0 < x < D) \\ \infty & (0 \geq x \geq D) \end{cases} \quad (3.1)$$

que está representado na Fig. 3.1.

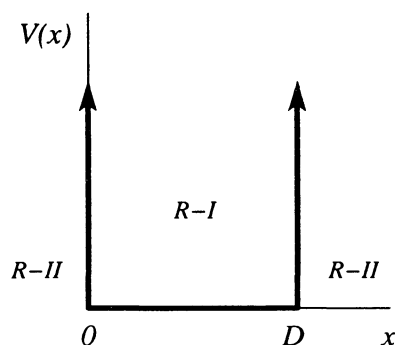


Fig. 3.1: Diagrama esquemático do poço quadrado infinito.

Nosso objetivo imediato será encontrar os autovalores de energia e as autofunções desse sistema fornecido diretamente pela equação de *Schrödinger* independente do tempo (2.6).

3.1.1 AUTOVALORES E AUTOFUNÇÕES

A solução da Eq. (2.6) em $(R - II)$ é simplesmente $\phi(x) = 0$. Em $(R - I)$, podemos definir $k^2 \equiv 2ME/\hbar^2$ e escrever a equação diferencial como

$$\phi_{xx} + k^2\phi = 0 \quad ,$$

onde ϕ_{xx} representa a derivada segunda da autofunção em relação a x . A solução dessa equação é

$$\phi(x) = A \operatorname{sen} kx + B \operatorname{cos} kx \quad . \quad (3.2)$$

Aplicando as condições de contorno, isto é, a função de onda (3.2) deve se anular em $x = 0$ e $x = D$, temos

$$\begin{aligned} A \operatorname{sen} 0 + B \operatorname{cos} 0 &= 0 \quad , & A \operatorname{sen} kD + B \operatorname{cos} kD &= 0 \quad , \\ B &= 0 & e \quad k &= \frac{n\pi}{D} \quad (n = 1, 2, 3 \dots) \quad . \end{aligned}$$

O estado $n = 0$ foi excluído da solução porque viola o postulado de *Born* – Eq. (3.3). Esse estado portanto não descreve uma partícula em uma caixa, e portanto não faz parte de uma solução fisicamente aceitável.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \phi^*(x) \phi(x) = 1 \quad . \quad (3.3)$$

Os autovalores de energia para esse sistema são dados por

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2MD^2} n^2 \quad (n = 1, 2, 3 \dots) \quad . \quad (3.4)$$

Para obtermos completamente as autofunções (3.2) precisamos encontrar o valor da constante de normalização A . Para isso aplicamos a condição de normalização (3.3), onde encontramos que $A = \pm \sqrt{2/D}$. Com isso as autofunções ficam

$$\phi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{D}} \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{D} & (R - I) \\ 0 & (R - II) \end{cases} \quad . \quad (3.5)$$

O sinal negativo foi omitido em (3.5) por simplicidade, já que ambos os sinais conduzem a mesma densidade de probabilidade.

3.1.2 PACOTE DE ONDA

A seguir vamos investigar a dinâmica quântica do pacote de onda em um poço quadrado infinito. Para isso reescreveremos as Eqs. (2.9) e (2.13) para o caso unidimensional.

Logo

$$\Psi(x; t) = \sum_n a_n \phi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \quad \text{e} \quad |\Psi|^2 = \Psi^*(x; t) \Psi(x; t) \quad , \quad (3.6)$$

onde

$$a_n = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \phi_n^*(x) \Psi(x; 0) \quad . \quad (3.7)$$

A evolução do pacote é obtida diretamente da Eq. (3.6), mas para isso precisamos determinar os coeficientes a_n .

OS COEFICIENTES a_n

Os coeficientes a_n são obtidos através da solução da integral (3.7). Admitindo que o pacote de onda $\Psi(x; 0)$ seja descrita por uma distribuição normal *Gaussiana* (2.16) e que os $\phi_n(x)$ sejam as autofunções do poço quadrado infinito, veja a Eq. (3.5), temos

$$a_n = \sqrt{\frac{2}{D}} \int_0^D dx g(x) \text{sen} \frac{n\pi x}{D} \quad .$$

Se o pacote de onda for suficientemente estreito, isto é, se $g(0) \approx g(D) \approx 0$ podemos fazer a seguinte aproximação

$$a_n = \sqrt{\frac{2}{D}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx g(x) \text{sen} \frac{n\pi x}{D} \quad (0 < x_0 < D)$$

onde finalmente obtemos

$$a_n = \left(\frac{32\pi\sigma_x^2}{D^2} \right)^{1/4} \text{sen} \frac{n\pi x_0}{D} e^{-(n\pi\sigma_x/D)^2} \quad . \quad (3.8)$$

Com isso podemos fazer a evolução do pacote de onda, e estudar a dinâmica de uma partícula em um poço quadrado infinito.

3.1.3 OS TEMPOS DE RECONSTRUÇÃO

A reconstrução clássica, reconstrução total e super-reconstrução são dadas pelas fórmulas (2.29) onde a energia é expressa pela Eq. (3.4). Com isso obtemos as seguintes escalas de tempo para o poço quadrado:

$$T_{rc} = \frac{2MD^2}{\pi\hbar\bar{n}} \quad , \quad T_{rt} = \frac{4MD^2}{\pi\hbar} \quad \text{e} \quad T_{sr} = \infty \quad . \quad (3.9)$$

A evolução temporal (3.6) pode ser reescrita como

$$\Psi(x; t) = \sum_n a_n \phi_n(x) e^{-2\pi n^2 i \left(\frac{t}{T_{tr}} \right)} \quad .$$

Para $t = T_{rt}$ a função de onda retorna a sua forma original, ou seja, nessas condições a Eq. (2.30) é verificada!

VERIFICAÇÃO DA EQUAÇÃO (2.30) PARA O POÇO QUADRADO INFINITO

Os autovalores de energia e o tempo de reconstrução total são fornecidos pelas Eqs. (3.4) e (3.9), respectivamente, e podemos reescreve-los como

$$\frac{1}{T_{rt}} = \frac{\pi \hbar}{4MD^2} \quad \text{então} \quad E_n = \frac{2\pi \hbar}{T_{rt}} n^2 \quad \text{logo}$$

$$\Psi(x; t) = \sum_n a_n \phi_n(x) e^{-2\pi n^2 i (\frac{t}{T_{rt}})}$$

Em $t = T_{rt}$ temos

$$\begin{aligned} \Psi(x, t = T_{rt}) &= \sum_n a_n \phi_n(x) e^{-2\pi n^2 i} \\ &= \sum_n a_n \phi_n(x) [\underbrace{\cos 2\pi n^2}_{=1} - i \underbrace{\sen 2\pi n^2}_{=0}] \\ &= \sum_n a_n \phi_n(x) \end{aligned}$$

logo

$$\Psi(x, t = T_{rt}) = \Psi(x, t = 0)$$

como queríamos mostrar.

3.1.4 RESULTADOS

Nessa seção trataremos dos resultados obtidos através de simulação numérica para a evolução do pacote de onda em poço quadrado infinito. Mostraremos aqui a concordância entre os tempos de reconstrução obtidos numericamente e analiticamente. O pacote de onda considerado deve ser construído com um número suficiente de níveis de energia, de tal forma que possa ser representado por uma distribuição *Gaussiana* — veja a Fig. 3.2 (a). Nessa figura a linha cheia representa a curva *Gaussiana* $|g(x)|^2$, obtida da Eq. (2.16), e os pontos foram obtidos diretamente da Eq. (2.8). Para que esse pacote seja bem representado, faz-se necessário que os pontos coincidam com a curva. A Fig. 3.2 (b) mostra um exemplo típico de um pacote de onda construído com um número insuficiente de níveis de energia.

Os parâmetros que mais influenciam na construção do pacote de onda são: a dispersão σ_x , a posição inicial média x_0 e o número de autoestados utilizados, sendo importante ressaltar também que, quanto mais estreito for o pacote de onda (quanto menor σ_x), mais níveis de energia são necessários para representar esse pacote. Nesse caso, fica evidente o fato desses parâmetros estarem relacionados, pois quanto mais próximo da parede, mais estreito deve ser o pacote, e portanto, mais níveis de energia precisam ser utilizados na sua construção.

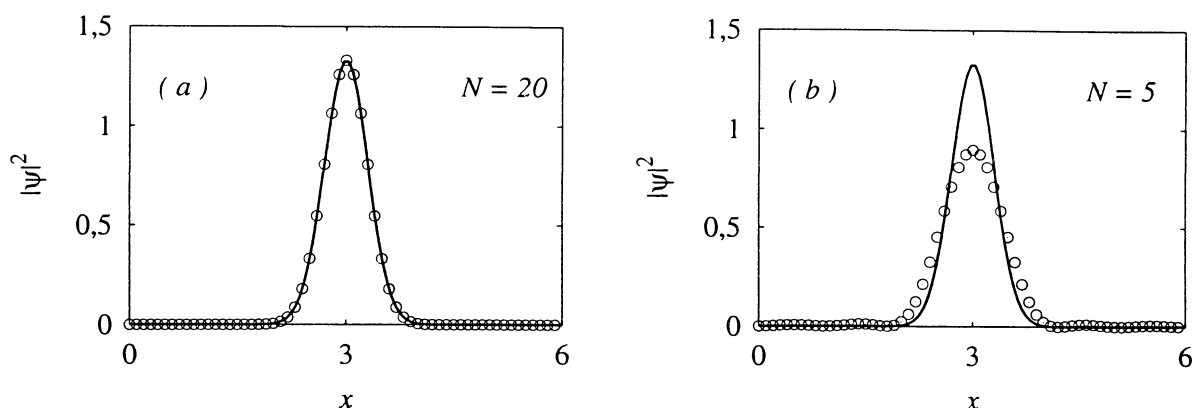


Fig. 3.2: Construção do pacote de onda.

Para que o pacote seja bem construído, utilizaremos $N = 20$ níveis de energia, de tal forma que

$$\sum_{n=1}^{20} |a_n|^2 = 0,999976 \approx 1 \quad (x_0 = 3) \quad .$$

Tendo em vista a construção do pacote de onda podemos utilizar o seguinte conjunto de parâmetros¹: a dispersão ($\sigma_x = 1/5$), a largura do poço ($D = 6$) e vamos considerar também ($\hbar = M = 1$). A seguir mostraremos uma lista de figuras que sintetizam os resultados da dinâmica da partícula (evolução do pacote de onda) para o poço quadrado infinito.

Lista de figuras	
3.3	- Autovalores de energia
3.4	- Autofunções e módulo quadrado da função de onda
3.5	- Evolução do pacote de onda ($x_0 = 1$)
3.6	- Função de autocorrelação

A Fig. 3.3 mostra a energia quantizada (autovalores de energia) para o poço quadrado infinito, obtidos diretamente da Eq. (3.4), onde podemos observar a dependência quadrática dessa energia em relação ao número quântico n . As Figs. 3.4 (a) - (f) mostram as funções de onda $\phi_n(x)$ e o módulo quadrado das respectivas função de onda $|\phi_n|^2$, obtidas com a Eq. (3.5), onde o pacote é construído mediante a superposição das 20 primeiras autofunções.

Vamos estudar agora a dinâmica do pacote de onda, para isso utilizaremos os autovalores de energia (3.4), as autofunções (3.5) e os coeficientes da expansão (3.8). A simulação

¹Embora essa configuração não seja única.

da evolução temporal do pacote para cada instante de tempo é calculada pela Eq. (3.6) e são mostradas nas Figs. 3.5 (a) - (p). Podemos observar nos instantes iniciais da evolução, o alargamento do pacote — veja as Figs. 3.5 (a) - (d) e posteriormente a distribuição do pacote no poço — Figs. 3.5 (e) - (h). As Figs. 3.5 (i) - (m) mostram o pacote de onda se reconstruindo no extremo oposto do poço em $t = 22,92$, onde esse processo se repete até se reconstruir na mesma posição inicial em $t = 45,84$ — veja a Fig. 3.5 (o). Com isso podemos observar claramente nessa seqüência de figuras o pacote de onda se deslocando de um lado a outro no interior do poço, cujo processo se repete indefinidamente.

AS ESCALAS DE TEMPO

Podemos estudar e classificar ainda as diferentes escalas de tempo de reconstrução presentes na dinâmica da partícula. O procedimento adotado aqui consiste na modificação da posição inicial média do pacote no interior do poço. As Figs. 3.6 (a) - (f) ilustram a função de autocorrelação para diferentes valores de x_0 . Podemos observar ainda que as únicas reconstruções que não se modificam na Fig. 3.6 ocorrem exatamente em $t = T_{rt}$, esse fato acontece porque os tempos de reconstrução total não apresentam dependência em relação a \bar{n} , e por essa razão esses tempos são conhecidos na literatura como tempos “universais” de reconstrução. Por outro lado os tempos de reconstruções clássicas apresentam essa dependência, e portanto, dependem da condição inicial x_0 . Note na Fig. 3.6 que diferentes valores de x_0 geram diferentes funções de autocorrelação, e portanto, o pacote de onda apresenta uma dinâmica diferente para cada situação. Uma análise da Fig. 3.6 (c) mostra que os dois primeiros picos ocorrem devido a períodos clássicos de reconstrução, já o terceiro devido a reconstrução total ², os demais picos obedecem a mesma regra de reconstrução, ou seja, o pacote se reconstrói periodicamente no interior do poço. A Fig. 3.6 (e) ilustra uma dinâmica diferente, onde os sete primeiros picos ocorrem devido a períodos clássicos de reconstrução e o oitavo devido a reconstrução total. Podemos destacar também os tempos de reconstrução parcial que correspondem a frações do tempo de reconstrução total. A Tab. 3.1 mostra esses tempos.

²Além de concordar com o tempo de reconstrução total obtido analiticamente — Eq. (3.9), esse pico, é o único que não varia na Fig. 3.6, evidenciando portanto uma reconstrução total ou “revival”.

Total-Reconstrução		
	$(x_0 = 2)$ Fig. 3.6 (c)	$(x_0 = 3)$ Fig. 3.6 (e)
1	$T_{cr} = 15,30$	1 $T_{cr} = 5,73$
2	$T_{cr} = 30,60$	2 $T_{cr} = 11,46$
3	$T_{tr} = 45,84$	3 $T_{cr} = 17,19$
		4 $T_{cr} = 22,92$
		5 $T_{cr} = 28,65$
		6 $T_{cr} = 34,38$
		7 $T_{cr} = 40,11$
		8 $T_{tr} = 45,84$

Reconstrução Parcial		
Tempos	Numérico	Figura 3.5
$T_{tr}/8$	5,73	(f)
$T_{tr}/6$	7,64	(g)
$T_{tr}/4$	11,46	(h)
$T_{tr}/2$	22,92	(m)

Tab. 3.1: Tempos de reconstrução para o poço quadrado infinito.

Podemos observar também uma relação entre os períodos clássicos e a frequência de *Bohr*. Para isso vamos calcular os autovalores de energia com a Eq. (3.4), com o objetivo de encontrar as frequências de *Bohr* correspondentes, em relação ao estado fundamental, tal que $\omega_{21} = 0,411$ e $\omega_{31} = 1,10$. O quadro abaixo mostra as frequências de *Bohr* obtidas a partir dos tempos de reconstrução ($\omega = 2\pi/T_{cr}$).

-----	↑	$E_3 = 1,234$	
	ω_{31}		
-----		$E_2 = 0,548$	
	ω_{21}		
-----		$E_1 = 0,137$	

Tempos	ω
$T_{cr} = 5,73$	1,10
$T_{cr} = 15,30$	0,411
$T_{tr} = 45,84$	0,137

Com isso podemos mostrar que os tempos de reconstruções clássicas estão relacionados com algumas transições particulares do espectro de energia do poço quadrado infinito.

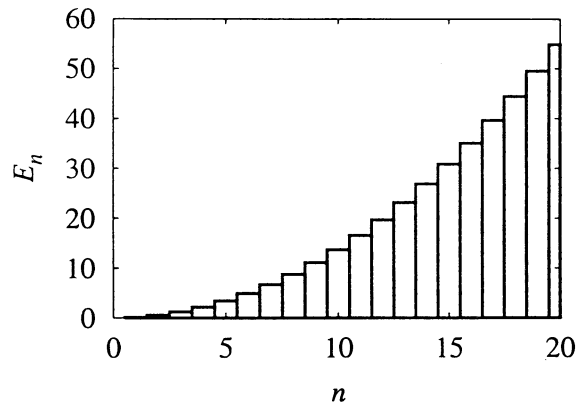


Fig. 3.3: Níveis de energia do poço quadrado infinito.

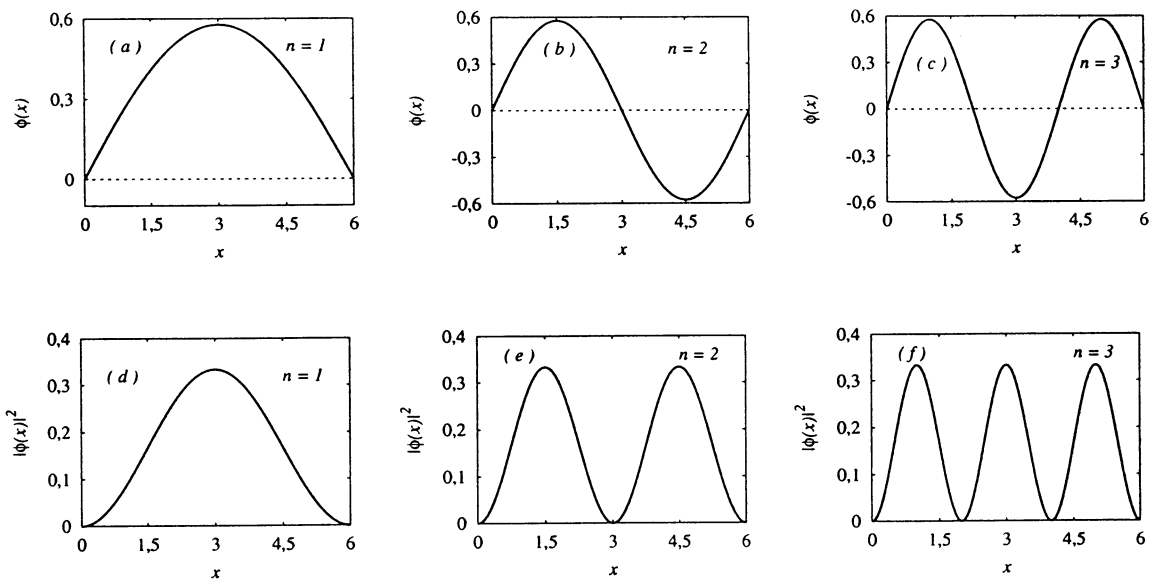


Fig. 3.4: Autofunções $\phi_n(x)$ e o módulo quadrado da função de onda $|\phi_n|^2$ para o poço quadrado infinito.

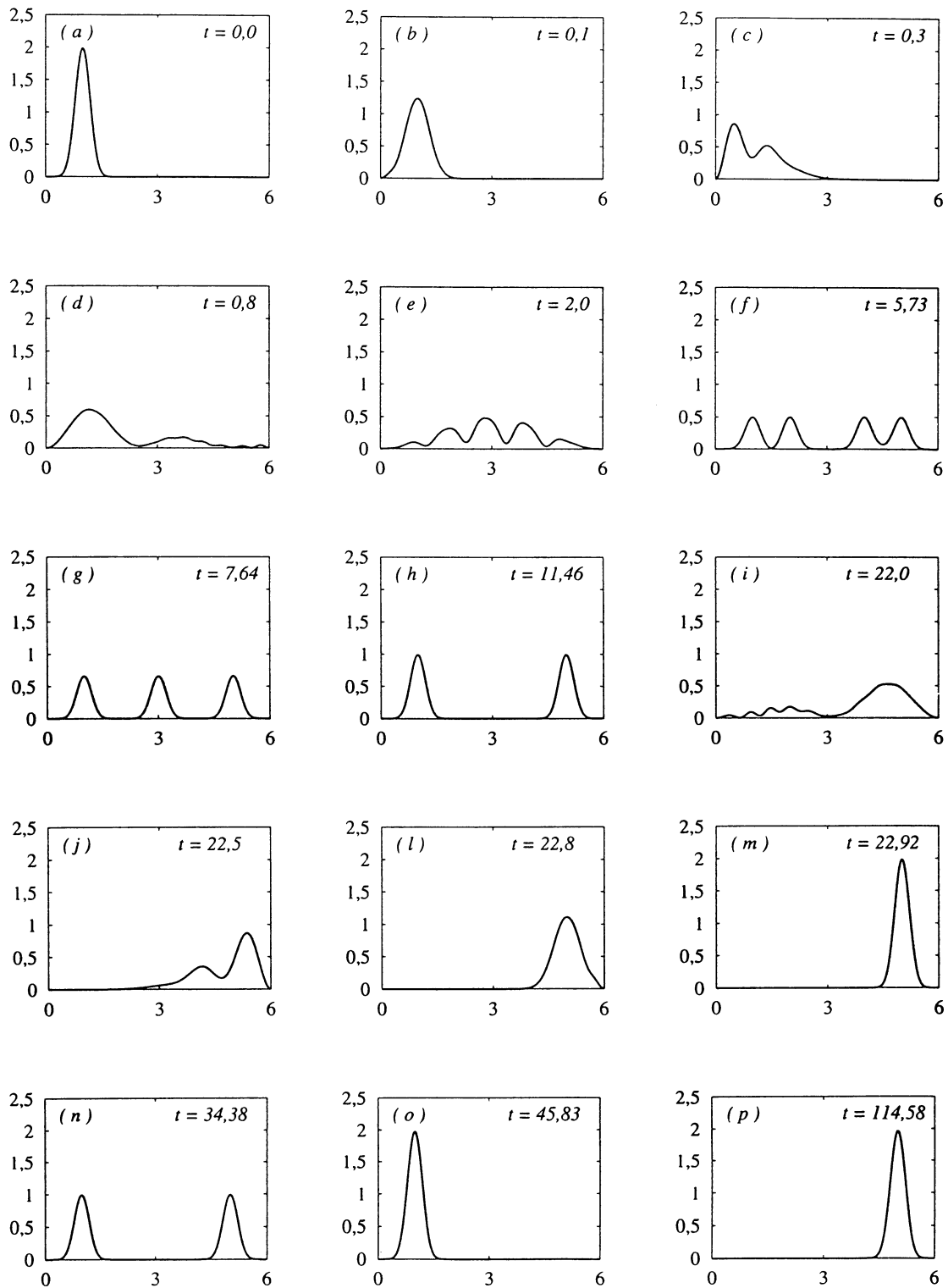


Fig. 3.5: Evolução temporal de um pacote Gaussiano ($|\Psi|^2 \times x$) em um poço quadrado infinito, para $x_0 = 1$. Nessas condições não são observados tempos clássicos de reconstrução.

