

MARCOS VAN VESSEN JUNIOR

BILHARES QUÂNTICOS FORMADOS POR 2 PARTÍCULAS INTERAGINDO POR POTENCIAIS DE CURTO ALCANCE

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Paraná, como requisito à obtenção do grau de Mestre em Ciências.

Orientador: Prof. Dr. Marcos G. E. Luz

CURITIBA

2000

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ
SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

TERMO DE ACEITAÇÃO

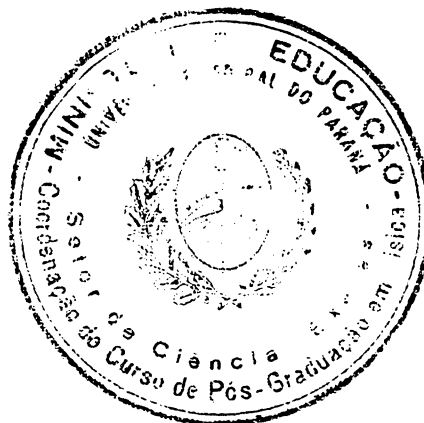
Os abaixo-assinados, membros da banca examinadora de Mestrado do estudante Marcos Van Vessem Junior, consideram aprovada a redação final da Defesa de Dissertação cujo título é “BILHARES QUÂNTICOS FORMADOS POR 2 PARTÍCULAS INTERAGINDO POR POTENCIAIS DE CURTO ALCANCE”.

Curitiba, 31 de março de 2000


Prof. MARCOS GOMES ELEUTÉRIO DA LUZ
(Orientador Presidente)


Prof. MARCUS ALOIZIO MARTINEZ DE AGUIAR
(UNICAMP)


Prof. JULIO SANTIAGO ESPINOZA ORTIZ
(UNESP) RIO CLARO



***Dedico este trabalho à Deus,
e a minha esposa.***

"Pois é pela fé que entendemos que aquilo que se vê é formado a partir daquilo que não se vê."

***Paulo de Tarso
(Inspirado pelo E.S.)***

AGRADECIMENTOS

Quero deixar registrada para sempre a minha gratidão às pessoas e instituições que tanto contribuíram para que eu pudesse completar este mestrado.

Agradeço:

À minha amada esposa, a Nana, que tanto tem demonstrado o seu amor por mim.

À meus pais pelo incentivo que me deram e pelo investimento que fizeram em mim.

Ao meu orientador, Marcos G E da Luz, que acreditou em mim e se empenhou muito neste projeto.

Ao Marcos César Santos, grande companheiro de trabalho, cuja contribuição foi incrível.

Ao prof. Carlos Carvalho pelas várias contribuições na área de informática.

Aos demais professores do departamento que colabaram na minha formação.

Aos companheiros da pós que sempre estiveram prontos a dar a sua ajuda.

Ao CNPq pela ajuda financeira

Ao Deus vivo e poderoso que me tem dado vida e força para viver, ao seu Filho Jesus Cristo que me deu a salvação, e ao Espírito Santo que tem me guiado.

Conteúdo

1	Introdução	1
2	O Caos quântico e sua caracterização	5
2.1	Estatísticas $P(s)$ e $\bar{\Delta}_3$	6
2.1.1	$P(s)$	6
2.1.2	$\bar{\Delta}_3$	10
2.2	Localização da função de onda ψ	10
2.3	Cicatrizes	11
2.4	Caracterização de caos ondulatório	11
3	Os sistemas a serem estudados	13
3.1	Diagonalização dos hamiltonianos	17
3.2	Sistemas com condições de contorno periódicas	20
3.3	Sistemas na caixa unidimensional	27
4	Resultados	34

4.1	Círculo	34
4.2	Círculo-ext	35
4.3	Caixa	35
4.4	Caixa-ext	41
4.5	Algumas propostas alternativas para a análise dos sistemas estudados neste trabalho	41
4.5.1	Análise da distribuição dos coeficientes da expansão	48
4.5.2	Transferência de energia	49
5	Discussão dos resultados	50
5.1	Círculo com potencial geral de curto alcance - solução analítica	52
6	Conclusões	71
A	Solução Exata para o Sistema de Dois Corpos que Interagem por uma Função Tipo δ Sujeito a Condições de Contorno Periódicas	75
B	Transferência de energia	79
C	Duas Partículas Interagindo por um Potencial δ	85