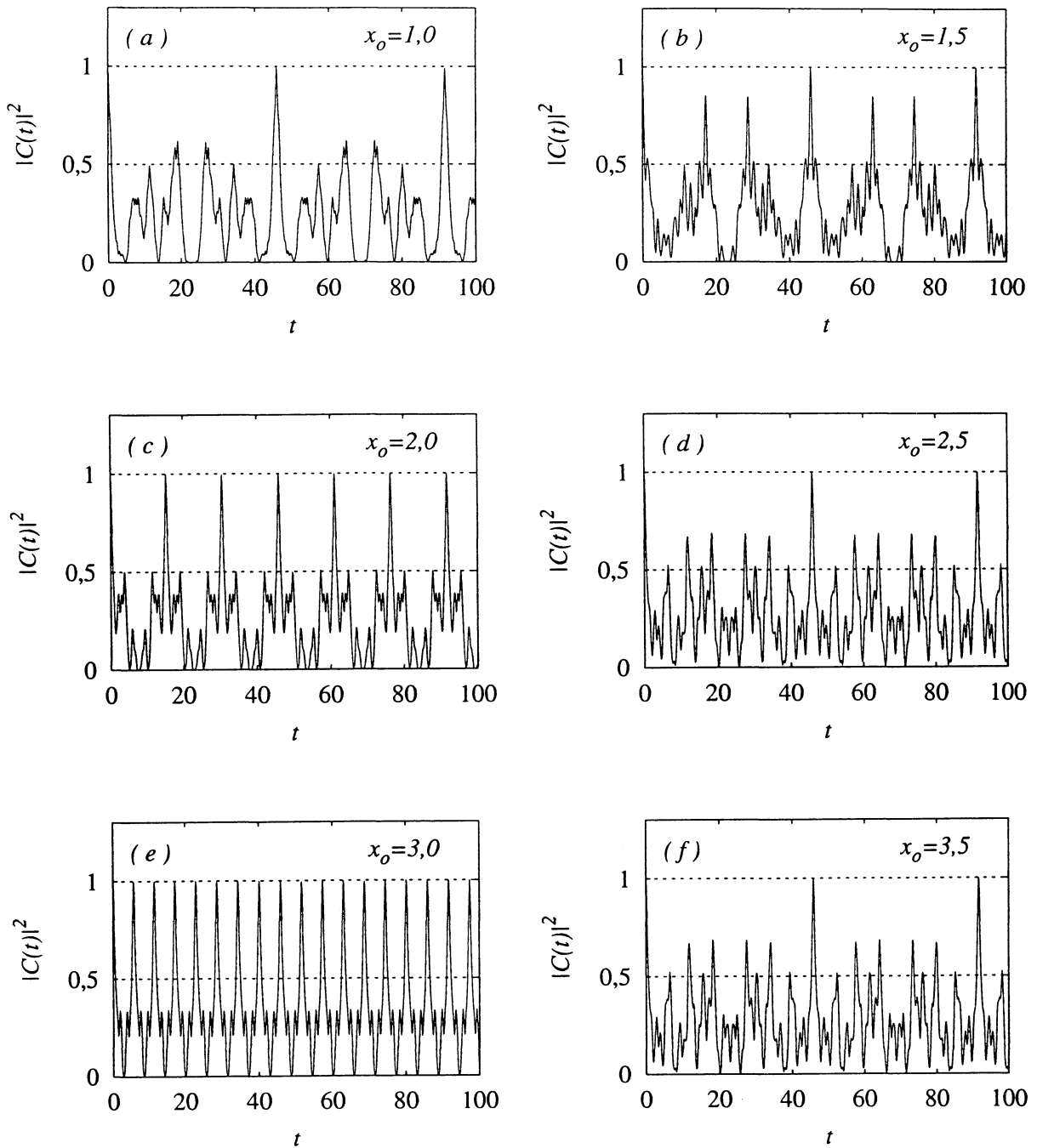


Fig. 3.6: Função de Autocorrelação.

3.2 POÇO DEGRAU INFINITO

O desenvolvimento a seguir, mostra um estudo numérico da evolução de um pacote de onda em um poço degrau infinito, definido por

$$V(x) = \begin{cases} 0 & (0 < x < L_1) \\ V_s & (L_1 \leq x < L) \\ \infty & (0 \geq x \geq L) \end{cases}, \quad (3.10)$$

onde V_s é a energia máxima da barreira e $L \equiv L_1 + L_2$ são as dimensões (larguras) do poço (veja a Fig. 3.7).

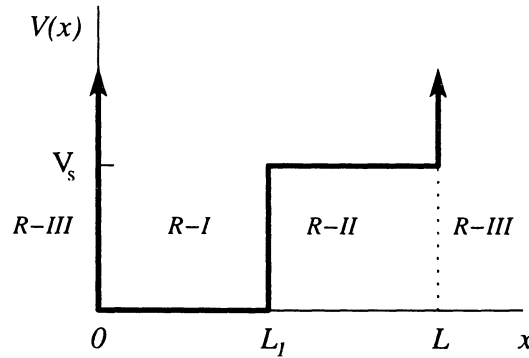


Fig. 3.7: Diagrama esquemático da energia potencial do poço degrau infinito.

Iniciaremos buscando uma solução para os autovalores de energia e para as autofunções. Podemos observar quatro regiões onde a função de onda tem comportamentos distintos — pelo menos em sua amplitude. Vamos encontrar as autofunções para cada região através da equação de *Schrödinger* independente do tempo — Eq. (2.6).

3.2.1 AUTOVALORES E AUTOFUNÇÕES

O problema agora consiste em resolver a equação de *Schrödinger* para três regiões distintas já que a solução em ($R - III$) é simplesmente $\varphi(x) = 0$. Podemos reescrever a Eq. (2.6) como as seguintes equações diferenciais

$$\begin{aligned} \varphi_{xx} + k^2\varphi &= 0 & (R - I) &, & \varphi_{xx} - q^2\varphi &= 0 & (R - II)(E < V_s) &, \\ \varphi_{xx} + Q^2\varphi &= 0 & (R - II)(E > V_s) &, & & & & \end{aligned} \quad (3.11)$$

onde definimos $k^2 \equiv 2ME/\hbar^2$, $\alpha^2 \equiv 2MV_s/\hbar^2$, $q^2 \equiv \alpha^2 - k^2$ e $Q^2 \equiv k^2 - \alpha^2$.

As soluções das três equações diferenciais apresentadas em (3.11) serão

$$\varphi(x) = \begin{cases} a \operatorname{sen} kx + b \operatorname{cos} kx & (R - I) \\ c \operatorname{senh} q(x - L) + d \operatorname{cosh} q(x - L) & (R - II)(E < V_s) \\ C \operatorname{sen} Q(x - L) + D \operatorname{cos} Q(x - L) & (R - II)(E > V_s) \\ 0 & (R - III) \end{cases} . \quad (3.12)$$

Para determinar as constantes que aparecem nas funções de onda (3.12), vamos aplicar as condições de contorno — a função de onda deve ser contínua em $x = 0$, $x = L$ e $x = L_1$ e diferenciável em $x = L_1$, logo

$$\begin{aligned} a \operatorname{sen} 0 + b \operatorname{cos} 0 = 0 & , & c \operatorname{senh} 0 + d \operatorname{cosh} 0 = 0 & , \\ C \operatorname{sen} 0 + D \operatorname{cos} 0 = 0 & , \end{aligned}$$

com isso determinamos que

$$b = d = D = 0 .$$

Para $x = L_1$ obtemos

$$\begin{aligned} a \operatorname{sen} kL_1 = -c \operatorname{senh} qL_2 & & ak \operatorname{cos} kL_1 = cq \operatorname{cosh} qL_2 & & (E < V_s) \\ a \operatorname{sen} kL_1 = -C \operatorname{sen} QL_2 & & ak \operatorname{cos} kL_1 = CQ \operatorname{cosh} QL_2 & & (E > V_s) \end{aligned} \quad (3.13)$$

Do sistema de equações acima podemos obter as seguintes expressões para os autovalores de energia

$$\begin{aligned} k \operatorname{cos} kL_1 \operatorname{senh} qL_2 + q \operatorname{sen} kL_1 \operatorname{cosh} qL_2 = 0 & & (E < V_s) \\ k \operatorname{cos} kL_1 \operatorname{sen} QL_2 + Q \operatorname{sen} kL_1 \operatorname{cos} QL_2 = 0 & & (E > V_s) \end{aligned} . \quad (3.14)$$

Resolvendo as Eqs. (3.14) em k , ou seja, encontrando as raízes dessa equação, obtemos os autovalores de energia através de

$$E_m = \frac{\hbar^2}{2M} k_m^2 \quad (m = 1, 2, 3, \dots) . \quad (3.15)$$

Agora precisamos obter uma solução final para as autofunções (3.12). Para isso vamos encontrar uma expressão para as constantes de normalização a , c , d e C . Do sistema de equações (3.13) podemos obter a relação entre a , c e C , dado por

$$c = -\frac{\operatorname{sen} kL_1}{\operatorname{senh} qL_2} a \quad \text{e} \quad C = -\frac{\operatorname{sen} kL_1}{\operatorname{sen} QL_2} a .$$

Aplicando agora a condição de normalização

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \varphi^*(x) \varphi(x) = 1 ,$$

podemos finalmente obter uma expressão final para as constantes de normalização — Eq. (3.16) — e conseqüentemente para as autofunções — Eq. (3.17).

$$a = a_m = \frac{1}{\sqrt{f_m}} \quad , \quad (3.16)$$

onde

$$f_m = \begin{cases} \frac{L_1}{2} - \frac{\text{sen } 2k_m L_1}{4k_m} - \frac{1}{4q_m} \frac{\text{sen}^2 k_m L_1}{\text{senh}^2 q_m L_2} (\text{senh } 2q_m L_2 - 2q_m L_2) & (E_m < V_s) \\ \frac{L_1}{2} - \frac{\text{sen } 2k_m L_1}{4k_m} - \frac{1}{4Q_m} \frac{\text{sen}^2 k_m L_1}{\text{sen}^2 Q_m L_2} (\text{sen } 2Q_m L - 2Q_m L) & (E_m > V_s) \end{cases}$$

$$\varphi_m(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{f_m}} \text{sen } k_m x & (R - I) \\ \frac{1}{\sqrt{f_m}} \frac{\text{sen } k_m L_1}{\text{senh } q_m L_2} \text{senh } q_m (L - x) & (R - II)(E_m < V_s) \\ \frac{1}{\sqrt{f_m}} \frac{\text{sen } k_m L_1}{\text{sen } Q_m L_2} \text{sen } Q_m (L - x) & (R - II)(E_m > V_s) \\ 0 & (R - III) \end{cases} \quad . \quad (3.17)$$

3.2.2 PACOTE DE ONDA

A seguir investigaremos a dinâmica de um pacote de onda em um poço de grau infinito. Para isso reescreveremos as Eqs. (2.9) e (2.13) para o caso unidimensional como

$$\Psi(x; t) = \sum_m b_m \varphi_m(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_m t} \quad \text{e} \quad |\Psi|^2 = \Psi^*(x; t) \Psi(x; t) \quad , \quad (3.18)$$

onde

$$b_m = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \varphi_m^*(x) \Psi(x; 0) \quad . \quad (3.19)$$

A evolução do pacote de onda é obtida diretamente da Eq. (3.18), mas para isso precisamos determinar os coeficientes b_m .

OS COEFICIENTES b_m

As transformações necessárias para a obtenção dos coeficientes b_m são mostradas na seção 2.2.1, cuja relação é dada pela Eq. (3.19). Admitindo a distribuição de probabilidade para o pacote de onda inicial como sendo descrita por uma distribuição normal *Gaussiana* (2.16), podemos escrever

$$b_m = \frac{1}{\sqrt{f_m}} \int_0^{L_1} dx g(x) \text{sen } k_m x + \frac{1}{\sqrt{f_m}} \begin{cases} \int_{L_1}^L dx g(x) \frac{\text{sen } k_m L_1}{\text{senh } q_m L_2} \text{senh } q_m (L - x) & (E_m < V_s) \\ \int_{L_1}^L dx g(x) \frac{\text{sen } k_m L_1}{\text{sen } Q_m L_2} \text{sen } Q_m (L - x) & (E_m > V_s) \end{cases} \quad .$$

Considerando o pacote de onda inicial localizado na região de menor potencial ($R - I$) e suficientemente estreito, ou seja, $g(0) \approx g(L_1) \approx 0$, a seguinte aproximação pode ser feita

$$b_m = \frac{1}{\sqrt{f_m}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx g(x) \text{sen } k_m x \quad (0 < x_0 < L_1) \quad .$$

Resolvendo a integral acima obtemos

$$b_m = \left(\frac{8\pi\sigma_x^2}{f_m^2} \right)^{1/4} \text{sen } k_m x_0 e^{-(k_m\sigma_x)^2} \quad . \quad (3.20)$$

Agora com as autofunções (3.17) e os coeficientes (3.20), podemos finalmente obter a evolução de um pacote de onda em um poço degrau infinito.

3.2.3 RESULTADOS

Essa seção trata da simulação numérica de um pacote de onda inicialmente na região ($R - I$) de um poço degrau infinito (veja a Fig. 3.7). Vamos mostrar aqui a influência da barreira no aprisionamento e na reconstrução desse pacote. Para isso vamos analisar dois casos: $\langle E \rangle \ll V_s$ e $\langle E \rangle \lesssim V_s$, onde $\langle E \rangle$ é a energia média do pacote de onda, fornecido pela seguinte equação

$$\langle E \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \Psi^*(x; 0) H \Psi(x; 0)$$

onde $\Psi(x; 0)$ é o pacote inicial descrito por uma distribuição *Gaussiano* (2.16), e H é o operador de energia. Considerando a construção do pacote de onda e adotando (para facilitar eventuais comparações) parâmetros semelhantes ao do poço quadrado infinito, apresentamos a seguinte tabela parâmetros:

Caso	L_1	L_2	V_s	$\langle E \rangle$	σ_x
$\langle E \rangle \ll V_s$	6	6	100	2,11	0,3
$\langle E \rangle \lesssim V_s$	3	3	2,5	1,8	0,35

Com isso, podemos construir suficientemente bem um pacote de onda com 50 níveis de energia, considerando também ($\hbar = M = 1$) onde

$$\sum_{m=1}^{50} |b_m|^2 \approx 1 \quad ,$$

para todos os conjuntos de parâmetros analisados.

A seguir mostraremos uma lista de figuras que sintetizam os resultados da dinâmica do pacote em um poço degrau infinito.

 Lista de figuras

3.8	-	Autovalores de Energia
3.9	-	Módulo quadrado da função de onda
3.10	-	Evolução do pacote de onda - $\langle E \rangle \ll V_s$
3.11	-	Evolução do pacote de onda - $\langle E \rangle \lesssim V_s$
3.12	-	Função de autocorrelação - $\langle E \rangle \ll V_s$
3.13	-	Função de autocorrelação - $\langle E \rangle \lesssim V_s$

A Fig. 3.8 (a) mostra os autovalores de energia para o poço degrau infinito, onde $\langle E \rangle \ll V_s$. Esses autovalores diferem pouco dos autovalores de energia de um poço quadrado infinito de largura $D = 6$, para $E_m < V_s$, e $D = 12$ para $E_m > V_s$. Na Fig. 3.8 (b) mostramos os autovalores de energia para $\langle E \rangle \lesssim V_s$. Nesse caso, os autovalores diferem pouco das energias obtidas para o poço quadrado infinito de largura $D = 6$, exceto para os três primeiros níveis de energia.

As Figs. 3.9 (a) - (f) mostram o módulo quadrado da função de onda $|\varphi_m|^2$, obtida com a Eq. (3.15), para o caso em que $\langle E \rangle \ll V_s$, onde as três primeiras figuras correspondem aos níveis de energia menores que a energia da barreira, já as Figs. 3.9 (d) - (f) correspondem a $E_m > V_s$. As Figs. 3.9 (g) - (m) mostram o módulo quadrado da função de onda para o caso em que $\langle E \rangle \lesssim V_s$, onde as Figs. 3.9 (g) - (i) correspondem aos três primeiros níveis de energia ($E_m < V_s$) e as Figs. 3.9 (j) - (m) para ($E_m > V_s$).

Podemos estudar agora a dinâmica da partícula analisando a evolução do pacote de onda e a função de autocorrelação. As Figs. 3.10 (a) - (p) mostram a evolução temporal do pacote de onda para o caso em que $\langle E \rangle \ll V_s$. Nessas condições a dinâmica da partícula é análoga ao caso já estudado no poço quadrado infinito — seção 3.1. As Figs. 3.11 (a) - (p) mostram a evolução temporal do pacote de onda para $\langle E \rangle \lesssim V_s$. Para esse caso podemos observar ainda o pacote de onda predominantemente aprisionado na região de menor potencial ($R - I$). Embora a condição de aprisionamento dependa significativamente da construção do pacote (dispersão σ_x), podemos dizer que pacotes de onda com energia média menor que a energia da barreira permanecem predominantemente aprisionados.

AS ESCALAS DE TEMPO

A Eq. (3.14) mostrou que os autovalores de energia não possuem uma dependência simples com relação aos números quânticos (equação transcendental). Essa relação mais complexa permite então a existência de outras escalas de tempo que não apareceram no poço quadrado infinito, como por exemplo, o tempo de super-reconstrução [36]. Como esse sistema apresenta um comportamento similar ao poço quadrado infinito (exceto para $E \approx V_s$), por

comparação podemos dizer que o tempo de super-reconstrução (T_{sr}) para o poço degrau infinito deve ser muito longo (mas não infinito).

As Figs. 3.12 (a) - (f) ilustram a função de autocorrelação para $\langle E \rangle \ll V_s$ e diferentes valores de x_0 . Nas Figs. 3.12 (a) e 3.12 (c) é possível identificar a presença de tempos de reconstrução clássica, e tempos de reconstrução total. O pacote de onda se reconstruindo em $t = T_{rc} = 5,87$ pode ser visto na Fig. 3.10 (m) e a reconstrução total na Fig. 3.10 (n) em $t = T_{tr} = 46,95$. As Figs. 3.13 (a) - (b) ilustram a função de autocorrelação para $\langle E \rangle \lesssim V_s$ e diferentes valores de x_0 . Para os tempos investigados até $t = 500$ não observamos a presença de reconstrução do pacote de onda. A Fig. 3.11 (o) ilustra uma “quase reconstrução”, pois o pacote de onda aparece ligeiramente distorcido.

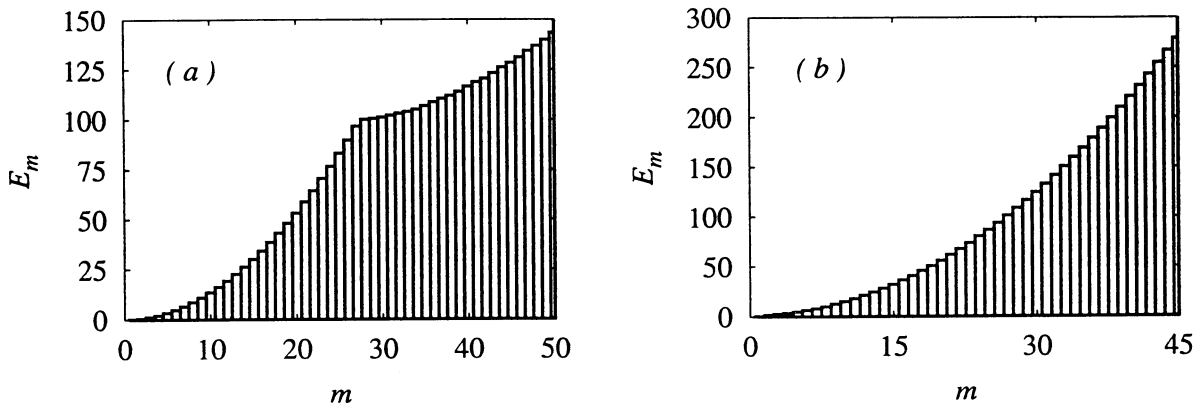


Fig. 3.8: Autovalores de energia para o poço degrau infinito. (a) parâmetros usados no caso em que $\langle E \rangle \ll V_s$. (b) parâmetros usados no caso em que $\langle E \rangle \lesssim V_s$.

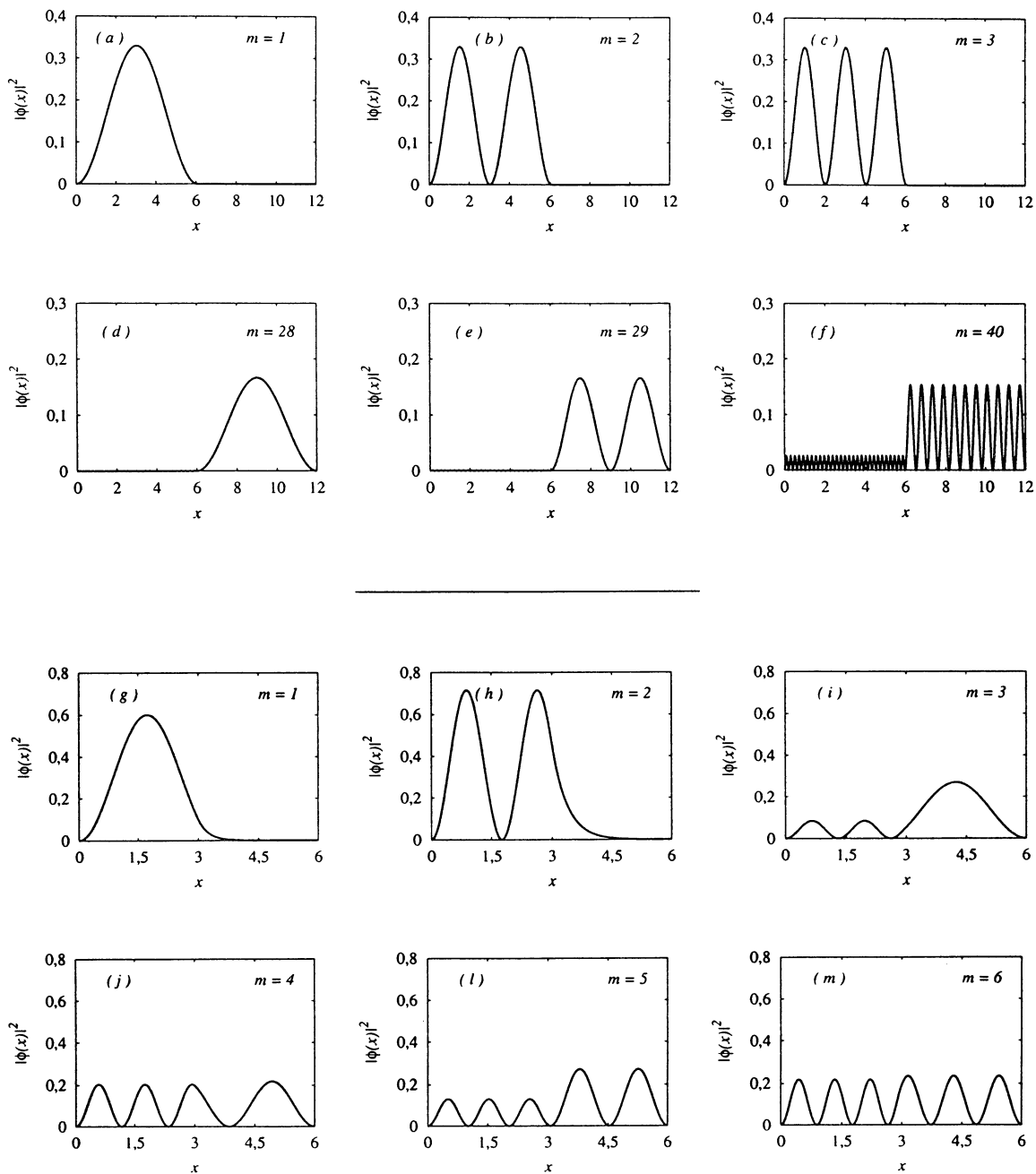


Fig. 3.9: Módulo quadrado da função de onda. (a)-(f) para o caso $\langle E \rangle \ll V_s$. (g)-(m) para o caso $\langle E \rangle \approx V_s$.