Resumo

Neste trabalho examinamos as condições de integrabilidade e surgimento de caos em sistemas quânticos formados por duas partículas em uma dimensão. Assumimos interações de curto alcance entre as partículas e a possibilidade de existirem potenciais externos dados por funções δ . Condições de contorno periódicas e do tipo paredes infinitas são consideradas. Verificamos que para surgir caos é fundamental que a razão entre os valores das massa das partículas seja diferente da unidade. Para o caso de condições de contorno periódicas mostramos que para qualquer que seja o potencial de interação de curto alcance entre as partículas a hipótese de Bethe é válida e mostramos como construir as soluções analíticas do problema neste caso. As razões dinâmicas que levam o sistema quântico a apresentar ou não caos são discutidas em detalhe.

Abstract

In this work we study the integrability conditions and the emergence of chaos in quantum systems formed by two one-dimensional particles. We assume a short range interaction between the particles and also the possibility of external potentials given by δ functions. Periodic boundary and hard wall boundary conditions are both considered. We find that there exists chaos only when the ratio between the particles' masses is different from unity. For the periodic boundary conditions we show that for any kind of short range interaction potential between the particles the Bethe ansatz is valid, and we also show how to construct the analytical solutions for the problem in this case. The dynamical reasons which drive the quantum system to present chaos are discussed in detail.

Capítulo 1

Introdução

O estudo de sistemas clássicos caóticos teve seu início no fim do século passado, com os trabalhos pioneiros de H. Poincaré. Somente em meados da década de 60 começou-se estudar a existência de caos (ou sinais dele) em sistemas quânticos. A análise de comportamento caótico em mecânica quântica difere do caso clássico, pois neste o caos advém sobretudo da não linearidade das equações que regem sua evolução dinâmica, ao passo que sistemas quânticos são descritos pela equação de Schrödinger, que é linear. Usualmente considera-se caos quântico como sendo o estudo dos diferentes fenômenos quânticos que surgem em sistemas cujos análogos clássicos sejam caóticos. Apesar de ainda haverem muitas questões fundamentais em aberto nesta área relativamente nova [1], ela já tem contribuído no entendimento de alguns problemas mais realísticos. Dentre vários exemplos podemos citar em física atômica os efeitos do campo magnético em átomos de hidrogênio [2] e hélio [3], e as propriedades dinâmicas de átomos pesados [4]. Outro tipo de sistemas aonde muitos resultados, tanto teóricos quanto experimentais, tem mostrado manifestações de caos quântico é em semicondutores e “quantum dots” [5]. Normalmente estes são descritos por bilhares, um paradigma na investigação de caos quântico, nos quais em geral uma partícula está restrita a uma região bidimensional. Ultimamente no entanto tem sido observado [5, 6] que interações entre elétrons podem desempenhar

um fator importante no transporte em “quantum dots”. Desta forma temos que a análise de bilhares com muitas partículas interagindo é de grande relevância, tanto conceitualmente quanto na prática.

Nesta linha também podemos argumentar que em função dos avanços na tecnologia de microprocessadores, temos nos aproximado cada vez mais dos limites onde efeitos quânticos tornam-se significativos. Assim, faz-se necessário haver um melhor entendimento a respeito das características caóticas em sistemas quânticos compostos por N partículas que possuam algum tipo de interação entre si.

Há também a esperança de que poucas partículas confinadas em regiões uni ou bidimensionais [7] possam ser um protótipo de um computador quântico [8]. Este último sistema é um belo exemplo aonde características de caos quântico se tornam muito importantes já que, por exemplo, uma eventual localização da função de onda poderia impedir a implementação de um computador quântico[9].

Desta forma, como proposta de estudos iniciais podemos considerar interações mais simples entre as partículas. Isto nos leva a imaginar como interações, potenciais de curto alcance, ou seja, $V(x_1, x_2) = 0$ para as partículas distando mais de um certo valor d (o alcance do potencial). Na literatura matemática estes potenciais são chamados de potenciais de suporte compacto. Dentre estes podemos destacar as interações pontuais, dadas por funções δ (delta) de Dirac. A primeira vista uma função δ pode dar a impressão de ser muito limitada, mas na verdade é útil em muitas situações, como por exemplo para descrever um núcleo atômico leve e o problema com a interação colombiana em três dimensões [10]. No contexto da condensação de Bose-Einstein para gases [11], devido as baixas temperaturas e densidades, apenas a função-s de espalhamento é relevante, de tal maneira que a forma exata da interação átomo-átomo não é um fator tão importante, e em geral podemos assumir que a interação é do tipo δ [12].

Na década de 60 muitos trabalhos foram realizados investigando problemas de N

partículas interagindo por potenciais tipo δ em uma dimensão [13]. Nesses trabalhos o objetivo central era: (i) prover uma das poucas soluções exatas para um problema de muitos corpos; (ii) discutir relações formais entre sistemas de bósons e férmions; (iii) analisar as excitações elementares e a termodinâmica no limite de $N \rightarrow \infty$; e (iv) classificar em que condições tais modelos poderiam ser integráveis. Muito mais recentes são os estudos relativos à influência de caos quântico nestes tipos de sistemas [6, 14, 15].

Aqui precisamos fazer um parênteses e chamar a atenção para um ponto que está em contraste ao que foi mencionado anteriormente com relação a definição de caos quântico que é a recente descoberta do chamado “wave chaos” (caos ondulatório) [16, 17] aonde as características de caos quântico surgem para classes de sistemas cujos análogos clássicos não apresentam caos. Diferentes mecanismos têm sido propostos para explicar sua origem, mas o certo é que as características ondulatórias das partículas quânticas, que dão origem ao tunelamento e ao espalhamento, estão intimamente relacionadas a este fenômeno. Esta observação é importante pois caos ondulatório é observado especialmente em sistemas onde as interações são do tipo δ e que serão muito usadas ao longo desta dissertação. Iremos retomar esta discussão mais à frente.

Neste trabalho, discutimos o problema unidimensional de duas partículas interagindo por meio de potenciais de curto alcance, principalmente potenciais tipo δ . Consideramos vários tipos de condições de contorno para funções de onda do sistema e também diferentes valores para os parâmetros do problema, como relação entre as massas das partículas, intensidade dos potenciais de interação, etc.. Também levaremos em conta a possibilidade de haver um potencial externo do tipo δ . A vantagem de estudarmos o caso unidimensional é que ele nos revela muitas características sobre o caos quântico nestes bilhares, sem contudo entramos em complicações oriundas do tratamento de potenciais tipo δ em 2 ou mais dimensões [18, 14, 15], onde a análise matemática se torna muito complicada. Além disso a interação tipo delta em uma

dimensão nos fornece um modelo simples para estudarmos bósons e férmions, isto devido as simetrias que as funções de onda de bósons e férmions apresentam, e que são facilmente tratáveis para potenciais δ .

Analisaremos a presença ou não de comportamento caótico em nossos sistemas através das técnicas usuais de caracterização de caos quântico, tais como análise do espectro de energia. Também usaremos alguns critérios novos baseados nas particularidades de nossos sistemas e que talvez possam ser estendidos para outros sistemas análogos.

Sabendo que em sistemas finitos as condições de contorno desempenham um papel fundamental [19] e entendendo que a análise de sistemas mesoscópicos é muito importante, pois talvez seja a ponte entre o mundo quântico e o mundo clássico, procuramos também analisar o papel que desempenham diferentes condições de contorno na integrabilidade de nossos sistemas.

Finalmente lembramos que todos os sistemas que serão apresentados são sistemas com duas partículas, sendo portanto um pequeno passo na busca do entendimento de caos quântico em sistemas de muitas partículas.

No próximo capítulo veremos as principais técnicas de análise de caos quântico. No capítulo 3 fazemos uma exposição prévia dos sistemas aqui abordados, e apresentamos os métodos pelos quais obtemos os autovalores e autovetores dos mesmos. Em seguida apresentamos os resultados obtidos para os diferentes sistemas, e isto compõe o capítulo 4. No capítulo 5 discutimos os resultados e um novo método para obtenção da solução analítica para um dos sistemas estudados. No capítulo 6 expomos as conclusões e sugestões para trabalhos futuros.