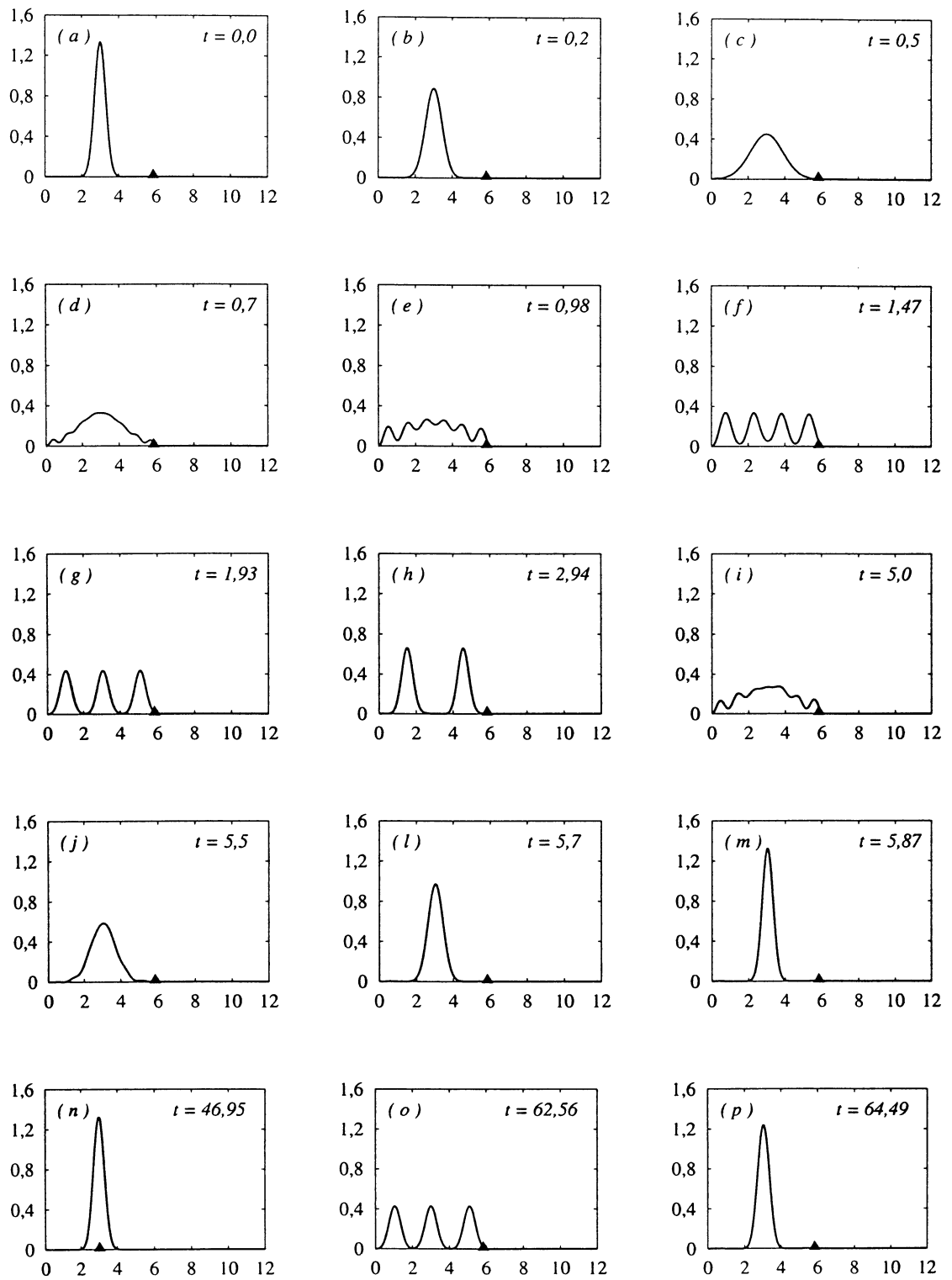


Fig. 3.10: Evolução do pacote de onda ($|\Psi|^2 \times x$) em um poço de grau infinito para $\langle E \rangle \ll V_s$ e $x_0 = 3$.

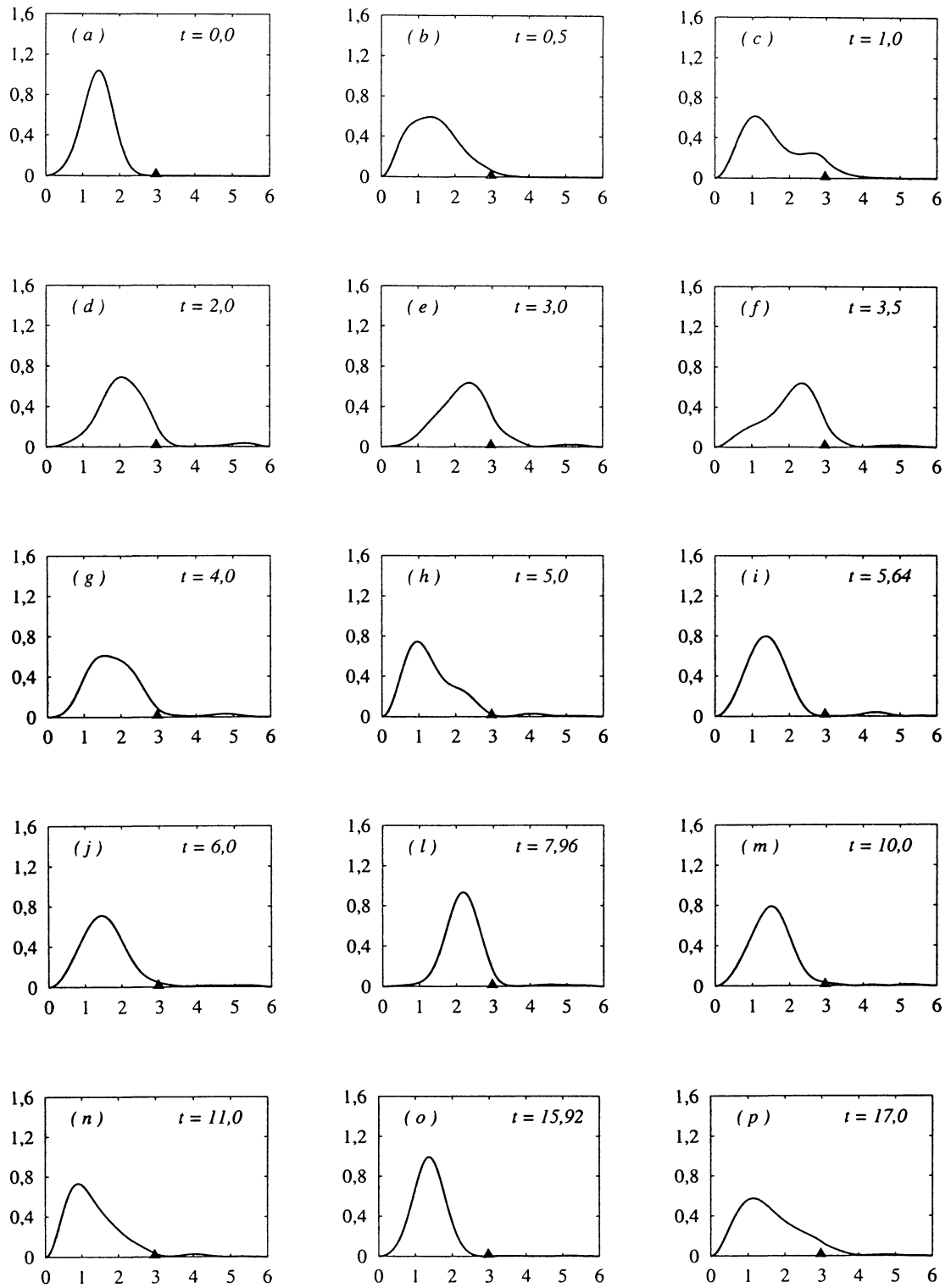
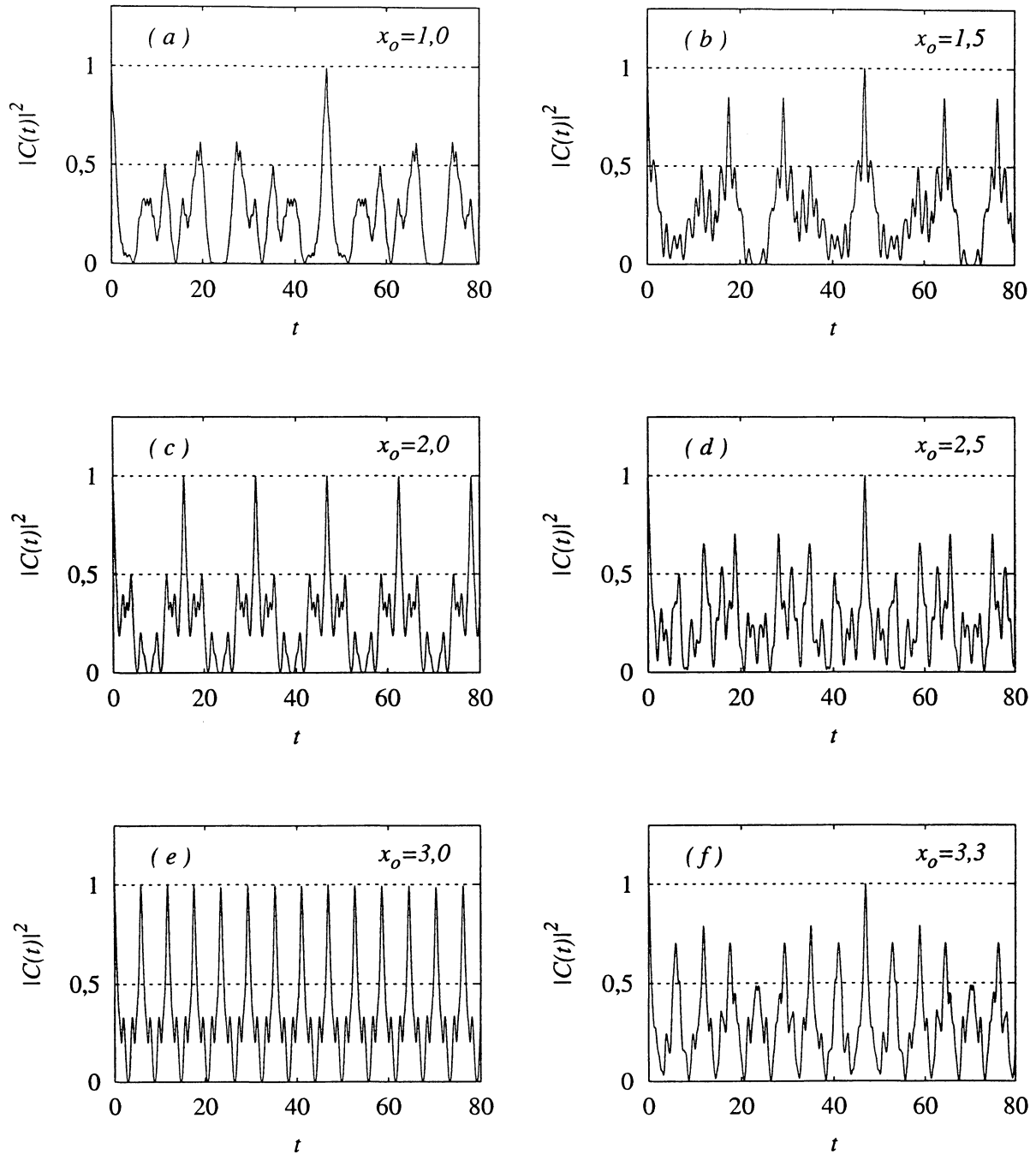


Fig. 3.11: Evolução do pacote de onda ($|\Psi|^2 \times x$) em um poço degrau infinito para $\langle E \rangle \approx V_s$ e $x_0 = 1,5$.

Fig. 3.12: Função de autocorrelação para $\langle E \rangle \ll V_s$.

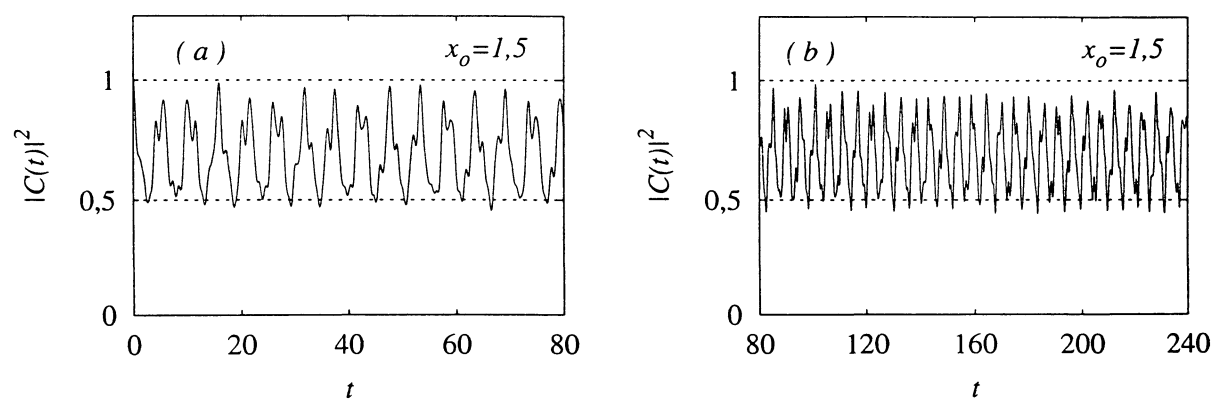


Fig. 3.13: Função de autocorrelação para $\langle E \rangle \lesssim V_s$.

3.3 POÇO DELTA INFINITO

O poço delta pode ser definido como

$$V(x) = \begin{cases} \lambda \delta(x - d_1) & (0 < x < D) \\ \infty & (0 \geq x \geq D) \end{cases}, \quad (3.21)$$

onde λ é uma constante que indica o quanto a barreira é permeável, $\delta(x - d)$ é a função delta de Dirac, d_1 e d_2 ($D = d_1 + d_2$) fornecem as dimensões (larguras) do poço. Esse potencial está representado na Fig. 3.14.

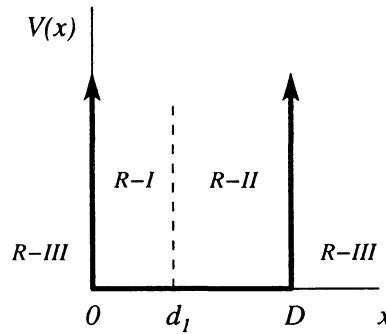


Fig. 3.14: Diagrama esquemático do poço delta infinito.

Utilizaremos a equação de *Schrödinger* independente do tempo (2.6) para descrever o comportamento de uma partícula sujeita ao potencial (3.21).

3.3.1 AUTOVALORES E AUTOFUNÇÕES

A discussão a seguir mostra uma solução analítica para os autovalores de energia e para as autofunções do poço delta.

Na região (*R - III*) a equação de *Schrödinger* só será satisfeita se $\phi(x) = 0$. Já no interior do poço, podemos escrever a seguinte equação diferencial

$$\phi_{xx} + k^2\phi = 0, \quad (3.22)$$

onde definimos $k^2 \equiv 2ME/\hbar^2$. A solução da Eq. (3.22) será

$$\phi(x) = \begin{cases} A \sin kx + B \cos kx & (R - I) \\ a \sin k(x - D) + b \cos k(x - D) & (R - II) \end{cases}. \quad (3.23)$$

Aplicando as condições de contorno — função de onda deve ser contínua e diferenciável — em $x = 0$, $x = d$ e $x = D$, temos

$$\begin{aligned} \phi(0) &= 0, & \phi(D) &= 0, \\ \phi(d_1^-) &= \phi(d_1^+), & \phi'(d_1^+) - \phi'(d_1^-) &= \frac{2M\lambda}{\hbar^2}\phi(d_1). \end{aligned} \quad (3.24)$$

Veja o Apêndice A para uma demonstração da condição de contorno (3.24), que mostra a descontinuidade da derivada primeira da função de onda. A partir das Eqs. (3.23) e (3.24) obtemos

$$B = b = 0 \quad ,$$

onde

$$a = -\frac{\text{sen } kd_1}{\text{sen } kd_2} A \quad \text{e} \quad ak \cos kd_2 - Ak \cos kd_1 = \frac{2M\lambda}{\hbar^2} A \text{sen } kd_1 \quad (3.25)$$

das Eqs. (3.25) podemos obter a seguinte equação transcendental

$$k \cos kd_1 \text{sen } kd_2 + k \text{sen } kd_1 \cos kd_2 + \frac{2M\lambda}{\hbar^2} \text{sen } kd_1 \text{sen } kd_2 = 0 \quad . \quad (3.26)$$

Resolvendo a Eq. (3.26) em k , isto é, encontrando as raízes k_n da equação, podemos determinar os autovalores de energia do sistema, através de

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2M} k_n^2 \quad .$$

Esse procedimento em geral é feito numericamente.

As constantes nas autofunções (3.23) podem ser obtidas através da relação entre A e a , dada por (3.25), e da condição de normalização. Com isso determinamos que

$$A = A_n = \frac{1}{\sqrt{f_n}} \quad ,$$

onde

$$f_n = \frac{d_1}{2} - \frac{\text{sen } 2k_n d_1}{4k_n} + \frac{1}{4k_n} \frac{\text{sen}^2 k_n d_1}{\text{sen}^2 k_n d_2} (2k_n d_2 - \text{sen } 2k_n d_2) \quad .$$

Assim obtemos uma expressão final para as autofunções do poço delta

$$\phi_n(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{f_n}} \text{sen } k_n x & (R - I) \\ \frac{1}{\sqrt{f_n}} \frac{\text{sen } k_n d_1}{\text{sen } k_n d_2} \text{sen } k_n (D - x) & (R - II) \\ 0 & (R - III) \end{cases} \quad . \quad (3.27)$$

Os gráficos das autofunções podem ser vistos nas Figs. 3.16.

3.3.2 PACOTE DE ONDA

A evolução temporal de um pacote de onda pode ser obtida através das equações

$$\Psi(x; t) = \sum_n a_n \phi_n(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \quad \text{e} \quad |\Psi|^2 = \Psi^*(x; t) \Psi(x; t) \quad , \quad (3.28)$$

onde os coeficientes a_n são dados por

$$a_n = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \phi_n(x) \Psi^*(x; 0) \quad .$$

Considerando o pacote de onda inicial $\Psi(x; 0)$, descrito por uma distribuição *Gaussiana* e $\phi_n(x)$ a base do poço delta (3.27), temos

$$a_n = \int_0^{d_1} dx g(x) A_n \text{sen } k_n x + \int_{d_1}^D dx g(x) A_n \frac{\text{sen } k_n d_1}{\text{sen } k_n d_2} \text{sen } k_n (D - x) \quad .$$

Se o pacote de onda for suficientemente estreito, isto é, se $g(0) \approx g(D) \approx 0$ então podemos aproximar a_n por

$$a_n = \begin{cases} \int_{-\infty}^{+\infty} dx g(x) A_n \text{sen } k_n x & (0 < x_0 < d_1) \\ \int_{-\infty}^{+\infty} dx g(x) A_n \frac{\text{sen } k_n d_1}{\text{sen } k_n d_2} \text{sen } k_n (D - x) & (d_1 < x_0 < D) \end{cases} \quad .$$

As integrais acima agora podem ser encontradas facilmente nas Ref. [39, 40], cujas soluções são

$$a_n = (8\pi\sigma_x^2)^{1/4} A_n e^{-(k_n \sigma_x)^2} \begin{cases} \text{sen } k_n x_0 & (0 < x_0 < d_1) \\ \frac{\text{sen } k_n d_1}{\text{sen } k_n d_2} \text{sen } k_n (D - x_0) & (d_1 < x_0 < D) \end{cases} \quad .$$

Com os coeficientes da expansão a_n podemos estudar agora a evolução do pacote de onda através das Eqs. (3.28). Esse procedimento será feito na próxima seção.

3.3.3 RESULTADOS

Essa seção trata dos procedimentos e dos resultados numéricos para o poço delta, onde nosso objetivo principal é estudar os efeitos da presença da barreira do tipo delta de *Dirac* no aprisionamento da partícula [41].

O pacote de onda considerado foi construído com 50 níveis de energia do poço delta e com isso foi possível gerar um pacote de onda descrito suficientemente bem por uma distribuição *Gaussiana*, onde usamos também ($\hbar = 1$ e $M = 1/2$). Os 50 estados considerados foram suficientes para representar um conjunto completo, tal que

$$\sum_{n=1}^{50} |a_n|^2 = 0,999996 \approx 1 \quad (x_0 = 1) \quad .$$

A dinâmica do pacote foi estudada modificando-se os parâmetros λ , d_1 e D . Apresentamos a seguir os três casos investigados:

- Caso I : Para $0 < \lambda < 1$ e $d_1, D \in \mathbb{Q}$;
- Caso II : Para $\lambda \gg 1$ e $d_1, D \in \mathbb{Q}$;
- Caso III : Para $\lambda \gg 1$ e $d_1, D \in \text{Irracionais}$;

Abaixo mostramos uma tabela com os valores dos parâmetros, onde $x_0 = 1$ e $\sigma_x = 1/5$ foram utilizados para os três casos.

Casos	λ	d_1	D
I	0,1	3	6
II	80	2	6
III	80	$\sqrt{5}$	$\sqrt{37}$

Podemos sintetizar os resultados da dinâmica da partícula na seguinte lista de figuras:

Lista de figuras	
3.15	– Funções transcendentais e autovalores de energia
3.16	– Módulo quadrado da função de onda
3.17	– Evolução do pacote de onda (Caso I)
3.18	– Evolução do pacote de onda (Caso II)
3.19	– Evolução do pacote de onda (Caso III)
3.20	– Função de autocorrelação

As Figs. 3.15 (a) - (c) mostram os gráficos da função transcendental (3.26) para os três casos estudados, onde as intersecções entre a função e o eixo- x fornecem as raízes k_n da Eq. (3.26). Os autovalores de energia podem ser obtidos diretamente de ($E_n = \hbar^2 k_n^2 / 2M$). Os autovalores de energia apresentam o mesmo comportamento qualitativo para os três casos investigados, mostraremos então o gráfico dos autovalores de energia para o caso III — Fig. 3.15 (d).

As autofunções foram obtidas diretamente da Eq. (3.27) onde o módulo quadrado da função de onda é mostrado na Fig. 3.16. Nessa figura a primeira coluna — Figs. 3.16 (a) - (e) — mostra o módulo quadrado da função de onda para o caso I. Note que essas figuras são muito semelhantes as obtidas para o poço quadrado infinito, exceto para o primeiro nível de energia onde podemos observar uma pequena distorção. As Figs. 3.16 (f) - (j) — segunda coluna — podemos observar o módulo quadrado da função de onda para o caso II, onde é possível ver, para alguns números quânticos, a autofunção em ambos os lados do poço. Já o módulo quadrado da função de onda para o caso III — terceira coluna — é sempre nulo em pelo menos um dos lados do poço, esse fato pode ser visto nas Figs. 3.16 (l) - (p), onde o pacote de onda é construído com a superposição dessas autofunções.

Podemos estudar agora a dinâmica da partícula mediante análise da evolução temporal do pacote de onda e da função de autocorrelação. As Figs. 3.17 (a) - (p) mostram a

evolução do pacote de onda quando a barreira atua como uma perturbação no sistema — caso I. Podemos observar em várias figuras o pacote de onda se dividindo em dois e três picos e as Figs. 3.17 (*l*) e (*n*) mostram uma “quase reconstrução” do pacote de onda e a Fig. 3.17 (*m*) ilustra o pacote se dividindo em dois picos de quase mesma altura. Uma reconstrução pode ser vista na Fig. 3.17 (*p*). As Figs. 3.18 (*a*) - (*p*) mostram a evolução do pacote de onda para o caso II. Podemos ver nessa seqüência de imagens o pacote de onda seguindo através da barreira, mesmo quando a presença da barreira é significativa. Podemos ver também nesse caso, que o pacote de onda não se reconstrói (pelo menos até o tempo de 5000), embora esse fato fique mais evidente mediante análise da função de autocorrelação. As Figs. 3.19 (*a*) - (*p*) mostram a evolução temporal do pacote de onda para o caso III. Nesse caso podemos observar o pacote de onda predominantemente aprisionado na ($R - I$). Para esse conjunto de parâmetros também não foi possível observar a reconstrução do pacote de onda em um intervalo de tempo analisado de 5000.

AS ESCALAS DE TEMPO

A Eq. (3.26) mostrou que os autovalores de energia para o poço delta não possuem uma dependência simples com relação aos números quânticos (equação transcendental), onde os autovalores de energia aproximam-se muito do comportamento visto no poço quadrado infinito, esse fato indica o aparecimento de super-reconstrução, mas que para esse sistema é demasiadamente longo (mas não infinito).

As Figs. 3.20 (*a*) - (*d*) mostram o comportamento da função de autocorrelação para o caso I. Podemos ver na Fig. 3.20 (*b*) o aparecimento de uma reconstrução clássica em $t = 71, 18$, as demais figuras (especialmente a Fig. 3.20 (*d*) por se tratar de uma ampliação da Fig. 3.20 (*c*)) mostra o aparecimento de uma reconstrução total em $t = 143, 23$. A comparação desse resultado com o tempo de reconstrução total em um poço quadrado infinito dado pela Eq. (3.9), mostra que a presença da delta não destrói as reconstruções, apenas retarda seu aparecimento. As Figs. 3.20 (*e*) e (*f*), caso II e III respectivamente, o tempo de reconstrução total não pode ser observado (tempo muito longo).

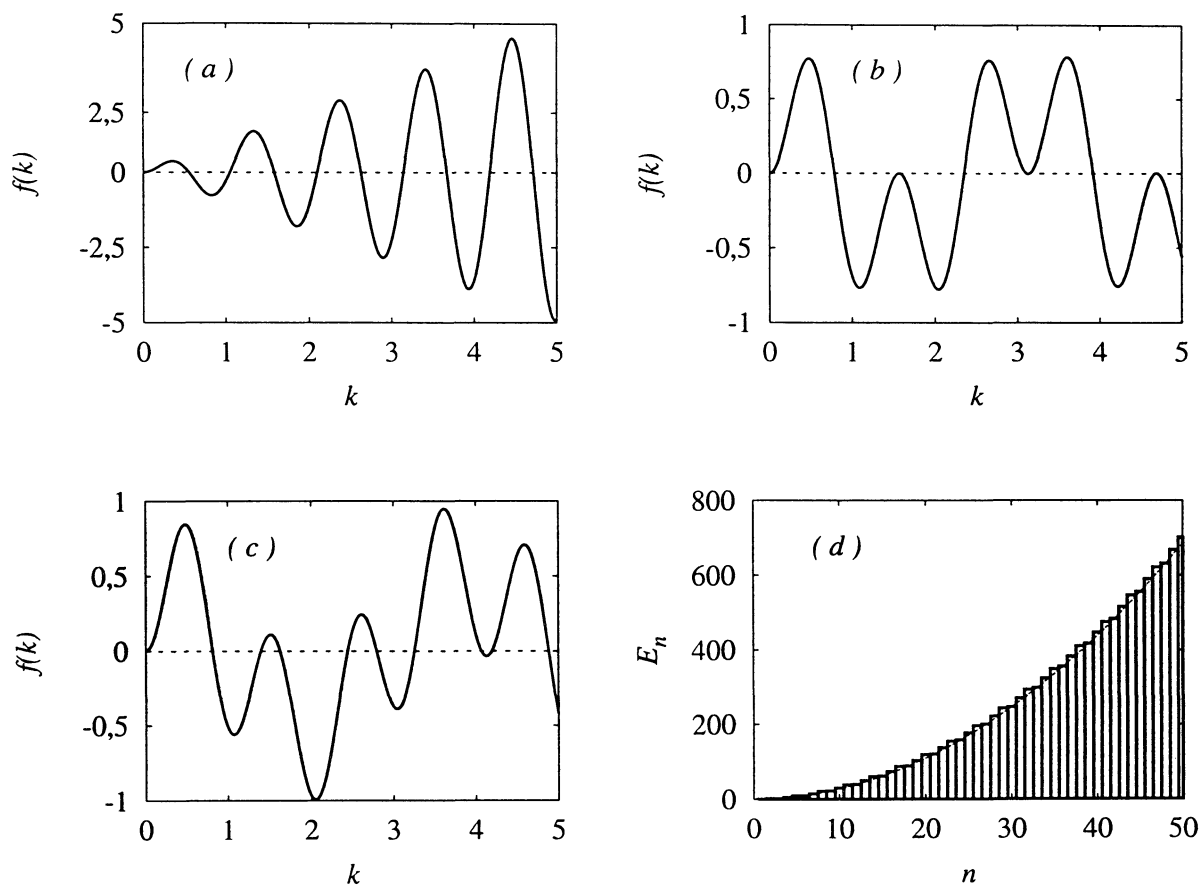


Fig. 3.15: Funções transcendentais. (a) Caso I. (b) Caso II. (c) Caso III. (d) Autovalores de energia típicos para poço delta (Caso III).

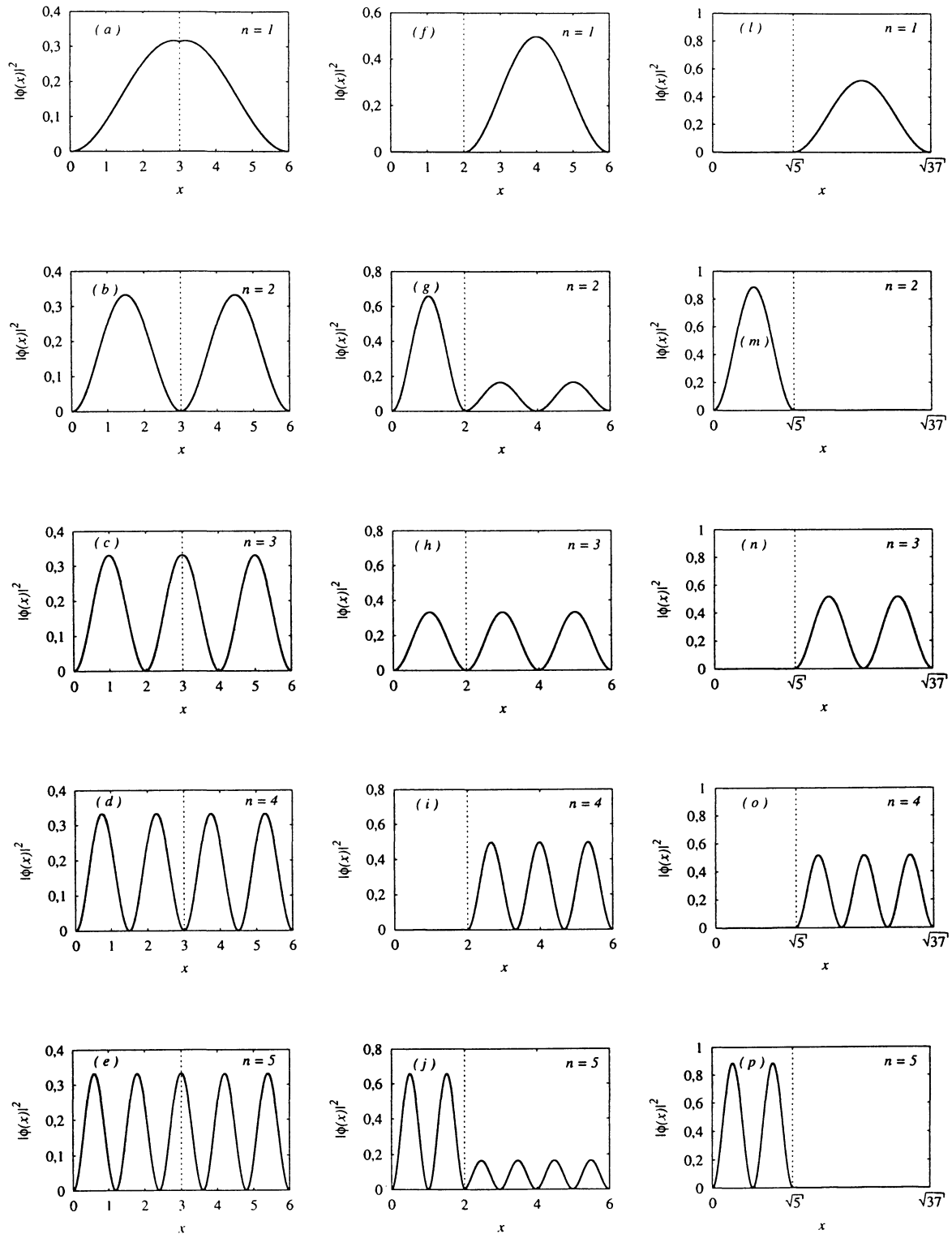


Fig. 3.16: Módulo quadrado da função de onda para o poço delta. (a)-(e) Caso I. (f)-(j) Caso II. (l)-(p) Caso III.

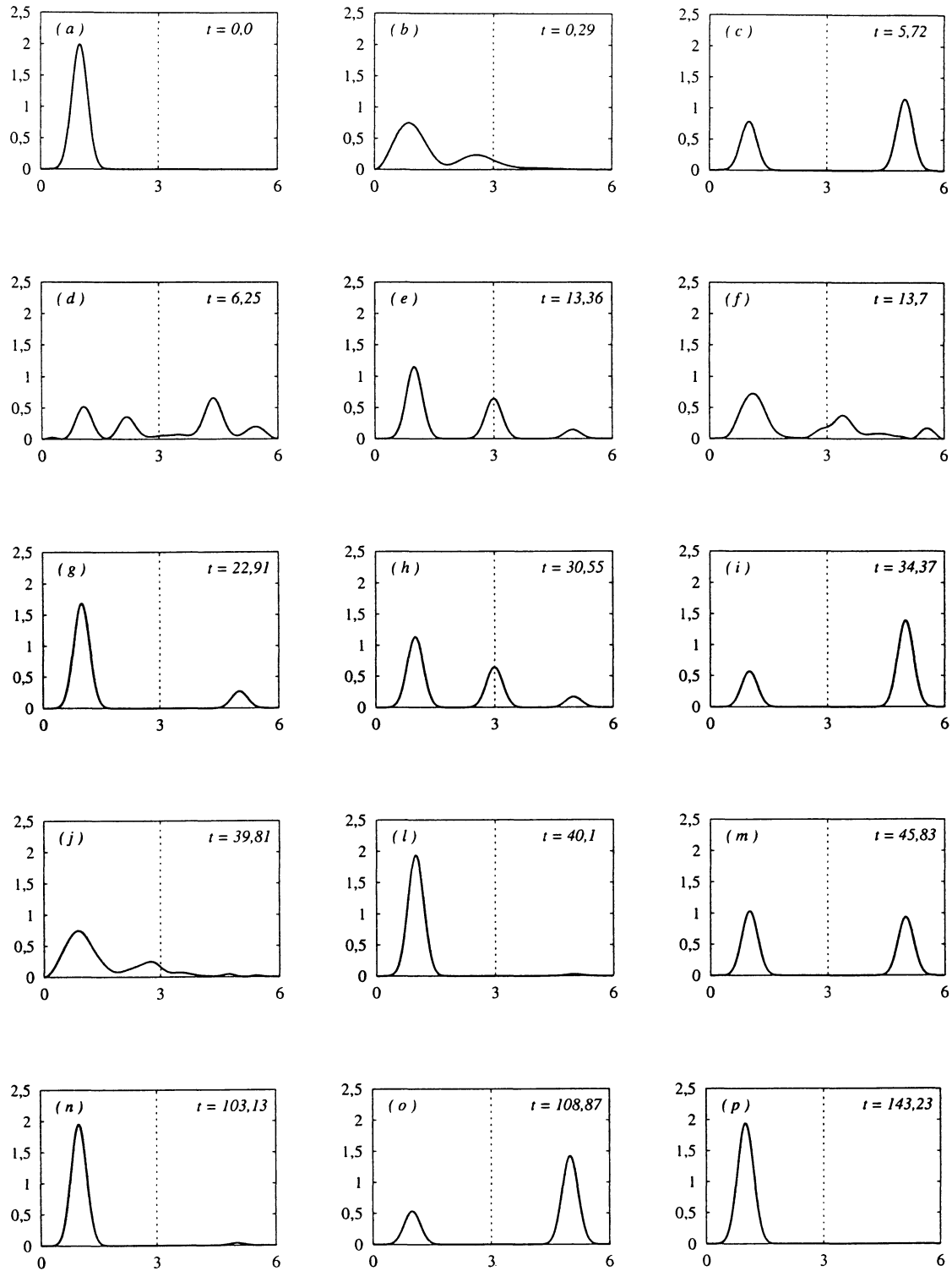


Fig. 3.17: Evolução do pacote de onda $(|\Psi|^2 \times x)$ para o poço delta infinito (Caso I) e $x_0 = 1$.

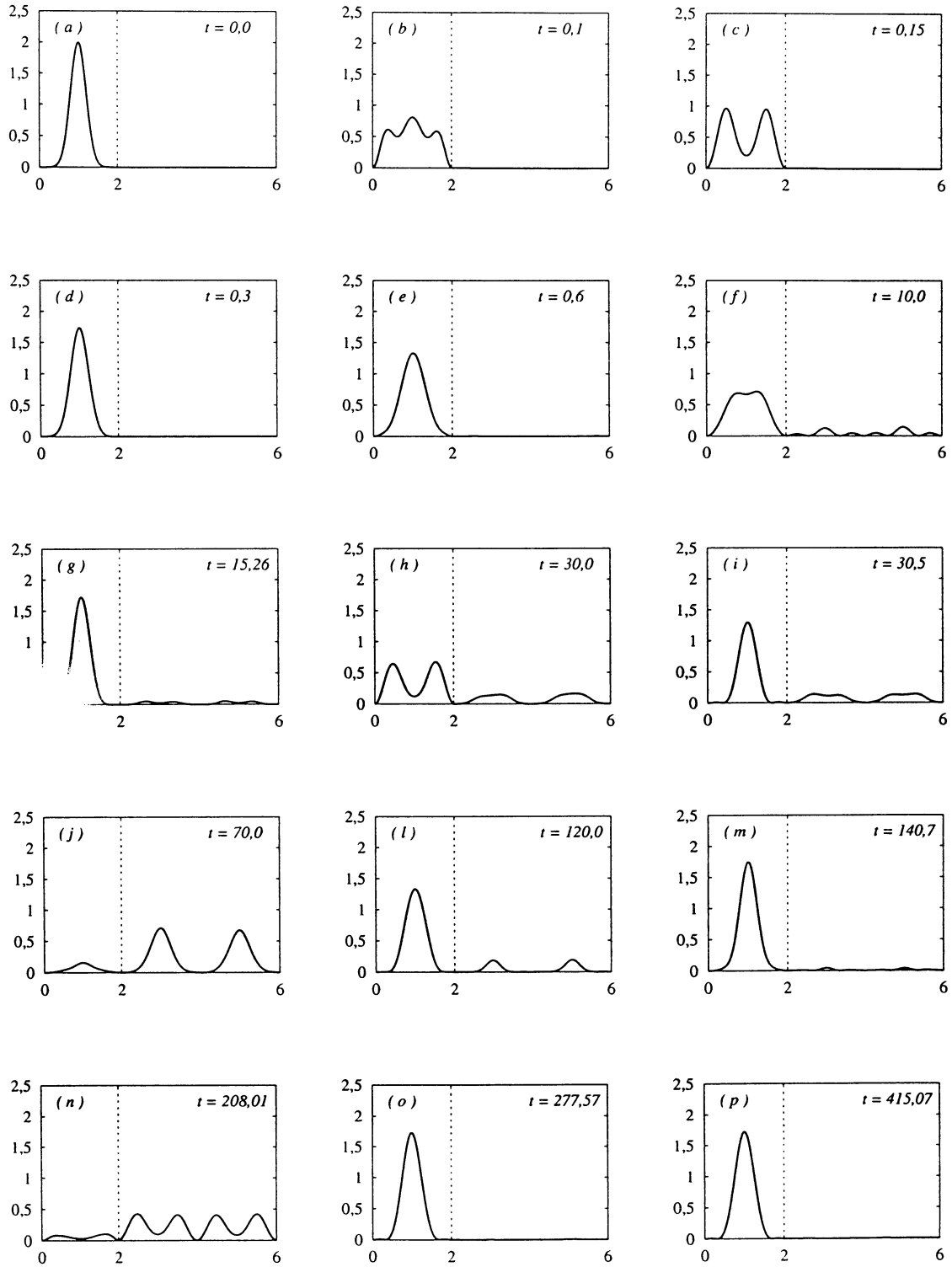


Fig. 3.18: Evolução do pacote de onda ($|\Psi|^2 \times x$) para o poço delta infinito (Caso II) e $x_0 = 1$.

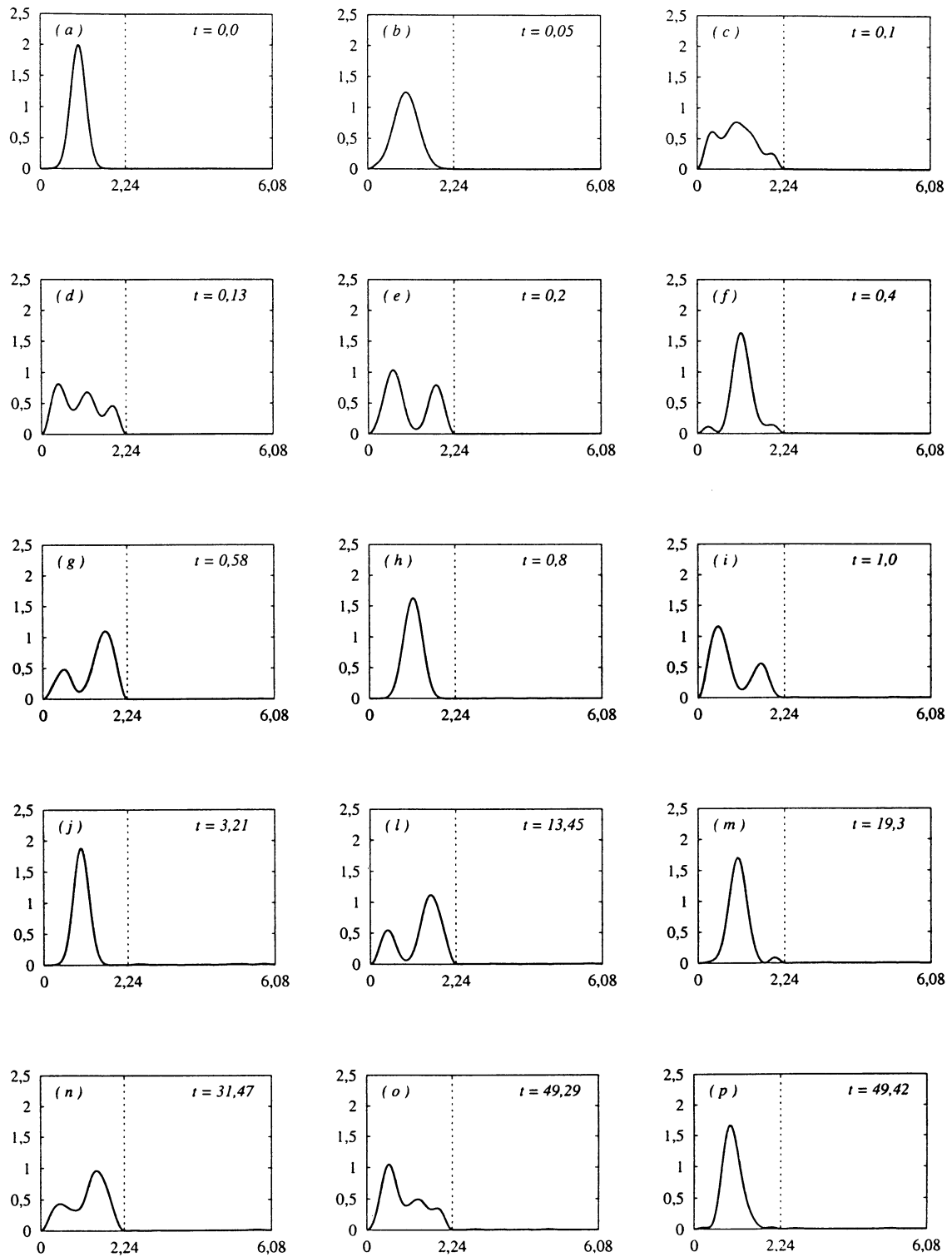


Fig. 3.19: Evolução do pacote de onda ($|\Psi|^2 \times x$) para o poço delta infinito (Caso III) e $x_0 = 1$.