Entremos agora mais a fundo dentro deste nosso trabalho.

Capítulo 2

O Caos quântico e sua caracterização

Como vimos na introdução, o caos em sistemas quânticos não é caracterizado pela não linearidade das equações que descrevem o sistema, mas sim pelo aparecimento de diferentes características, tais como, localização da função de onda, repulsão entre níveis de energia, irregularidades nos nós da função de onda, etc, que surgem em sistemas cujos análogos clássicos são caóticos [1].

Existem várias propostas para a caracterização de caos quântico, algumas delas se baseiam em estatísticas que se fazem com o espectro de energia do sistema procurando identificar o grau de correlação entre os níveis de energia, por exemplo se há repulsão entre os níveis. Outras são baseadas na função de onda, buscando identificar se há ou não localização, ou se surgem cicatrizes [20] (ver discussão a seguir). O certo é que nenhum método isolado é seguro o suficiente para caracterizar se o sistema é ou não caótico. Na verdade o ideal é aplicarmos diversos “testes” de caracterização de caos quântico, quando mais de um dos métodos apontam na mesma direção, então dentro de uma análise qualitativa, supõe-se que o sistema seja caótico.

Passaremos agora a discutir algumas das técnicas mais usadas na identificação de caos em mecânica quântica e que serão usadas no decorrer desta dissertação. Seguiremos basicamente a discussão feita na Ref [1]

2.1 Estatísticas $P(s)$ e $\bar{\Delta}_3$

A correlação (se existir) entre os níveis de energia de um determinado sistema pode revelar alguma coisa sobre a estrutura geral do sistema? - O bom senso diz que a resposta é sim! E é dentro desta perspectiva que se baseiam as estatísticas - $P(s)$ e $\bar{\Delta}_3$ (existem outras estatísticas, mas aqui iremos nos concentrar apenas nestas duas).

Como sabemos uma das características marcantes da mecânica quântica é o fato de que os níveis de energia, em sistemas fechados, apresentam um espectro discreto, assim sendo, estes níveis de energia formam um conjunto de autovalores que podem indicar se o sistema é caótico ou não, como veremos adiante. Também constata-se que sistemas clássicos caóticos quando quantizados apresentam uma distribuição dos níveis de energia bem diferente da distribuição observada quando sistemas clássicos integráveis são quantizados. A forma como estes conjuntos de autovalores se distribuem é o que as estatísticas $P(s)$ e $\bar{\Delta}_3$ nos revelam.

2.1.1 $P(s)$

Uma proposta para avaliar o grau de correlação entre níveis de energia e seus vizinhos imediatos é a estatística $P(s)$, que nos dá a distribuição dos espaçamentos entre níveis de energia vizinhos. Para entendê-la melhor, vamos compreender primeiro o que é o “unfold” (desdobramento).

Desdobramento

Visando obter uma comparação quantitativa entre diferentes sistemas devemos

$$P(s) = e^{-s} . \quad (2.2)$$

A equação que rege a distribuição de Poisson pode ser facilmente deduzida, para isso primeiramente iremos introduzir uma outra estatística chamada de distribuição espectral $Q(x)d(x)$, que é a probabilidade de acharmos um nível de energia dentro do intervalo $\alpha + x \leq E < \alpha + x + dx$, se há um autovalor em $E = \alpha$. As funções $Q(x)$ e $P(x)$, estão relacionadas da seguinte forma:

Primeiro escolhemos um segmento de comprimento (inteiro) L , e o dividimos em pequenos intervalos, todos com o mesmo comprimento . Então espalhamos marcadores de comprimento L aleatoriamente, um independentemente do outro, sendo a probabilidade de um marcador cair dentro de um destes pequenos intervalos é $Q(x)$. Assim o 1^o marcador acima de 0 irá cair num pequeno intervalo com probabilidade $\varepsilon Q(\xi)/L$ e logicamente não estará em nenhum outro pequeno intervalo com uma probabilidade $1 - \varepsilon Q(\xi)/L$, onde ξ é alguma coordenada dentro do pequeno intervalo em questão. Agora escolhemos um intervalo vizinho de comprimento x , e requeremos que nenhum dos marcadores caia em x enquanto há um marcador em $\alpha + x \leq E < \alpha + x + dx$. Claramente temos que efetuar o produto de todos os $1 - \varepsilon Q(\xi)/L$ para $0 < \xi < x$, e multiplicar com $\varepsilon Q(\xi)/L$. No limite de pequenos ε e/ou grandes L , achamos que $P(x) = Q(x)e^{[-\int d(\xi)]}$. Em particular quando a distribuição dos níveis de energia é aleatória, $Q(x) = 1$, o que produz $P(x) = e^{-x}$, que é a distribuição de Poisson.

De uma forma totalmente inesperada [1], os sistemas integráveis possuem em geral uma distribuição de espaçamentos do tipo Poisson. Inesperada porque a distribuição de Poisson tem como premissa que o conjunto é formado por números distribuídos aleatoriamente sem qualquer correlação entre eles, ou seja, este conjunto que gera a distribuição de Poisson é totalmente desordenado e representa um sistema ordenado.

2.1.2 $\bar{\Delta}_3$

A estatística $\bar{\Delta}_3$ introduzida por Dyson e Mehta [22], é uma medida de quão bem qualquer extensão do espectro, de comprimento L , pode ser aproximada por uma reta. Assim defini-se

$$\bar{\Delta}_3(L) = \frac{1}{j_{\text{máx}}} \sum_{j=1}^{j_{\text{máx}}} \Delta_3(z_j, L), \quad (2.3)$$

sendo que

$$\Delta_3(L) = \text{Min}_{A_j, B_j} \frac{1}{L} \int_{z_j - \frac{L}{2}}^{z_j + \frac{L}{2}} [N(x) - A_j x - B_j]^2 dx. \quad (2.4)$$

$N(x)$ é o espectro-escada desdobrado, e o centro do intervalo L é em z_j . Vale a pena lembrar que $N(x)$ é obtido da seguinte forma: primeiro efetua-se o desdobramento, depois como $x_i = \bar{N}(\varepsilon_i)$ forma um conjunto, definimos $N(x_i)$ como sendo quantidade de números do conjunto dos x_i que estão no intervalo de 0 à x_i .

Em sistemas quânticos cujo análogo clássico é caótico, a estatística $\bar{\Delta}_3$ tem a forma aproximada ($L \gg 1$):

$$\bar{\Delta}_3 = \frac{1}{\pi^2} (L - 0.0687) .$$

Enquanto que em sistemas quânticos cujo análogo clássico é integrável, Poisson, a estatística $\bar{\Delta}_3$ tem a seguinte forma:

$$\bar{\Delta}_3 = \frac{L}{15} .$$

Na figura 2.2 pode-se observar o comportamento para os dois tipos de situação.

2.2 Localização da função de onda ψ

Em sistemas caóticos formados por bilhares a descrição da função de onda é baseada no conceito da teoria eikonal, segundo a qual a autofunção ψ pode ser localmente representada pela superposição de um número infinito de ondas planas com um mesmo módulo do vetor de onda, mas com fases e direções aleatórias [23]. Então,

pelo teorema do limite central, ψ é uma variável gaussiana aleatória. Sendo um fato bem conhecido que a superposição de poucas variáveis aleatórias distribuídas da mesma forma já é o suficiente para termos uma boa aproximação de uma distribuição gaussiana [24]. Assim, como acreditamos que a distribuição das amplitudes das funções de onda, em sistemas caóticos, é gaussiana, existe a possibilidade de que para determinados autoestados de um problema caótico, seja possível encontrar o fenômeno da localização da função de onda (um efeito que pode ser entendido em termos de interferências construtivas e destrutivas de fases aleatórias), e a isto pode-se atribuir, em alguns casos, a presença de caos no sistema.