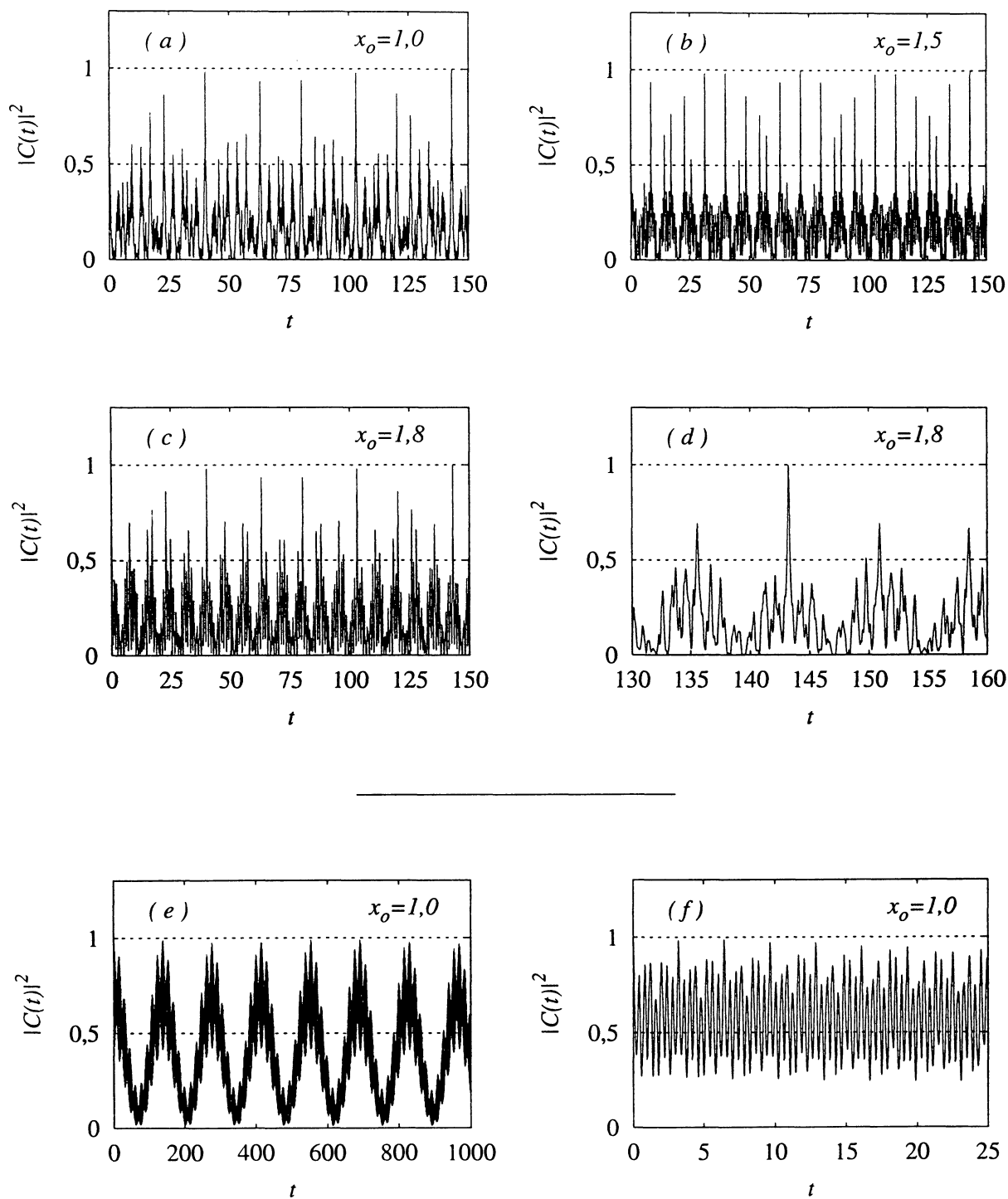


Fig. 3.20: Função de Autocorrelação. (a)-(d) Caso I. (e) Caso II. (f) Caso III.

3.4 POÇO DEGRAU ASSIMÉTRICO INFINITO

Todos os sistemas apresentados nessa dissertação tem como fechamento um desenvolvimento numérico. Em alguns problemas específicos, como no poço degrau em uma e duas dimensões, há a necessidade de diagonalizarmos o operador de energia do sistema afim de obtermos os autovalores de energia e as autofunções. Portanto, essa seção se propõem a testar o método de diagonalização de matrizes para um caso onde o *Hamiltoniano* não é diagonal, mas que apresenta soluções exatas. A Fig. 3.21 mostra o diagrama esquemático da energia potencial para o poço degrau assimétrico infinito, que será tratado nessa seção [19, 42]. Esse procedimento indicará também a dimensão da matriz a ser diagonalizada para que o sistema possa ser considerado um conjunto completo. Esse problema é de particular interesse na representação de sistemas sob a influência de campos elétrico (efeito Stark) [43, 44] que nesse caso é feito através de um potencial linear.

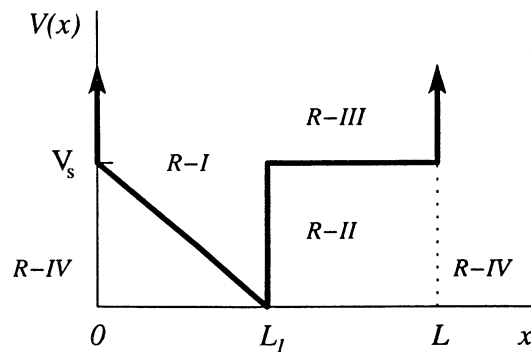


Fig. 3.21: Diagrama esquemático da energia potencial para o poço degrau assimétrico.

3.4.1 SOLUÇÃO EXATA

O potencial que define esse sistema é dado por

$$V(x) = \begin{cases} \frac{V_s}{L_1}(L_1 - x) & (0 < x < L_1) \\ V_s & (L_1 \leq x < L) \\ \infty & (0 \geq x \geq L) \end{cases}$$

onde V_s é altura da barreira de energia e $L = L_1 + L_2$.

O principal objetivo é obter os autovalores de energia para esse sistema, e para isso precisamos resolver a equação de *Schrödinger* independente do tempo (2.4).

AUTOVALORES DE ENERGIA

Podemos reescrever a equação de *Schrödinger* (2.4), de tal forma que obtemos agora três equações diferenciais definidas por

$$\begin{aligned} \varphi_{xx} - \beta^3(\gamma - x)\varphi &= 0 & (R - I) , & & \varphi_{xx} - q^2\varphi &= 0 & (R - II) , \\ \varphi_{xx} + Q^2\varphi &= 0 & (R - III) , & & & & & & (3.29) \end{aligned}$$

onde definimos $k^2 \equiv 2ME/\hbar^2$, $\alpha^2 \equiv 2MV_s/\hbar^2$, $\beta^3 \equiv \alpha^2/L_1$, $\gamma \equiv (\alpha^2 - k^2)/\beta^3$, $q^2 \equiv \alpha^2 - k^2$ e $Q^2 \equiv k^2 - \alpha^2$.

Nosso problema consiste em encontrar a solução dessas três equações diferenciais, já que a solução em $(R - IV)$ é simplesmente $\varphi(x) = 0$. As soluções das Eqs. (3.29) para $\xi \equiv \beta(\gamma - x)$ será

$$\varphi(x) = \begin{cases} a \text{Ai}(\xi) + b \text{Bi}(\xi) & (R - I) \\ c \sinh q(x - L) + d \cosh q(x - L) & (R - II) (E < V_s) \\ C \sin Q(x - L) + D \cos Q(x - L) & (R - III) (E > V_s) \\ 0 & (R - IV) \end{cases} , \quad (3.30)$$

onde *Ai* e *Bi* são as funções de *Airy*, veja o Apêndice B.

Aplicando as condições de contorno — função de onda contínua — em $x = 0$ e $x = L$, obtemos as seguintes equações

$$\begin{aligned} a \text{Ai}(\xi_0) + b \text{Bi}(\xi_0) &= 0 , & c \sinh 0 + d \cosh 0 &= 0 , \\ C \sin 0 + D \cos 0 &= 0 , \end{aligned}$$

onde determinamos que

$$d = D = 0 .$$

Para $x = L_1$ a função de onda deve ser contínua e diferenciável, então

$$\begin{aligned} a \text{Ai}(\xi_{L_1}) + b \text{Bi}(\xi_{L_1}) &= -c \sinh qL_2 , & a \text{Ai}'(\xi_{L_1}) + b \text{Bi}'(\xi_{L_1}) &= \frac{cq}{\beta} \cosh qL_2 , \\ a \text{Ai}(\xi_{L_1}) + b \text{Bi}(\xi_{L_1}) &= -C \sin QL_2 , & a \text{Ai}'(\xi_{L_1}) + b \text{Bi}'(\xi_{L_1}) &= \frac{CQ}{\beta} \cosh QL_2 . \end{aligned}$$

Desse sistema obtemos as seguintes equações para os autovalores de energia

$$\begin{aligned} \beta Z'(\xi_0, \xi_{L_1}) \sinh qL_2 + q Z(\xi_0, \xi_{L_1}) \cosh qL_2 &= 0 & (E < V_s) , \\ \beta Z'(\xi_0, \xi_{L_1}) \sin QL_2 - Q Z(\xi_0, \xi_{L_1}) \cos QL_2 &= 0 & (E > V_s) , \end{aligned} \quad (3.31)$$

onde

$$\begin{aligned} Z(\xi_0, \xi_{L_1}) &= \text{Ai}(\xi_{L_1}) \text{Bi}(\xi_0) - \text{Ai}(\xi_0) \text{Bi}(\xi_{L_1}) , \\ Z'(\xi_0, \xi_{L_1}) &= \text{Ai}(\xi_0) \text{Bi}'(\xi_{L_1}) - \text{Ai}'(\xi_{L_1}) \text{Bi}(\xi_0) . \end{aligned}$$

Resolvendo as Eqs. (3.31) em k — pois q , v , ξ_0 e ξ_{L_1} dependem de k — podemos finalmente encontrar os autovalores de energia do sistema através da equação

$$E_m = \frac{\hbar^2}{2M} k_m^2 \quad .$$

As soluções da equação de *Schrödinger* nos forneceu as autofunções do poço de grau assimétrico — Eq. (3.30)—, podemos agora estudar o comportamento dessas autofunções, — pelo menos os aspectos gerais, já que não temos particular interesse em obter uma expressão normalizada para essas autofunções³. Um caso particularmente interessante da função de *Airy* [39], é o diferentes comportamentos para argumentos positivos e negativos. Quando o argumento da função é negativo, a função de *Airy* comporta-se de forma análoga as funções trigonométricas, enquanto que para argumentos positivos vemos um comportamento semelhante à exponencial — veja a Fig. B.1 (a).

As soluções (3.30) mostram que na região clara em $(R - I)$ — veja a Fig. 3.22 — ξ é sempre negativo, portanto a função de onda nessa região comporta-se semelhante a uma função trigonométrica. Já na região hachurada, ξ é positivo e nesse caso a função de onda tem um comportamento análogo a função exponencial.

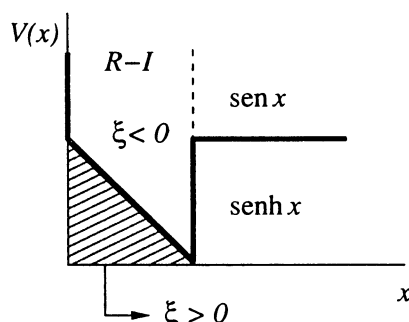


Fig. 3.22: Aspectos gerais do comportamento da função de onda.

3.4.2 SOLUÇÃO NUMÉRICA

O desenvolvimento a seguir mostra a solução numérica para os autovalores de energia do poço de grau assimétrico, que será comparada posteriormente com os resultados analíticos obtidos na seção 3.4.1.

Consideremos então uma partícula sujeita a uma energia potencial de um poço de grau

³Para obter as constantes de normalização precisamos resolver equações que envolvem integrais da função de *Airy*, esse procedimento não será realizado aqui.

infinito — Eq. (3.10). Considere também um potencial de interação descrito por

$$V(x) = \begin{cases} \frac{V_s}{L_1}(L_1 - x) & (0 \leq x \leq L_1) \\ 0 & (L_1 > x > L) \end{cases} . \quad (3.32)$$

O Hamiltoniano do sistema será

$$H = H_0 + V \quad ,$$

onde H_0 é o operador de energia do poço degrau infinito, e V é o operador de “interação”. Nesse caso temos

$$H_0 |\varphi_m^{(0)}\rangle = E_m^{(0)} |\varphi_m^{(0)}\rangle \quad ,$$

onde $E_m^{(0)}$ e $\{|\varphi_m^{(0)}\rangle\}$ são os autovalores de energia e os “kets” de base, do poço degrau infinito. Vamos representar agora o operador de energia H na base de H_0 , então

$$\langle \varphi_{m''}^{(0)} | H | \varphi_{m'}^{(0)} \rangle = E_{m'}^{(0)} \delta_{m''m'} + \langle \varphi_{m''}^{(0)} | V | \varphi_{m'}^{(0)} \rangle \quad .$$

$$H_{m''m'} = E_{m'}^{(0)} \delta_{m''m'} + V_{m''m'} \quad (3.33)$$

Na equação acima, $H_{m''m'}$ são os elementos de matriz que compõem o *Hamiltoniano* do sistema e são dados em termos dos números quânticos m'' e m' e $V_{m''m'}$ são os elementos que compõem a matriz de “interação”, esses elementos podem ser escritos como

$$V_{m''m'} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi_{m''}^{*(0)}(x) V \varphi_{m'}^{(0)}(x) \quad , \quad (3.34)$$

onde $\varphi_m^{(0)}$ são as autofunções do poço degrau infinito (3.17) e V é fornecido pela Eq. (3.32). A solução da integral (3.34) será

$$V_{m''m'} = \begin{cases} \frac{V_s}{4L_1 k_{m'}^2 f_{m'}} (L_1^2 k_{m'} - \text{sen}^2 k_{m'} L_1) & (m'' = m') \\ \frac{V_s}{4L_1 \sqrt{f_{m''} f_{m'}}} \left(\frac{2}{\Delta k_1^2} \text{sen}^2 \frac{\Delta k_1 L_1}{2} - \frac{2}{\Delta k_2^2} \text{sen}^2 \frac{\Delta k_2 L_1}{2} \right) & (m'' \neq m') \end{cases} \quad ,$$

onde $\Delta k_1 \equiv k_{m'} - k_{m''}$ e $\Delta k_2 \equiv k_{m'} + k_{m''}$. Com os autovalores de energia do poço degrau infinito e a matriz de interação, podemos construir H através da Eq. (3.33), cuja representação matricial é

$$H = \begin{pmatrix} E_1^{(0)} + V_{11} & V_{12} & V_{13} & \cdots & V_{1m'} \\ V_{21} & E_2^{(0)} + V_{22} & V_{23} & \cdots & V_{2m'} \\ V_{31} & V_{32} & E_3^{(0)} + V_{33} & \cdots & V_{3m'} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ V_{m''1} & V_{m''2} & V_{m''3} & \cdots & E_{m'}^{(0)} + V_{m''m'} \end{pmatrix}$$

AUTOVALORES E AUTOFUNÇÕES

Os autovalores de energia do sistema podem ser encontrados através do método da expansão — veja a seção 2.3 e a Ref. [4] —, ou seja, através da solução da equação de autovalores

$$\det(H - E\mathbb{1}) = 0 \quad . \quad (3.35)$$

Esse procedimento, em geral, é feito numericamente devido as dimensões da matriz H . Rotinas numéricas para esses fins podem ser encontradas em [45]. Após a obtenção dos autovalores de energia podemos também encontrar a matriz $\{C_{m''m'}\}$ que diagonaliza H .

As autofunções do sistema podem ser obtidas através da combinação linear dos autoestados de base

$$\varphi_{m'}(x) = \sum_{m''} C_{m''m'} \varphi_{m''}^{(0)}(x) \quad ,$$

onde os coeficientes da expansão $C_{m''m'}$ são obtidos diretamente da diagonalização de H a partir da solução da Eq. (3.35).

3.4.3 COMPARAÇÃO DOS RESULTADOS

A concordância entre os autovalores de energia obtidos numericamente e analiticamente mostraram que o método da expansão fornece resultados suficientemente coerentes. Alguns autovalores de energia são mostrados na Tab. 3.2. Precisamos testar agora a eficiência do método, ou seja, vamos testar a convergência dos níveis de energia.

m	Exato	Numérico	Erro (%)	m	Exato	Numérico	Erro (%)
1	3,48336005	3,48602748	0,07651983	11	22,0909843	22,0909882	0,00001739
2	6,43827772	6,44863367	0,16059008	12	22,0939331	22,0939522	0,00008311
3	8,85581112	8,87644196	0,23241742	13	22,0988388	22,0988941	0,00025337
4	10,9907379	11,0237608	0,29955858	14	22,1057243	22,1058083	0,00037751
5	12,9404373	12,9878321	0,36491665	15	22,1145687	22,1147003	0,00059891
6	14,7549686	14,8187313	0,43028518	16	22,1253872	22,1255646	0,00080512
7	16,4640560	16,5465031	0,49827474	17	22,1381912	22,1384029	0,00095766
8	18,0881824	18,1928272	0,57520288	18	22,1529560	22,1532154	0,00117038
9	19,6549435	19,7904854	0,68488198	19	22,1697102	22,1699982	0,00129554
10	21,2278538	21,4141712	0,87006974	20	22,1884308	22,1887512	0,00144464

Tab. 3.2: Matriz 1000×1000 .

O procedimento usado aqui é baseado exclusivamente em testes. Vamos supor que estejamos interessados em construir um pacote de onda com 22 níveis de energia. A per-

gunta que precisamos responder é: qual deve ser a dimensão do operador de energia a ser diagonalizado?

A Tab. 3.3 mostra os números quânticos e o erro percentual relativo entre os níveis de energia calculados numericamente e analiticamente. O erro percentual foi calculado pela fórmula:

$$E_{\%} = \left| \frac{E_{ex} - E_{num}}{E_{ex}} \right| \times 100\%$$

onde $E_{\%}$ é o erro percentual, e E_{ex} e E_{num} são os autovalores de energia exato e numérico respectivamente. Para H com dimensões maiores que 500 o erro relativo obtido até o número quântico 22 foi inferior a 0,000001%.

m	25	32	63	125	250	400
1	$0,3 \times 10^{-2}$	$0,2 \times 10^{-2}$	$0,2 \times 10^{-2}$	$0,6 \times 10^{-3}$	$0,4 \times 10^{-4}$	$0,7 \times 10^{-5}$
2	$0,3 \times 10^{-2}$	$0,3 \times 10^{-2}$	$0,2 \times 10^{-2}$	$0,5 \times 10^{-3}$	$0,3 \times 10^{-4}$	
3	$0,4 \times 10^{-2}$	$0,4 \times 10^{-2}$	$0,2 \times 10^{-2}$	$0,5 \times 10^{-3}$	$0,2 \times 10^{-4}$	
4	$0,8 \times 10^{-2}$	$0,8 \times 10^{-2}$	$0,3 \times 10^{-2}$	$0,6 \times 10^{-3}$	$0,2 \times 10^{-4}$	
5	$0,1 \times 10^{-1}$	$0,1 \times 10^{-1}$	$0,5 \times 10^{-2}$	$0,7 \times 10^{-3}$	$0,2 \times 10^{-4}$	
6	$0,3 \times 10^{-1}$	$0,3 \times 10^{-1}$	$0,7 \times 10^{-2}$	$0,9 \times 10^{-3}$	$0,2 \times 10^{-4}$	
7	$0,5 \times 10^{-1}$	$0,5 \times 10^{-1}$	$0,1 \times 10^{-1}$	$0,1 \times 10^{-2}$	$0,1 \times 10^{-4}$	
8	$1,0 \times 10^{-1}$	$1,0 \times 10^{-1}$	$0,2 \times 10^{-1}$	$0,2 \times 10^{-2}$	$0,2 \times 10^{-4}$	
9	$2,0 \times 10^{-1}$	$2,0 \times 10^{-1}$	$0,4 \times 10^{-1}$	$0,2 \times 10^{-2}$	$0,2 \times 10^{-4}$	
10	$5,0 \times 10^{-1}$	$5,0 \times 10^{-1}$	$0,9 \times 10^{-1}$	$0,3 \times 10^{-2}$	$0,3 \times 10^{-4}$	
11	$0,3 \times 10^{-4}$	$0,3 \times 10^{-4}$	$0,0 \times 10^{-1}$			
12	$0,1 \times 10^{-3}$	$0,1 \times 10^{-3}$	$0,9 \times 10^{-5}$			
13	$0,2 \times 10^{-3}$	$0,2 \times 10^{-3}$	$0,9 \times 10^{-5}$			
14	$0,4 \times 10^{-3}$	$0,4 \times 10^{-3}$	$0,2 \times 10^{-4}$			
15	$0,7 \times 10^{-3}$	$0,6 \times 10^{-3}$	$0,2 \times 10^{-4}$			
16	$0,1 \times 10^{-2}$	$0,9 \times 10^{-3}$	$0,3 \times 10^{-4}$			
17	$0,1 \times 10^{-2}$	$0,1 \times 10^{-2}$	$0,4 \times 10^{-4}$	$0,9 \times 10^{-5}$		
18	$0,2 \times 10^{-2}$	$0,2 \times 10^{-2}$	$0,5 \times 10^{-4}$			
19	$0,2 \times 10^{-2}$	$0,2 \times 10^{-2}$	$0,7 \times 10^{-4}$			
20	$0,3 \times 10^{-3}$	$0,3 \times 10^{-2}$	$0,9 \times 10^{-4}$			
21	$6,0 \times 10^{+0}$	$0,3 \times 10^{-2}$	$0,9 \times 10^{-4}$			
22	$0,2 \times 10^{+2}$	$0,4 \times 10^{-2}$	$0,1 \times 10^{-3}$	$0,9 \times 10^{-5}$		

Tab. 3.3: Erro percentual nos níveis de energia. A primeira linha mostra os números quânticos e a dimensão do operador de energia.

POÇOS BIDIMENSIONAIS

O estudo de sistemas bidimensionais é interessante por diversos aspectos, como por exemplo, na investigação de sistemas mais realísticos como gases de elétrons bidimensional [46, 47] ou na construção de modelos que representem heteroestruturas [8]. No contexto de caos quântico, podemos ressaltar ainda que sistemas conservativos apresentam caos apenas a partir de sistemas bidimensionais [48].

Nesse tipo de sistema podemos encontrar ainda uma dinâmica de reconstrução do espectro de energia de onda mais rica. Esse fato nos motivou a estudar o fenômeno de reconstrução em sistemas cuja dinâmica depende de dois números quânticos.

4.1 BILHAR RETANGULAR

Consideremos uma partícula de massa M , restrita ao plano xOy em uma região retangular delimitada por d_1 e d_2 . A energia potencial $V(x, y)$ nesse caso, é infinita fora da região retangular ($R - I$) (veja a Fig. 4.1).

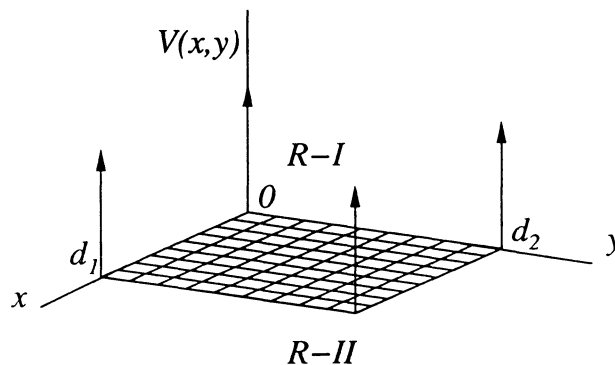


Fig. 4.1: Poço Retangular Infinito bidimensional.

Esse potencial pode ser escrito como

$$V(x, y) = V(x) + V(y) \quad , \quad (4.1)$$

onde $V(x)$ e $V(y)$ são as energias potenciais do poço quadrado infinito unidimensional (veja a Eq. (3.1) na seção 3.1).

A equação que descreve o comportamento de uma partícula nesse potencial é dada pela Eq. (2.2), que iremos escreve-la logo abaixo

$$H|\Phi\rangle = E|\Phi\rangle \quad , \quad (4.2)$$

onde $|\Phi\rangle$ representa os autoestados e E são autovalores de energia da partícula. Essa é a equação de *Schrödinger* independente do tempo.

4.1.1 OPERADOR DE ENERGIA

O operador de energia H , para um sistema bidimensional, pode ser escrito como

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + V(x, y) \quad , \quad \text{onde} \quad \vec{p} = -i\hbar\nabla \quad . \quad (4.3)$$

Para o poço retangular infinito, onde a energia potencial é definida pela Eq. (4.1), podemos escrever H como

$$\begin{aligned} H &= \underbrace{\frac{p_x^2}{2M} + V(x)}_{\hat{H}_x} + \underbrace{\frac{p_y^2}{2M} + V(y)}_{\hat{H}_y} \\ &= H_x + H_y \quad , \end{aligned} \quad (4.4)$$

onde H_x é o operador de energia do sistema na direção x , e H_y é o operador de energia da direção y .

4.1.2 AUTOVALORES E AUTOFUNÇÕES

Podemos considerar os autoestados de H , isto é, $|\Phi\rangle$ como produto tensorial entre os autoestados em x e os autoestados em y [31]. Então

$$|\Phi\rangle = |\phi_n\rangle_x |\phi_m\rangle_y \quad . \quad (4.5)$$

Aplicando a equação de *Schrödinger* independente do tempo (4.2), onde H e $|\Phi\rangle$ são dados pelas Eqs. (4.4) e (4.5) respectivamente, temos

$$\begin{aligned} (H_x + H_y) |\phi_n\rangle_x |\phi_m\rangle_y &= E |\phi_n\rangle_x |\phi_m\rangle_y \\ E_{n,m} &= E_n^{(x)} + E_m^{(y)} \quad . \end{aligned}$$

Com isso reduzimos o problema bidimensional a dois problemas unidimensionais, já solucionados na seção 3.1, cujos autovalores de energia são dados por

$$E_{n,m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2M} \left(\frac{n^2}{d_1^2} + \frac{m^2}{d_2^2} \right) , \quad (4.6)$$

onde n e m são dois inteiros positivos. As autofunções são obtidas da Eq. (4.5), que para o bilhar retangular fica

$$\Phi_{n,m}(x, y) = \phi_n(x) \phi_m(y) ,$$

onde $\phi_n(x)$ e $\phi_m(y)$ são as autofunções do poço quadrado infinito. Daí finalmente obtemos as autofunções do bilhar retangular

$$\Phi_{n,m}(x, y) = \begin{cases} \frac{2}{\sqrt{d_1 d_2}} \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{d_1} \operatorname{sen} \frac{m\pi y}{d_2} & (R - I) \\ 0 & (R - II) \end{cases} . \quad (4.7)$$

4.1.3 PACOTE DE ONDA

Vamos investigar agora a dinâmica do pacote de onda em um sistema bidimensional, cuja evolução é dada pelas Eqs. (2.9) e (2.10). Podemos reescrevê-las para o bilhar retangular como

$$\Psi(x, y; t) = \sum_{n,m} a_n b_m \phi_n(x) \phi_m(y) e^{-\frac{i}{\hbar} E_{n,m} t} \quad \text{e} \quad |\Psi|^2 = \Psi(x, y; t)^* \Psi(x, y; t) .$$

Os coeficientes da expansão são dados pela Eq. (2.13). Para o bilhar retangular temos

$$u_j = \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dx \phi_n^*(x) g(x)}_{a_n} \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} dy \phi_m^*(y) g(y)}_{b_m} ,$$

$$u_j = a_n b_m .$$

Assumindo a forma inicial do pacote como descrita por uma distribuição normal *Gaussiana* (veja seção 2.2.1), então a_n e b_m serão dados por

$$a_n = \left(\frac{32\pi\sigma_x^2}{d_1^2} \right)^{1/4} \operatorname{sen} \frac{n\pi x_0}{d_1} e^{-(n\pi\sigma_x/d_1)^2}, \quad \text{e} \quad b_m = \left(\frac{32\pi\sigma_y^2}{d_2^2} \right)^{1/4} \operatorname{sen} \frac{m\pi y_0}{d_2} e^{-(m\pi\sigma_y/d_2)^2},$$

e com isso podemos fazer a evolução temporal do pacote de onda.

4.1.4 OS TEMPOS DE RECONSTRUÇÃO

Os períodos clássicos e de reconstrução total são dados pelas fórmulas (2.32), onde a energia depende agora de dois números quânticos n e m . Com isso obtemos as seguintes

escalas de tempo para o bilhar de dimensões d_1 e d_2 :

$$T_{rc}^{(1)} = \frac{2Md_1^2}{\pi\hbar n} \quad , \quad T_{rc}^{(2)} = \frac{2Md_2^2}{\pi\hbar m} \quad ,$$

$$T_{rt}^{(1)} = \frac{4Md_1^2}{\pi\hbar} \quad , \quad T_{rt}^{(2)} = \frac{4Md_2^2}{\pi\hbar} \quad \text{e} \quad T_{rt}^{(12)} = \infty \quad .$$

Podemos ajustar os tempos de reconstrução total tomando a razão entre $T_{rt}^{(1)}$ e $T_{rt}^{(2)}$, isto é

$$\frac{T_{rt}^{(1)}}{T_{rt}^{(2)}} = \frac{d_1^2}{d_2^2} \quad ,$$

tal que

$$t = T_{rt} = d_2^2 T_{rt}^{(1)} = d_1^2 T_{rt}^{(2)} \quad .$$

Com isso, o tempo previsto de reconstrução total para o poço retangular será:

$$T_{rt} = \frac{4M}{\pi\hbar} d_1^2 d_2^2 \quad . \quad (4.8)$$

Essa escala de tempo é “universal”, no sentido que esse tempo não depende dos números quânticos n e m , diferentemente dos períodos clássicos que apresentam dependência em relação a posição inicial do pacote no interior do bilhar.

Para o bilhar quadrado, isto é, quando $d_1 = d_2$, o tempo de total-reconstrução será

$$T_{tr} = T_{tr}^{(1)} = T_{tr}^{(2)} \quad . \quad (4.9)$$

4.1.5 RESULTADOS

Nessa seção apresentaremos os resultados obtidos da simulação numérica de um pacote de onda em um bilhar quadrado ou em um bilhar retangular. Considerando a construção do pacote de onda, podemos utilizar 30 níveis de energia em x e 30 níveis de energia em y , totalizando 900 autoestados, de tal forma que

$$\sum_{n=1}^{30} \sum_{m=1}^{30} |a_n|^2 |b_m|^2 \approx 1 \quad (4.10)$$

em todos os casos investigados. A Eq. (4.10) se mostrou uma ferramenta importante na investigação da construção do pacote, aproximando-se da unidade para o pacote inicial mais próximo do centro da caixa. Esse fato é decorrente da aproximação feita para os coeficientes a_n e b_m , de fato, perto das fronteiras o pacote deve ser suficientemente estreito, sendo necessário para sua construção um número maior de níveis de energia.

A dinâmica do pacote de onda foi estudada mediante a modificação das larguras do bilhar d_1 e d_2 , e da modificação da posição do pacote no interior do bilhar. Utilizamos em todos os casos ($\hbar = M = 1$), onde os casos investigados foram:

- Caso I : Para $d_1 = d_2$ (Bilhar Quadrado);
 Caso II : Para $d_1 \neq d_2$ (Bilhar Retangular);

A tabela a seguir mostra os parâmetros usados na simulação numérica.

Caso	d_1	d_2	σ_x	σ_y
I	6	6	0,3	0,3
II	2	3	0,1	0,2

A dinâmica da partícula (pacote de onda) em um bilhar quadrado, ou retangular, pode ser resumido na seguinte lista de figuras:

Lista de figuras	
Caso I: Bilhar Quadrado	
4.2	- Autofunções e módulo quadrado da função de onda
4.3	- Evolução do pacote de onda ($x_0 = 2, 0$ e $y_0 = 3, 0$)
4.4	- Função de autocorrelação
Caso II: Bilhar Retangular	
4.5	- Evolução do pacote de onda (Figuras comparativas)
4.6	- Função de autocorrelação
4.7	- Função de autocorrelação (Figuras comparativas)

BILHAR QUADRADO

As Figs. 4.2 (a) - (f) ilustram as autofunções $\Phi_{nm}(x, y)$ e as Figs. 4.2 (g) - (m) mostram o módulo quadrado da função de onda $|\Phi|^2$ para o bilhar quadrado. A evolução do pacote de onda pode ser vista nas Figs. 4.3 (a) - (p), onde podemos observar também a presença de reconstruções do pacote, mais especificamente nas Figs. 4.3 (l), (o) e (p).

Vamos determinar agora as escalas de tempo de reconstrução correspondentes, para isso vamos analisar a função de autocorrelação. As Figs. 4.4 (a) - (d) mostram o gráfico da função de autocorrelação para diferentes posições iniciais médias x_0 e y_0 . Esses tempos de reconstrução concordam com os resultados previstos analiticamente pela Eq. (4.9). A Tab. 4.1 mostra as reconstruções e as escalas de tempo correspondente para o bilhar quadrado.

Total-Reconstrução		
	Fig. 4.4 (b)	Fig. 4.4 (c)
1	$T_{cr} = 15,28$	1 $T_{cr} = 5,73$
2	$T_{cr} = 30,56$	2 $T_{cr} = 11,46$
3	$T_{tr} = 45,84$	3 $T_{cr} = 17,19$
		4 $T_{cr} = 22,92$
		5 $T_{cr} = 28,65$
		6 $T_{cr} = 34,38$
		7 $T_{cr} = 40,11$
		8 $T_{tr} = 45,84$

Reconstrução Parcial		
Tempos	Numérico	Figura 4.3
$T_{tr}/8$	5,73	(e)
$T_{tr}/6$	7,64	(f)
$T_{tr}/4$	11,46	(g)
$T_{tr}/3$	15,28	(h)
$T_{tr}/2$	22,92	(l)
$5T_{tr}/8$	28,65	(m)
$3T_{tr}/4$	34,38	(n)

Tab. 4.1: Tempos de reconstrução para o bilhar quadrado.

BILHAR RETANGULAR

A dinâmica de uma partícula em um bilhar retangular é mais rica e complexa que no caso unidimensional (secção 3.1). Mostraremos aqui, que bilhares de diferentes larguras podem apresentar o mesmo tempo de reconstrução total. Esse fato pode ser observado através da comparação entre o bilhar quadrado e o bilhar retangular, que no caso estudado aqui apresentam o mesmo tempo de reconstrução total, mas dinâmicas bem distintas.

Essa discrepância entre as dinâmicas da partícula pode se dar até mesmo entre bilhares idênticos, para isso basta mudar posição inicial média do pacote de onda. A Fig. 4.5 mostra os diferentes comportamentos do pacote de onda para sistemas que apresentam o mesmo tempo de reconstrução total. As Figs. 4.5 (1a)-(1e) — primeira coluna — mostram a evolução do pacote de onda para o bilhar quadrado centrado em $x_0 = 2$ e $y_0 = 3$. As Figs. 4.5 (2a)-(2e) — segunda coluna — mostram o bilhar retangular centrado em $x_0 = 0,7$ e $y_0 = 1,1$. As Figs. 4.5 (3a)-(3e) — terceira coluna — ilustram a evolução temporal em

bilhar retangular centrado $x_0 = 1,0$ e $y_0 = 2,3$. Podemos notar que o tempo de reconstrução total é o mesmo em ambos os bilhares.

A dinâmica da partícula para o bilhar retangular pode ser estudada também por meio da função de autocorrelação, apresentada nas Figs. 4.6 (a) - (f). Os tempos de reconstrução anteriores a $t = 45,84$ ocorrem devido a períodos clássicos de reconstrução e podem ser vistos nas Figs. 4.6 (c) e (d).

Uma análise geral da dinâmica da partícula nos permite concluir que a posição inicial do pacote de onda no interior do bilhar influencia diretamente a reconstrução parcial, mas não a reconstrução total do pacote de onda.

Mostramos ainda que bilhares com diferentes larguras podem apresentar o mesmo tempo de reconstrução total. Esse fato pode ser observado através da comparação entre o bilhar quadrado e o retangular — Fig. 4.7 — onde em ambos os casos obtivemos $t = T_{rc} = 45,84$, embora apresentem dinâmicas bem distintas.

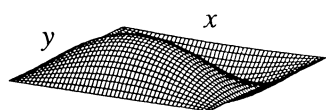
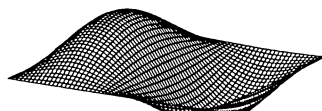
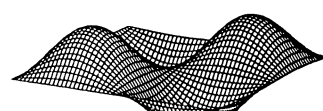
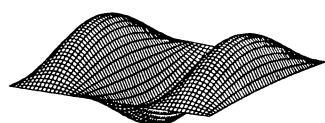
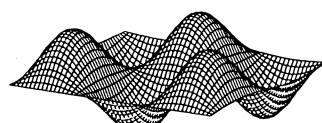
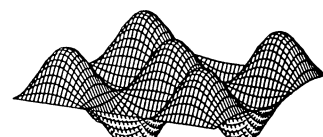
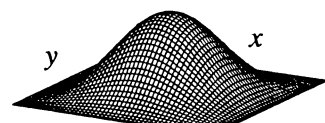
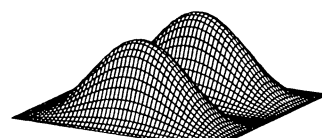
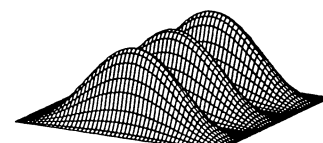
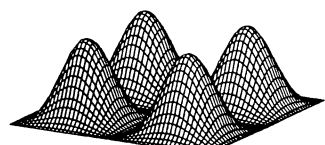
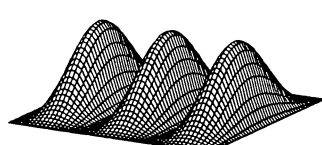
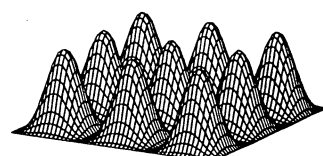
(a) $n=1, m=2$ (b) $n=2, m=1$ (c) $n=2, m=2$ (d) $n=3, m=1$ (e) $n=3, m=2$ (f) $n=3, m=3$ (g) $n=1, m=1$ (h) $n=1, m=2$ (i) $n=1, m=3$ (j) $n=2, m=2$ (l) $n=3, m=1$ (m) $n=3, m=3$

Fig. 2: Bilhar quadrado. (a)-(f): Função de onda - $\Phi(x, y)$. (g)-(m): Módulo quadrado da função de onda - $|\Phi(x, y)|^2$.

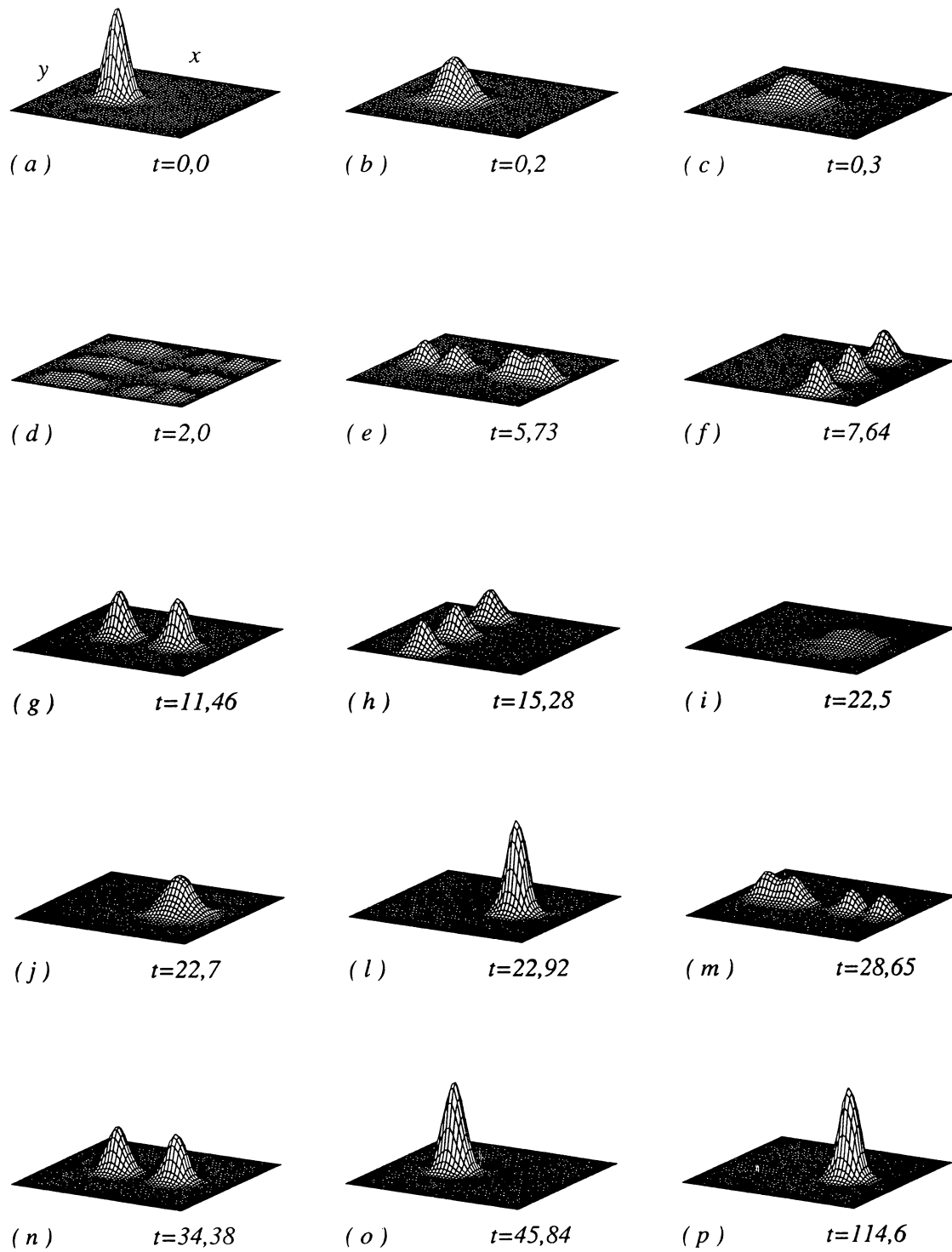


Fig. 4.3: Evolução do pacote de onda para o bilhar quadrado - $|\Psi(x, y; t)|^2$ onde $x_0 = 2,0$ e $y_0 = 3,0$.

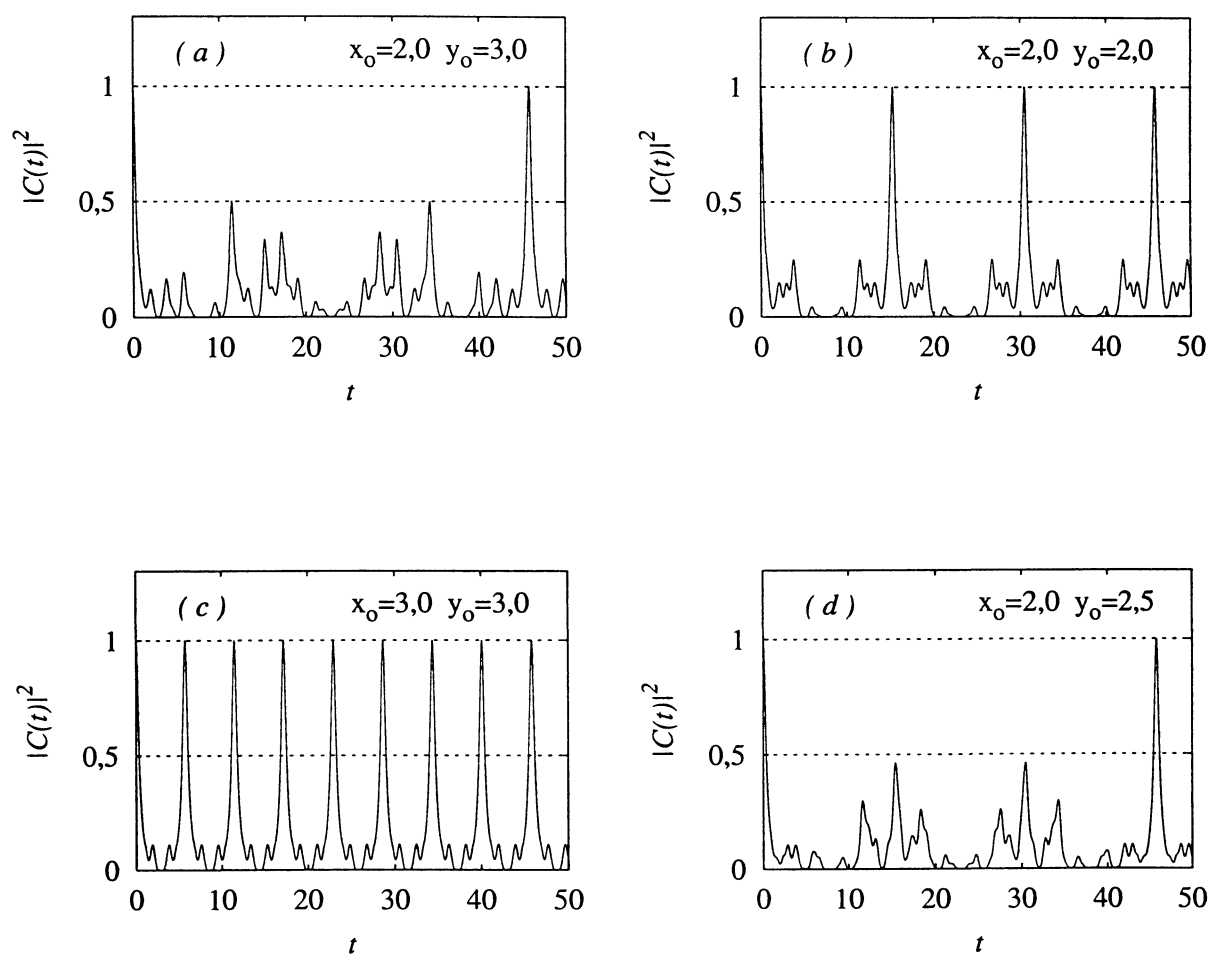


Fig. 4.4: Função de autocorrelação para o bilhar quadrado ($T_{tr} = 45,84$).