2.3 Cicatrizes

Em 1984 Heller [20], causou grande sensação ao apresentar o que chamou de cicatrizes [25]. Ele demonstrou que para determinados autoestados de um sistema caótico, é possível que a função de onda seja mais intensa justamente sobre regiões do espaço de configuração onde haveria órbitas periódicas instáveis do sistema clássico correspondente. A figura 2.3, mostra um exemplo disto.

2.4 Caracterização de caos ondulatório

Como citamos na introdução o chamado caos ondulatório, “wave chaos”, aparece em sistemas quânticos para os quais o correspondente clássico não é caótico. Pertencendo a esta classe estão os sistemas quase integráveis [17] e os pseudo-integráveis [26], para os quais as órbitas clássicas instáveis tem medida nula. Os métodos de caracterização de caos ondulatório são os já mencionados para o caos quântico “usual”, ou seja, análise do espectro de energia, localização e aparecimento de padrões irregulares para a função de onda, etc.(ver, por exemplo, as análises feitas em [27]). Uma diferença, entretanto, é que talvez não haja mais sentido em falar em cicatrizes, uma

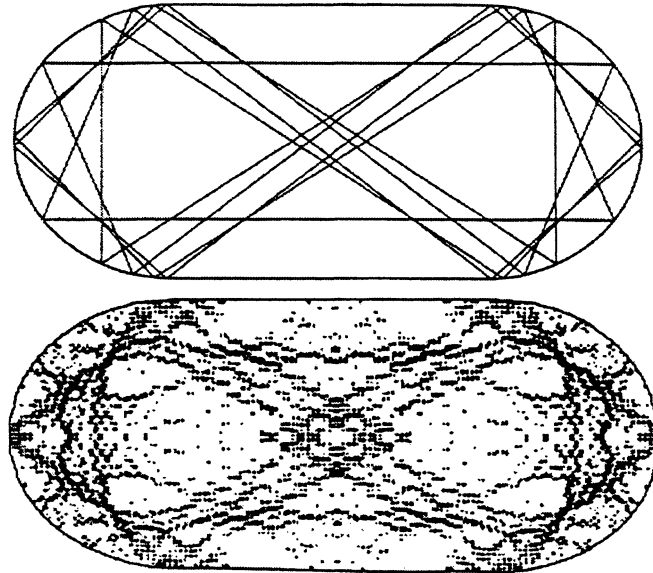


Figura 2.3: Acima: órbita clássica altamente instável; abaixo: um autoestado deste mesmo sistema quantizado, fonte [25].

vez que o análogo clássico não é caótico, mas este é ainda um ponto em aberto.

Diferentes mecanismos são propostos para explicar a origem do caos ondulatório. A expansão em uma área finita (do espaço de fase quântico) de tais órbitas de medida nula [28] e tunelamento [27] podem gerar a complexidade observada nestes sistemas. Em particular temos o problema de espalhadores pontuais, modelados por funções δ , dentro de bilhares integráveis [28, 18]. Neste caso é a difração que gera caos quântico.

É importante mencionar que o limite semiclássico usual para potenciais tipo δ não fornecem resultados muito bons [10]. Face a todas as observações feitas acima, o surgimento de caos nos sistemas discutidos acima são melhores caracterizados por caos ondulatório.

Capítulo 3

Os sistemas a serem estudados

Neste capítulo apresentamos os sistemas que iremos analisar nesta dissertação, bem como os métodos utilizados para a obtenção dos seus autovalores e autovetores. Sempre consideramos sistemas compostos por duas partículas, com μ_1 massa da partícula 1, μ_2 massa da partícula 2. Daqui para frente iremos definir o parâmetro β como sendo a razão entre as massas, ou $\beta = \mu_2/\mu_1$.

1 - Condições de Contorno Periódicas - (Círculo)

Esse sistema pode ser imaginado (figura 3.1) como um círculo de perímetro

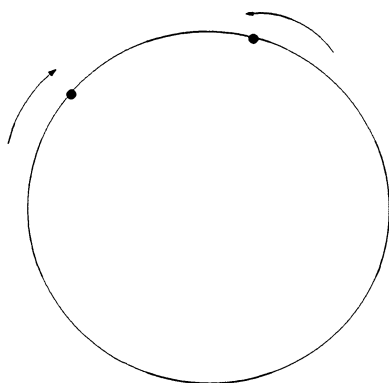


Figura 3.1: Desenho esquemático de duas partículas que se movem num círculo.