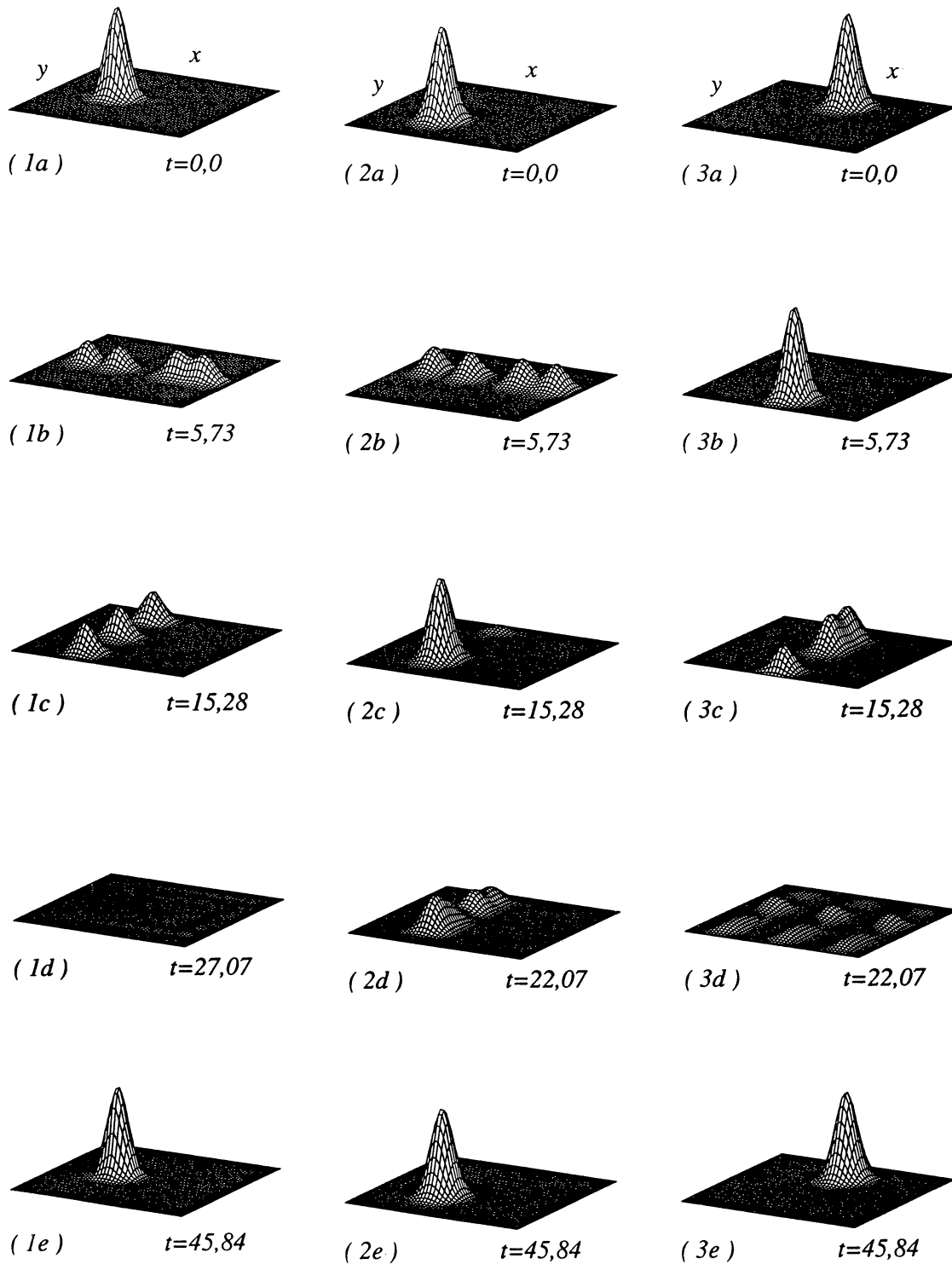


Fig. 4.5: Comparação da dinâmica de um pacote de onda: (1a)-(1e) Bilhar quadrado ($x_0 = 2,0$ e $y_0 = 3,0$). (2a)-(2e) Bilhar retangular ($x_0 = 0,7$ e $y_0 = 1,1$). (3a)-(3e) Bilhar retangular ($x_0 = 1,0$ e $y_0 = 2,3$).

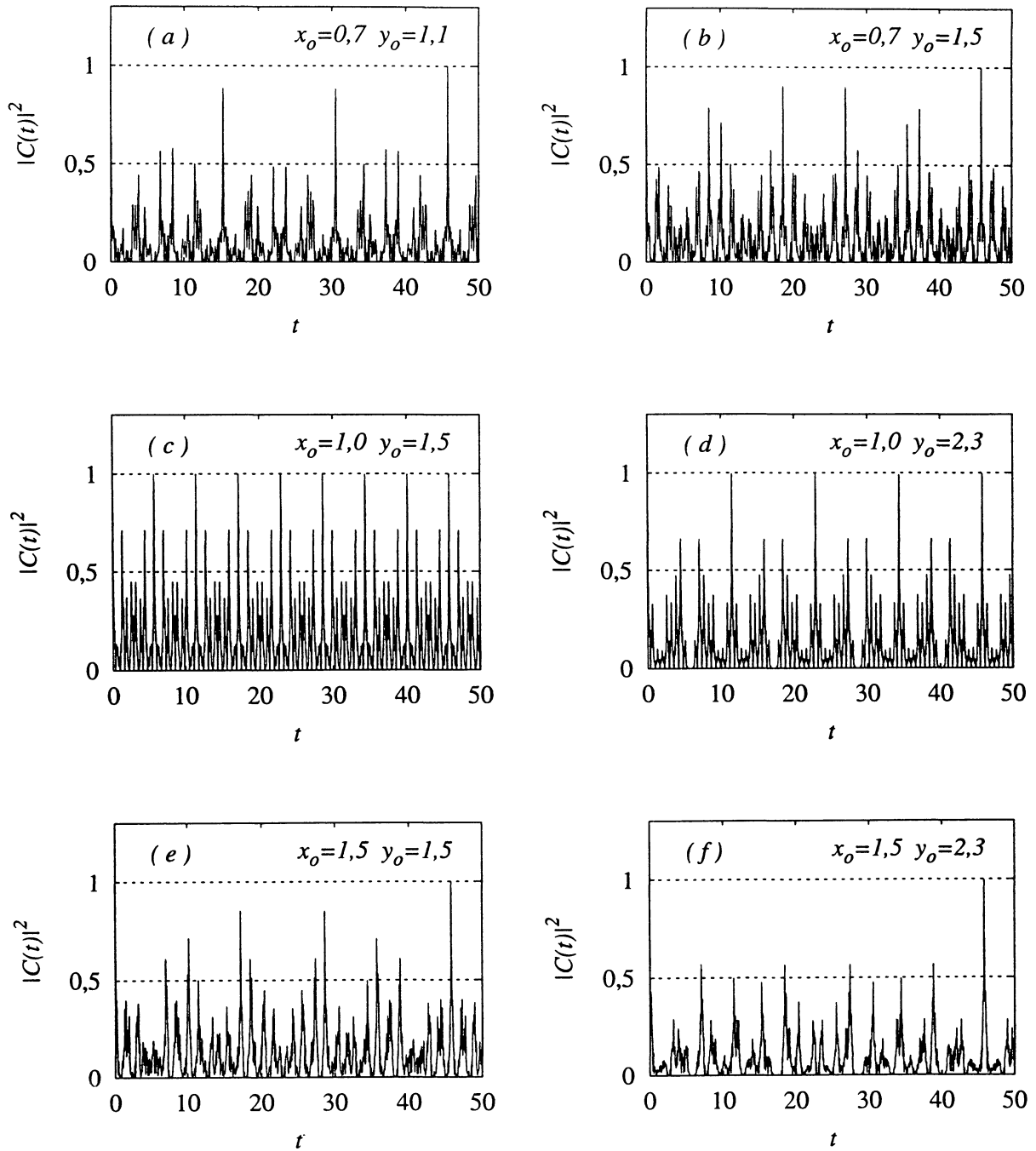


Fig. 4.6: Função de autocorrelação para o bilhar retangular ($T_{rc} = 45, 84$).

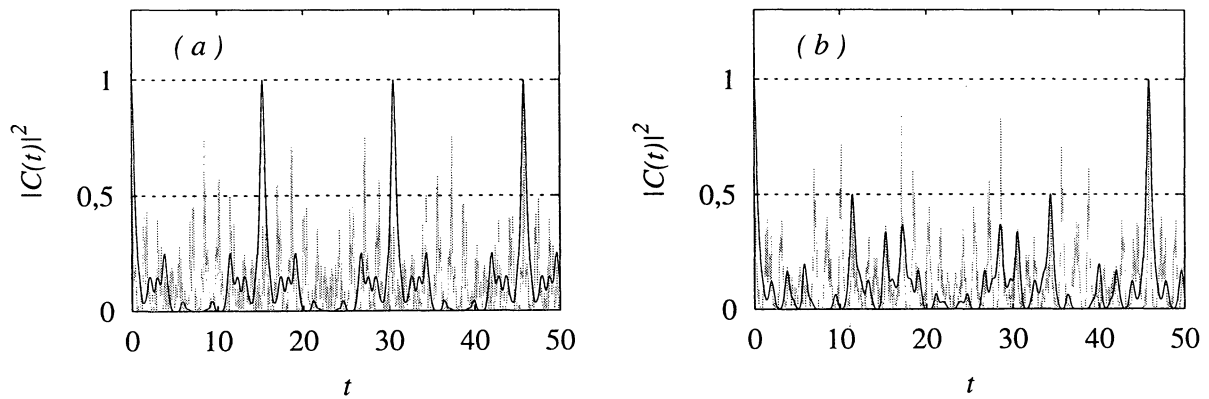


Fig. 4.7: Comparação entre a função de autocorrelação do bilhar quadrado (preto) e do bilhar retangular (cinza). Pacote de onda inicia centrado em: (a) $x_0 = 2,0$ e $y_0 = 2,0$ (preto) e $x_0 = 0,7$ e $y_0 = 1,5$ (cinza). (b) $x_0 = 2,0$ e $y_0 = 3,0$ (preto) e $x_0 = 1,5$ e $y_0 = 1,5$ (cinza)

4.2 POÇO DEGRAU ASSIMÉTRICO

Consideremos uma partícula de massa M sujeita a um potencial bidimensional dado por

$$V(x, y) = V_x(x) + V_y(y) + V(x, y)$$

onde $V_x(x)$ é a energia potencial do poço quadrado infinito dado pela Eq. (3.1), $V_y(y)$ é a energia potencial do poço degrau infinito — veja a Eq. (3.10) —, e $V(x, y)$ é o potencial que acopla os autoestados do poço quadrado com os autoestados do poço degrau. Uma representação esquemática desse sistema pode ser visto na Fig. 4.8.

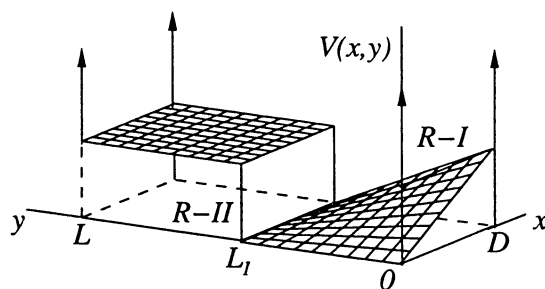


Fig. 4.8: Diagrama esquemático do poço degrau assimétrico.

O potencial V considerado nesse problema é do tipo bilinear e pode ser escrito como

$$V(x, y) = \begin{cases} \frac{\nu}{L_1 D} x (L_1 - y) & (R - I) \\ 0 & (R - II) \end{cases} \quad (4.11)$$

onde ν denota a amplitude máxima da interação, D , L_1 e L são as dimensões do poço.

O OPERADOR DE ENERGIA

O operador de energia para esse sistema será

$$H = \underbrace{H_x + H_y}_{H_0} + V \quad ,$$

onde H_x é o operador de energia do poço quadrado infinito unidimensional, H_y é o operador de energia do poço degrau unidimensional e V é o operador de acoplamento. A dinâmica da partícula será então descrita pela equação de *Schrödinger* independente do tempo (2.2), onde os elementos da matriz H , representados na base de H_0 , são escritos como

$${}_{n''m''}H_{n'm'} = E_x^{(0)} \delta_{n''n'} \delta_{m''m'} + E_y^{(0)} \delta_{n''n'} \delta_{m''m'} + {}_{n''m''}V_{n'm'} \quad ,$$

onde $E_x^{(0)}$ são os autovalores de energia do poço quadrado (3.4), $E_y^{(0)}$ são os autovalores de energia do poço degrau (3.15) e ${}_{m''n''}V_{m'n'}$ são os elementos que compõem o operador de acoplamento.

O OPERADOR DE ACOPLAMENTO

Os elementos que compõem a matriz de acoplamento podem ser obtidos mediante a solução da integral

$${}_{n''m''}V_{n'm'} = \int_{-\infty}^{\infty} dx dy \phi_{n''}^{*(0)}(x) \varphi_{m''}^{*(0)}(y) V \phi_{n'}^{(0)}(x) \varphi_{m'}^{(0)}(y) \quad , \quad (4.12)$$

onde V é o operador de acoplamento (4.11) e $\phi_n^{(0)}(x)$ e $\varphi_m^{(0)}(y)$ são as autofunções do poço quadrado infinito (3.5) e do poço degrau infinito (3.17), respectivamente. Substituindo o operador de acoplamento e as autofunções em (4.12) obtemos

$${}_{n''m''}V_{n'm'} = \frac{\nu}{L_1 D} G_{n''n'} J_{m''m'} \quad ,$$

onde

$$G_{n''n'} = \int_0^D dx x \phi_{n''}^{*(0)}(x) \phi_{n'}^{(0)}(x) \quad \text{e} \quad J_{m''m'} = \int_0^{L_1} dy (L_1 - y) \varphi_{m''}^{*(0)}(y) \varphi_{m'}^{(0)}(y) \quad .$$

Resolvendo as integrais acima obtemos

$$G_{n''n'} = \begin{cases} \frac{D}{2} & (n'' = n') \\ \frac{D}{\pi^2} \left(\frac{\cos(n' - n'')\pi}{(n' - n'')^2} - \frac{\cos(n' + n'')\pi}{(n' + n'')^2} - \frac{1}{(n' - n'')^2} + \frac{1}{(n' + n'')^2} \right) & (n'' \neq n') \end{cases}$$

$$J_{m''m'} = \begin{cases} \frac{1}{4k_{m'}^2 f_{m'}} (L_1^2 k_{m'}^2 - \text{sen}^2 k_{m'} L_1) & (m'' = m') \\ \frac{1}{2\sqrt{f_{m''} f_{m'}}} \left(\frac{1}{\Delta k_2^2} (\cos \Delta k_2 L_1 + 1) - \frac{1}{\Delta k_1^2} (\cos \Delta k_1 L_1 + 1) \right) & (m'' \neq m') \end{cases}$$

para $\Delta k_1 \equiv k_{m'} - k_{m''}$ e $\Delta k_2 \equiv k_{m'} + k_{m''}$. Com isso, finalmente, podemos obter os elementos de matriz com a equação abaixo

$${}_{n''m''}H_{n'm'} = \begin{cases} E_x^{(0)}(n') + E_y^{(0)}(m') + \\ \quad + \frac{\nu}{8L_1 k_{m'}^2 f_{m'}} (L_1^2 k_{m'}^2 - \text{sen}^2 k_{m'} L_1) & (n'' = n') \text{ e } (m'' = m') \\ \frac{\nu}{L_1 D} G_{n''n'} J_{m''m'} & (n'' \neq n'') \text{ ou } (m'' \neq m'') \end{cases}$$

O operador H é composto de um número infinito de elementos, já que não existe um limite superior para os números quânticos n e m , mas por razões computacionais, precisamos limitar nosso modelo truncando as dimensões de n e m a qual denotaremos por N_{max} e M_{max} . Nesse caso a dimensão de H será $N_{max} \times M_{max}$.

4.2.1 AUTOVALORES E AUTOFUNÇÕES

Os autovalores de energia e as autofunções são obtidos diagonalizando-se a matriz H , isto é, resolvendo a equação secular

$$\det(H - E1) = 0 \quad . \quad (4.13)$$

Esse procedimento é realizado numericamente, devido a dimensão da matriz H . As autofunções são obtidas da combinação linear das funções de base do sistema não perturbado, ou seja, sem o potencial de acoplamento (poço degrau bidimensional). Então

$$\Phi_j(x, y) = \sum_{n,m} C_{nm}^{(j)} \phi_n^{(0)}(x) \varphi_m^{(0)}(y) \quad ,$$

onde $C_{nm}^{(j)}$ são os elementos de matriz que compõem a base que diagonaliza H , obtida da própria Eq. (4.13).

4.2.2 PACOTE DE ONDA

A evolução do pacote de onda para esse sistema pode ser feita através das equações

$$\Psi(x, y; t) = \sum_j \sum_{n,m} u_j C_{nm}^{(j)} \phi_n^{(0)}(x) \varphi_m^{(0)}(y) e^{-\frac{i}{\hbar} E_j t} \quad ,$$

e $|\Psi|^2$ é obtida de

$$|\Psi|^2 = \Psi^*(x, y; t) \Psi(x, y; t) \quad .$$

A densidade de probabilidade poderia ser obtida diretamente da Eq. (2.11), mas esse procedimento é computacionalmente menos eficiente (esse fato ocorre porque trocamos o triplo somatório da Eq. (2.11) por uma única operação complexa, ou seja, trocamos $(N_{max} \times M_{max})^2$ operações por uma *única* operação que multiplica a função de onda pelo seu complexo conjugado).

Precisamos ainda obter os coeficientes u_j que aparecem na Eq. (4.2.2). Para isso podemos utilizar a Eq. (2.21).

$$u_j = \sum_{nm} C_{nm}^{(j)} a_n b_m \quad ,$$

onde a_n e b_m são os coeficientes da expansão do poço quadrado infinito — Seção 3.1 — e do poço degrau infinito — Seção 3.2 — respectivamente.

4.2.3 RESULTADOS

Nessa seção vamos apresentar os resultados da simulação numérica da evolução temporal de um pacote *Gaussiano* em um poço degrau bidimensional acoplado, veja a Fig. 4.8. Levando em consideração a construção do pacote de onda inicial, podemos utilizar o seguinte conjunto de parâmetros¹: $D = 6$, $L_1 = L_2 = 6$, ($L = L_1 + L_2$), $V_s = 100$, $x_0 = y_0 = 1$ e $\sigma_x = \sigma_y = 0,3$. Para que o pacote de onda seja suficientemente bem construído, utilizamos aqui 20 níveis de energia em x , e 30 níveis de energia em y , totalizando 600 autoestados. O *Hamiltoniano* do sistema foi construído com $N_{max} = 30$ e $M_{max} = 50$, cuja dimensão é de 1500×1500 , ou seja, precisamos diagonalizar essa matriz para utilizarmos apenas 600 autoestados para a construção do pacote. As Figs. 4.9 (a) - (f) mostram o módulo quadrado da função de onda para o sistema sem o potencial de acoplamento ($\nu = 0$). As três primeiras figuras apresentam níveis de energia menores que a energia da barreira, e as Figs. 4.9 (d) - (f) apresentam níveis de energia maiores que V_s . Nesse caso o pacote de onda se comporta como se estivesse em um bilhar quadrado, veja a seção 4.1.

Acrescentamos agora o potencial de acoplamento fazendo $\nu \neq 0$. Nesse caso temos o acoplamento entre os estados da partícula na direção x com os estados na direção y . As Figs. 4.9 (g) - (p) mostram o módulo quadrado da função de onda para o estado fundamental ($n = 1$ e $m = 1$). Nessa figura, é possível observar diretamente o efeito do potencial de acoplamento, pois a medida que ν aumenta o módulo quadrado da função de onda é deslocado para a região de menor potencial. A dinâmica do pacote de onda pode ser observada através da evolução temporal dada pela Eq. (4.2.2). A Fig. 4.10 mostra a evolução desse pacote para $\nu = 10$. Nesse caso a dinâmica do pacote de onda para esse problema se mostra mais complexa, em comparação com o problema do bilhar retangular (quadrado). Para esse problema não foi possível observar o fenômeno de reconstrução do pacote de onda para tempos até 500.

Observamos ainda que o pacote de onda permaneceu aprisionado na região de menor potencial — região ($R - I$) na Fig. 4.8 —, mesmo para $\nu \approx V_s$.

¹Esses valores numéricos já vem sendo adotados desde as primeiras seções.

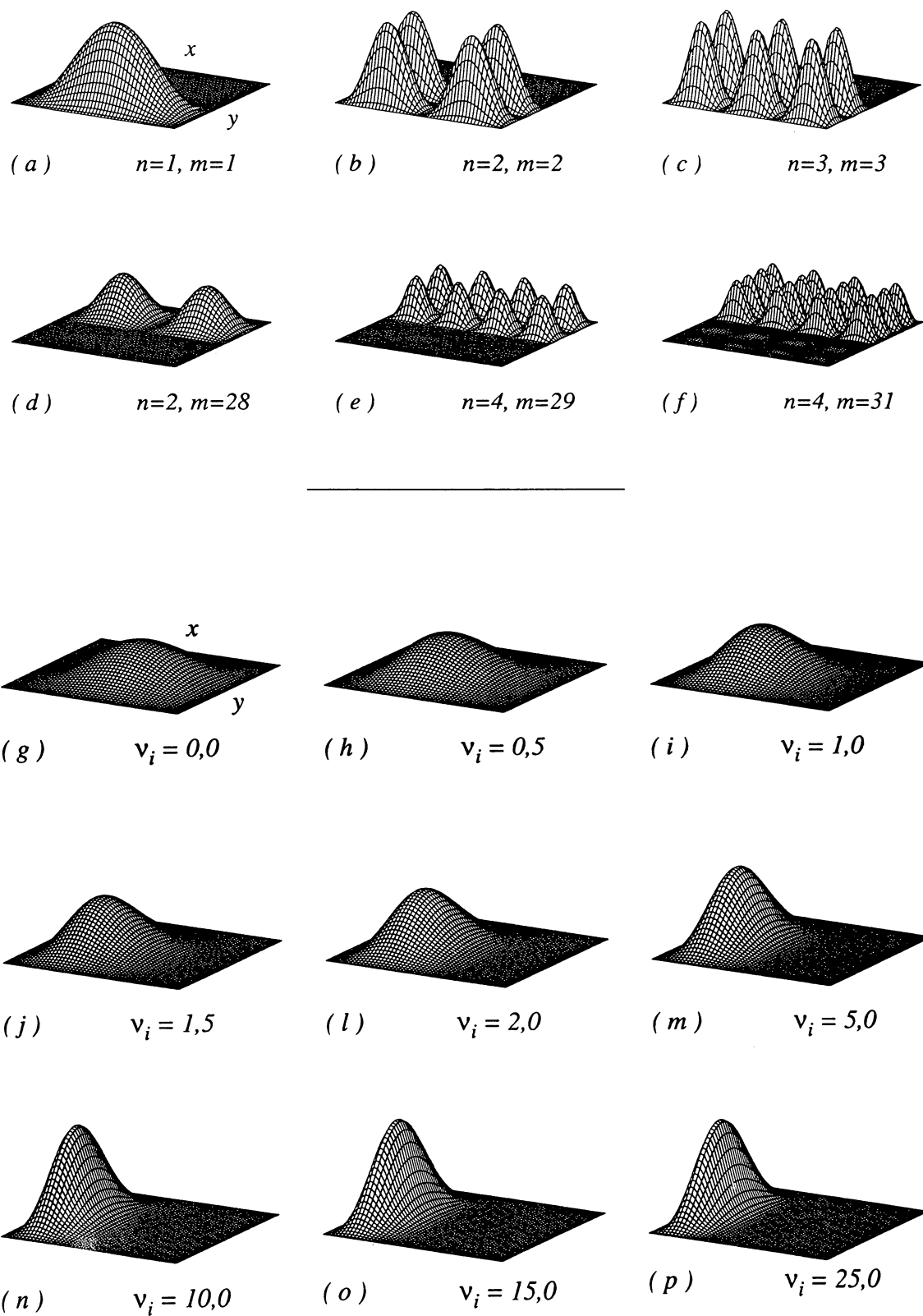


Fig. 4.9: Bilhar degrau. (a)-(f): Módulo quadrado da função de onda para $\nu_i = 0$. (g)-(p): Módulo quadrado da função de onda do estado fundamental.

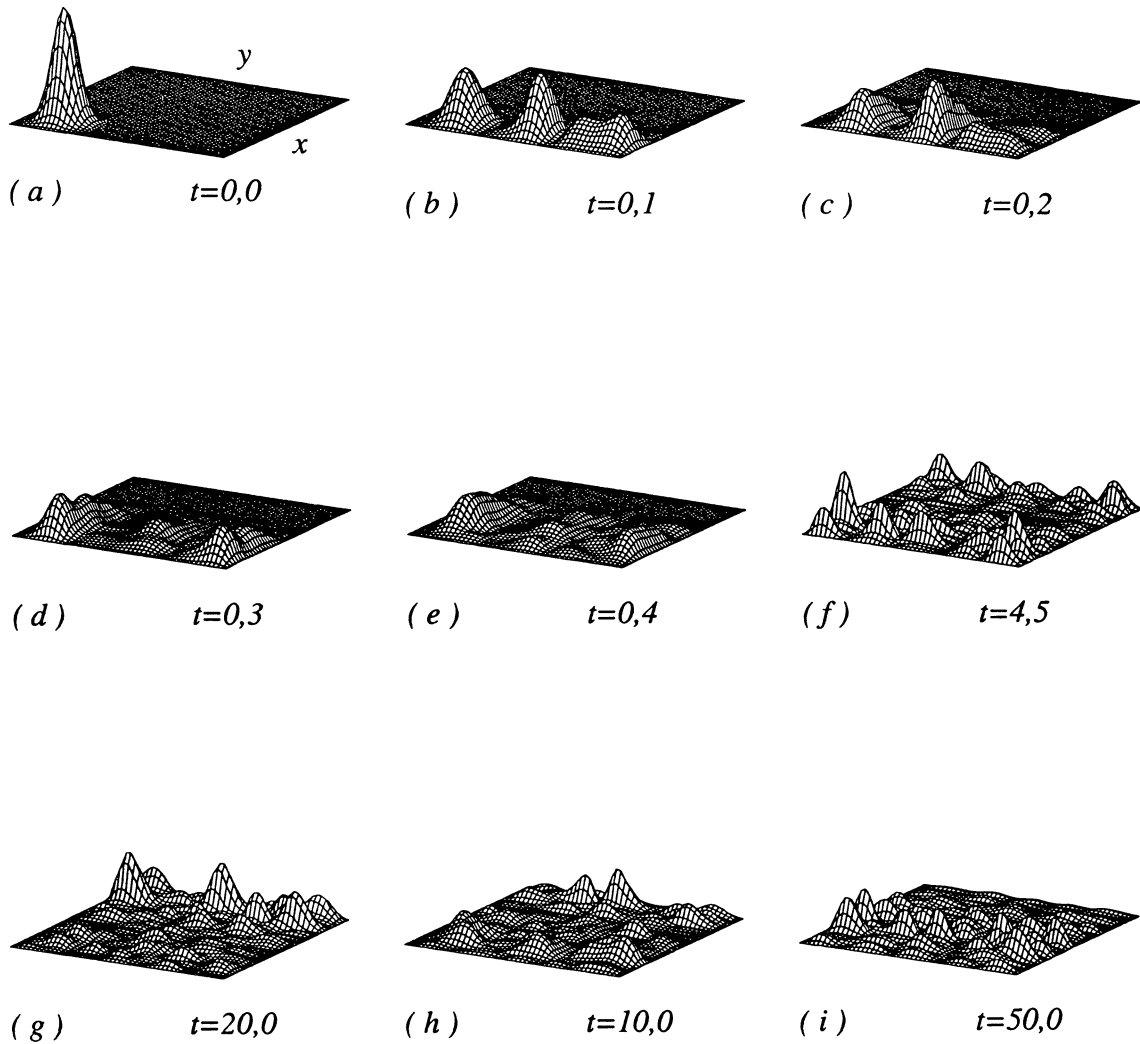


Fig. 4.10: Evolução do pacote de onda — $|\Psi(x, y; t)|^2$ —, para $\nu_i = 10$.

5

CONSIDERAÇÕES FINAIS

SUMÁRIO

O desenvolvimento numérico realizado para o poço quadrado infinito unidimensional, mostrou que o tempo de reconstrução total (T_{rt}) depende apenas da largura D do poço, concordando com os resultados previstos analiticamente. Como a reconstrução total não depende de parâmetros do pacote, foi possível mostrar que reconstruções associadas a posição inicial média x_0 do pacote de onda estão relacionadas apenas com os tempos de reconstruções clássicas (T_{rc}), não apresentando super-reconstrução ($T_{sr} = \infty$).

Para o poço degrau infinito unidimensional, mostramos que os autovalores de energia possuem uma dependência mais complexa com relação aos números quânticos — “equação transcendental”. Esse fato conduz a outras escalas de tempos, como por exemplo, o tempo de super-reconstrução T_{sr} , cuja ocorrência se dá em períodos muito longos. Mostramos a existência de reconstruções do pacote de onda em $t = T_{rt}$ e $t = T_{rc}$ para $E \ll V_s$, o que não foi observado para $E \lesssim V_s$. Nos casos tratados, foi possível concluir que o pacote permanece predominantemente aprisionado na região de menor potencial, mesmo para energia média do pacote próxima a energia da barreira.

Para o poço delta, observamos que, quando a barreira atua como uma perturbação ($\lambda < 1$), é possível observar a reconstrução total do pacote de onda, embora esse tempo seja significativamente maior que o tempo de reconstrução total obtido para o poço quadrado infinito. Esse fato mostrou que a delta não destrói as reconstruções totais, apenas retarda seu desenvolvimento. Mostramos também que as larguras d_1 e d_2 são parâmetros importantes no desenvolvimento do pacote, isto é, quando d_1 e d_2 são irracionais o pacote de onda permanece aprisionado em uma certa região do espaço.

Sistemas bidimensionais apresentam, em geral, uma dinâmica mais rica e complexa.

Para o poço retangular (quadrado), mostramos a existência de reconstrução total (T_{rt}) e período clássico de reconstrução (T_{rc}). Os resultados obtidos numericamente mostram plena concordância com os tempos obtidos analiticamente. Através da função de autocorrelação e da evolução do pacote de onda observamos que a modificação da posição inicial média do pacote (x_0 e y_0) geram diferentes reconstruções parciais mas com o mesmo tempo de reconstrução total. Vimos também que diferentes “geometrias”, como por exemplo, o bilhar quadrado e o bilhar retangular, podem apresentar o mesmo tempo de reconstrução total (T_{rt}), porém diferentes reconstruções parciais.

Para o poço degrau bidimensional acoplado, não observamos na escala de tempo investigada a reconstrução do pacote de onda, sendo que o pacote permaneceu na região de menor potencial mesmo para energia de acoplamento próxima a energia da barreira ($\nu \approx V_s$). Para o caso onde a energia de interação é nula ($\nu = 0$) o pacote de onda se comporta de forma análoga a uma partícula em um bilhar retangular.

CONCLUSÃO

O objetivo desse trabalho foi discutir de forma sistemática, considerando diferentes bilhares, o problema da evolução dinâmica de pacotes *Gaussianos*, com particular enfoque no tempo de reconstrução. Embora esse seja um tema recorrente na literatura (como ficou claro ao longo dessa dissertação), aqui procuramos, para sistemas já analisados, entender aspectos não investigados anteriormente. Também fizemos uma discussão sobre a reconstrução para potenciais de possível interesse prático, mas que não haviam sido estudados anteriormente. Alguns dos métodos aqui propostos, fazem parte da contribuição dessa dissertação para a importante área de propagação de pacotes de onda em bilhares.

TRABALHOS FUTUROS

Aqui fizemos uma abordagem geral discutindo aspectos específicos para cada potencial. Muitas coisas podem ser continuadas e aprimoradas a partir de nossos resultados iniciais. Como exemplo podemos citar:

- O estudo de pacotes *Gaussianos* em outras geometrias (bilhar circular);
- Estudo da evolução de pacotes de onda e aprisionamento em um poço delta bidimensional
- Análise da dissociação quântica de partículas aprisionadas na região de menor potencial de um bilhar degrau através da aplicação de campos externos;
- Evolução de pacotes de onda em sistemas caóticos (bilhar triangular);

- Evolução do pacote de onda em um poço degrau com aplicação de campos elétricos (efeito Stark) em sistemas confinados;

APÊNDICE A

DEMONSTRAÇÃO

Vamos demonstrar nesse apêndice a dedução da condição de contorno proposta na Eq. (3.24). Onde em nosso caso consideramos a continuidade da função de onda $\phi(x)$, e a descontinuidade em sua derivada primeira¹

Consideremos então o comportamento da função de onda ligeiramente a esquerda da interface (d^-) e a direita (d^+). A partícula nessa região é descrita pela equação de *Schrödinger* onde $V(x) = \lambda \delta(x - d)$, com isso temos

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} + \lambda \delta(x - d_1) \phi(x) = E \phi(x)$$

integrando essa equação em x temos

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2M} \int_{d_1-\Delta}^{d_1+\Delta} \frac{d^2 \phi(x)}{dx^2} dx + \lambda \int_{d_1-\Delta}^{d_1+\Delta} \delta(x - d_1) \phi(x) dx &= \int_{d_1-\Delta}^{d_1+\Delta} E \phi(x) dx \\ -\frac{\hbar^2}{2M} [\phi'(d_1^+) - \phi'(d_1^-)] + \lambda \phi(d_1) &= \int_{d_1-\Delta}^{d_1+\Delta} E \phi(x) dx \quad . \end{aligned}$$

Agora vamos tomar o limite de $\Delta \rightarrow 0$, com isso $(d + \Delta) \rightarrow d^+$ e $(d - \Delta) \rightarrow d^-$, então

$$-\frac{\hbar^2}{2M} [\phi'(d_1^+) - \phi'(d_1^-)] + \lambda \phi(d_1) = 0$$

logo

$$\phi'(d_1^+) - \phi'(d_1^-) = \frac{2M \lambda}{\hbar^2} \phi(d_1)$$

como queríamos mostrar.

¹Embora essa condição de contorno seja interessante do ponto de vista prático, chamamos a atenção do leitor para o fato que essa condição não é a mais geral. Veja a Ref.[41] para mais detalhes.

APÊNDICE B

FUNÇÕES DE AIRY

Dada a equação diferencial

$$\ddot{y} - xy = 0 \tag{B.1}$$

existe um par de soluções linearmente independentes Ai e Bi que satisfazem a equação diferencial (B.1), onde Ai e Bi são chamadas de funções de *Airy*, veja as Figs. B.1. A solução geral da Eq. (B.1) é dada por

$$y(x) = A Ai(x) + B Bi(x) \quad .$$

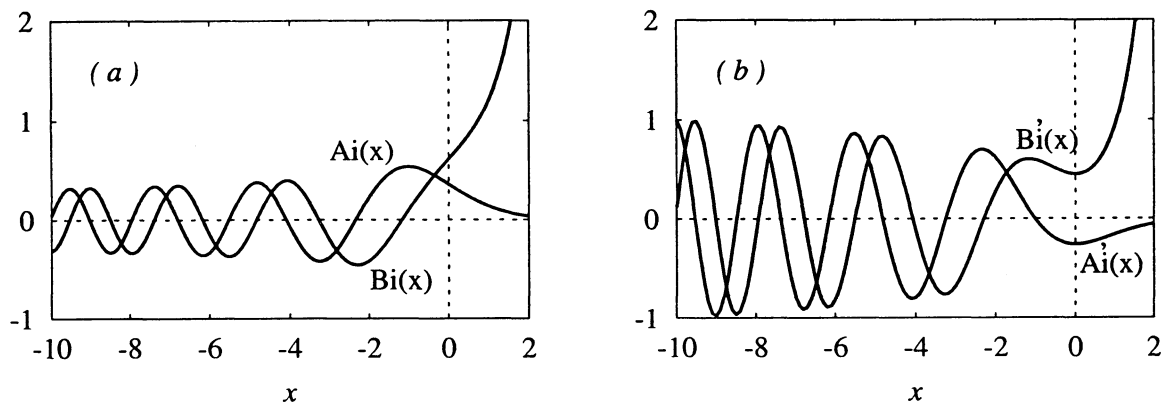


Fig. B.1: (a) Funções de Airy. (b) Derivada das funções de Airy.

Para valores positivos de x , podemos representar as funções de *Airy*, e sua derivada, através das funções $J_n(x)$ e $I_n(x)$, onde são respectivamente, a função de *Bessel* de primeira

espécie e a função de *Bessel* modificada de primeira espécie. Podemos escrever também as funções de *Bessel* modificadas de primeira espécie em termos da função de *Bessel* de primeira espécie com argumentos complexos — veja Eq. (B.2) —, e com isso obtemos

$$\xi = \frac{2}{3}x^{2/3}$$

$$Ai(x) = \frac{\sqrt{x}}{3} [I_{-1/3}(\xi) - I_{1/3}(\xi)] \quad Ai'(x) = \frac{x}{3} [I_{2/3}(\xi) - I_{-2/3}(\xi)]$$

$$Bi(x) = \sqrt{\frac{x}{3}} [I_{-1/3}(\xi) + I_{1/3}(\xi)] \quad Bi'(x) = \frac{x}{\sqrt{3}} [I_{-2/3}(\xi) + I_{2/3}(\xi)]$$

As fórmulas correspondentes para argumentos negativos podem ser expressas em termos da função de *Bessel*. Tal que

$$Ai(-x) = \frac{\sqrt{x}}{3} [J_{1/3}(\xi) + J_{-1/3}(\xi)] \quad Ai'(-x) = \frac{x}{3} [J_{2/3}(\xi) - J_{-2/3}(\xi)]$$

$$Bi(-x) = \sqrt{\frac{x}{3}} [J_{-1/3}(\xi) - J_{1/3}(\xi)] \quad Bi'(-x) = \frac{x}{\sqrt{3}} [J_{-2/3}(\xi) + J_{2/3}(\xi)]$$

$$I_n(\xi) = i^{-n} J_n(i\xi) \tag{B.2}$$

$$I_{-n}(\xi) = i^n J_{-n}(i\xi)$$

$$J_n(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (\xi/2)^{n+2k}}{k! \Gamma(k+1+n)}$$

$$J_{-n}(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (\xi/2)^{2k-n}}{k! \Gamma(k+1-n)}$$

A função de *Airy* em $x = 0$ é

$$Ai(0) = \frac{3^{-2/3}}{\Gamma(2/3)} \approx 0,355028\dots \quad Bi(0) = \sqrt{3} Ai(0) \approx 0,614926\dots$$

Podemos escrever as funções de *Airy* em termos das funções $K_n(\xi)$ e $Y_n(\xi)$, que são respectivamente — funções de *Bessel* de segunda espécie e função de *Bessel* modificada de segunda espécie. Essas funções podem tornar as rotinas numéricas mais eficientes. Para ver mais detalhes sobre as funções de *Bessel* consulte as Refs. [39, 40], para obter rotinas para as funções de *Airy*, veja a Ref. [45].

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] R. Eisberg and R. Resnick. *Quantum Physics of atoms, molecules, solids nuclei, and Particles*. John Wiley & Sons, 1974.
- [2] R. Bluhm, V. A. Kostelecký, and B. Tudosé. Wave-packets revivals for quantum systems with nondegenerate energies. *Phys. Lett. A*, 222:220, 1996.
- [3] R. W. Robinett and S. Heppelmann. Quantum wave-packet revivals in circular billiards. *Phys. Rev. E*, 65:062103, 2002.
- [4] D. L. Kaufman. Expansion method for stationary states of quantum billiards. *Am. J. Phys.*, 67:133, 1999.
- [5] M. Mannoh, T. Yuasa, S. Naritsuka, K. Shinozaki, and M. Ishii. Pair-groove-substrate GaAs/AlGaAs multiquantum well lasers by molecular beam epitaxy. *Appl. Phys. Lett.*, 47:728, 1985.
- [6] R. Crook, A. C. Graham, C. G. Smith, I. Farrer, H. E. Beere, and D. A. Ritchie. Erasable electrostatic lithography for quantum components. *Nature*, 424:751, 2003.
- [7] A. J. Chiquito. Pontos quânticos: átomos artificiais e transistores atômicos. *Rev. Bras. de Ens. Fís.*, 23:159, 2001.
- [8] B. Su, V. J. Goldman, and J. E. Cunningham. Observation of single-electron charging in double-barrier heterostructures. *Science*, 255:313, 1992.
- [9] K. D. Wise and K. Najaki. Microfabrication techniques for integrated sensors and microsystems. *Science*, 254:1335, 1991.
- [10] J. A. Stroscio and D. M. Eigler. Atomic and molecular manipulation with the scanning tunnelling microscope. *Science*, 254:1319, 1991.
- [11] D. M. Eigler, C. P. Lutz, and W. E. Rudge. An atomic switch realized with the scanning tunnelling microscope. *Nature*, 352:600, 1991.

- [12] I. Lyo and P. Avouris. Field-induced nanometer-to atomic-scale manipulation of silicon surfaces with the stm. *Science*, 253:173, 1991.
- [13] D. M. Eigler and E. K. Schweizer. Positioning single atoms with a scanning tunnelling microscope. *Nature*, 344:524, 1990.
- [14] S. C. Tsang, P. J. F. Harris Y. K. Chen, and M. L. H. Green. A simple chemical method of opening and filling carbon nanotubes. *Nature*, 372:159, 1994.
- [15] G. A. Vugalter, A. K. Das, and V. A. Sorokin. Revivals in an infinite square well in the presence of a δ well. *Phys. Rev. A*, 66:012104, 2002.
- [16] D. L. Aronstein and C. R. Stroud, Jr. Analytical investigation of revival phenomena in the finite square-well potential. *Phys. Rev. A*, 62:022102, 2000.
- [17] D. L. Aronstein and C. R. Stroud, Jr. Fractional wave-function revivals in the infinite square well. *Phys. Rev. A*, 55:4526, 1997.
- [18] R. Bluhm and V. A. Kostelecký. Long-term evolution and revival structure of Rydberg wave packets. *Phys. Lett. A*, 200:308, 1995.
- [19] G. M. Lankhuijzen and L. D. Noordam. Frequency- and time-resolved study of the dynamics of rubidium Rydberg wave packets in an electric field. *Phys. Rev. A*, 52:2016, 1995.
- [20] R. Bluhm and V. A. Kostelecký. Quantum defect and long-term behavior of radial Rydberg wave packets. *Phys. Rev. A*, 50:R4445, 1994.
- [21] R. Berkovits, Y. Ashkenazy, L. P. Horwitz, and J. Levitan. Chaotic signatures in the spectrum of a quantum double well. *Physica. A*, 238:279, 1997.
- [22] Y. Ashkenazy, L. P. Horwitz, J. Levitan, M. Lewkowicz, and Y. Rothschild. Chaoticlike behavior in a quantum system without classical counterpart. *Phys. Rev. Lett.*, 75:1070, 1995.
- [23] J. Parker and C. R. Stroud, Jr. Coherence and decay of Rydberg wave packets. *Phys. Rev. Lett.*, 56:716, 1986.
- [24] L. Marmet, H. Held, G. Raithel, J. A. Yeazell, and H. Walther. Observation of quasi-landau wave packets. *Phys. Rev. Lett.*, 72:3779, 1994.
- [25] I. Sh. Averbukh, M. J. J. Vrakking, D. M. Villeneuve, and Albert Stolow. Wave packet isotope separation. *Phys. Rev. Lett.*, 77:3518, 1996.

- [26] I. Averbukh and M. Shapiro. Optimal squeezing of molecular wave packets. *Phys. Rev. A*, 47:5086, 1993.
- [27] W. Chen and G. J. Milburn. Fractional quantum revivals in the atomic gravitational cavity. *Phys. Rev. A*, 51:2328, 1995.
- [28] D. M. Meekhof, C. Monroe, B. E. King, W. M. Itano, and D. J. Wineland. Generation of nonclassical motional states of a trapped atom. *Phys. Rev. Lett.*, 76:1796, 1996.
- [29] G. Alber and P. Zoller. Laser excitation of electronic wave packets in rydberg atoms. *Phys. Rep.*, 199:231, 1991.
- [30] H. Takagi, M. Yamaguchi, and N. Sawaki. Transport of a wave packet via an open quantum dot: on the correspondence with classical billiards. *Physica E*, 19:192, 2003.
- [31] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë. *Quantum Mechanics*, volume I. John Wiley & Sons, 1997.
- [32] J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*. Addison-Wesley, rev. ed. edition, 1995.
- [33] A. Das and A. C. Melissinos. *Quantum Mechanics: A modern introduction*. Gordon and Breach Science, 1990.
- [34] R. P. Feynman, R. B. Leighton, and M. Sands. *Lectures on Physics*, volume 1. Addison-Wesley, 1964.
- [35] R. L. Liboff. *Introductory Quantum Mechanics*. Addison-Wesley, 3rd edition, 1997.
- [36] Anu Venugopalan and G. S. Agarwal. Superrevivals in the quantum dynamics of a particle confined in a finite square-well potential. *Phys. Rev. A*, 59:1413, 1999.
- [37] A. Bonvalet, J. Nagle, V. Berger, A. Migus, J.-L. Martin, and M. Joffre. Femtosecond infrared emission resulting from coherent charge oscillations in quantum wells. *Phys. Rev. Lett.*, 76:4392, 1996.
- [38] F. Großmann, J. Rost, and W. P. Schleich. Spacetime structures in simple quantum systems. *J. Phys. A*, 30:L277, 1997.
- [39] M. Abramowitz and I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. 10th edition, 1972.
- [40] M. R. Spiegel. *Mathematical Handbook of Formulas and Tables*. McGraw-Hill, 1968.

- [41] A. G. M. Schmidt and M. G. E. da Luz. Wave packet dynamics for general contact interactions on a circular setup: revivals, bouncing and trapping. Submetido: Phys. Rev. A, In 2003.
- [42] R. C. Greenhow. *Introductory Quantum Mechanics*. IOP, 1990.
- [43] E. MERZBACHER. *Quantum Mechanics*. John Wiley & Sons, 2nd edition, 1970.
- [44] A. ten Wolde and L. D. Noordam. Atomic electron wave packets in an electrical field. *Phys. Rev. A*, 40:485, 1989.
- [45] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery. *Numerical Recipes in Fortran: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, 2nd edition, 1992. Web: <http://www.nr.com/>.
- [46] M. A. Topinka, R. M. Westervelt B. J. LeRoy, S. E. J. Shaw, R. Fleischmann, E. J. Heller, K. D. Maranowski, and A. C. Gossard. Coherent branched flow in a two-dimensional electron gas. *Nature*, 410:183, 2001.
- [47] M. F. Crommie, C. P. Lutz, and D. M. Eigler. Imaging standing waves in a two-dimensional electron gas. *Nature*, 363:524, 1993.
- [48] A. G. Miltenburg and Th. W. Ruijgrok. Quantum aspects of triangular billiards. *Physica A*, 210:476, 1994.