L onde as duas partículas se movem livremente, exceto quando se chocam. Assim podemos definir a interação entre elas através de um potencial dado por $V(x_1, x_2) = \lambda\delta(x_1 - x_2)$. Este sistema doravante será chamado de círculo.

O hamiltoniano deste é então

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \lambda\delta(x_1 - x_2),$$

onde μ_1 é a massa da partícula 1, μ_2 é a massa da partícula 2, e λ é a intensidade do potencial de interação. Os parâmetros livres neste caso são λ a intensidade do potencial de interação e β a relação entre as massas. A função de onda satisfaz as condições $\varphi(x_1, x_2) = \varphi(x_1 + L, x_2) = \varphi(x_1, x_2 + L) = \varphi(x_1 + L, x_2 + L)$.

Sistemas com condições de contorno periódicas semelhantes aos nossos já foram estudados, quando: (i) dois bósons interagem por meio de um potencial tipo δ [13] (Apêndice A), (ii) quando duas partículas distinguíveis de massas iguais interagem por meio de um potencial tipo δ (McGuire em [13]). A solução para uma única partícula dentro do círculo é bastante simples e conhecida (rotor rígido [29]). Entretanto não existem soluções analíticas para o caso geral de duas partículas de massas diferentes, hamiltoniano acima.

2 - Condições de Contorno Periódicas com potencial externo tipo δ

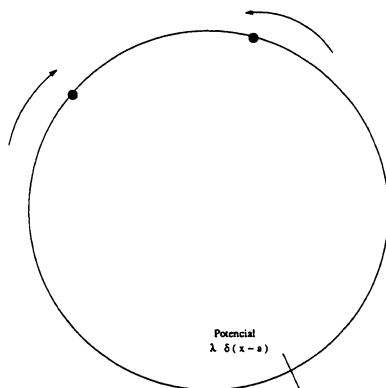
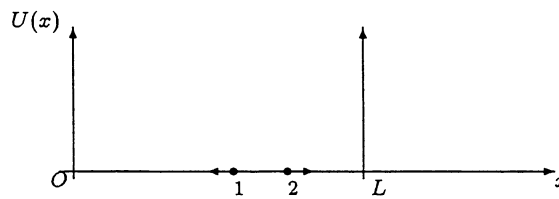


Figura 3.2: Desenho esquemático

4 - Caixa unidimensional

Neste sistemas temos 2 partículas dentro de uma caixa unidimensional com paredes infinitas, que interagem entre si por meio de um potencial de interação dado por $V(x_1, x_2) = \lambda\delta(x_1 - x_2)$. Assim chamaremos este sistema de caixa.

Podemos visualizar este sistema da seguinte forma:



O hamiltoniano é dado por

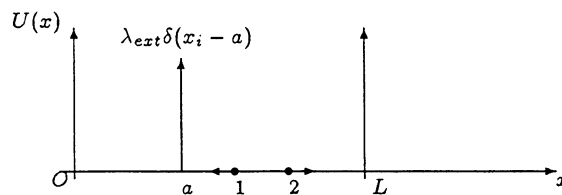
$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \lambda\delta(x_1 - x_2),$$

Sendo que as condições de contorno aqui exigem que a função de onda seja nula sempre que alguma das partículas esteja em $x = 0$, ou em $x = L$.

Os parâmetros livres do sistema são: λ e β .

5 - Caixa unidimensional com potencial δ externo

Esquemáticamente temos



Ele difere do anterior pelo fato de existir um potencial externo tipo δ , dado por $V_{ext} = \lambda_{ext}[\delta(x_1 - a) + \delta(x_2 - a)]$, onde λ_{ext} é a intensidade deste potencial externo.

temos $H_0^{(i)}|\phi_n^{(i)}\rangle = E_n^{(i)}|\phi_n^{(i)}\rangle$.

$|\varphi_{nm}\rangle = |\phi_n\rangle|\phi_m\rangle \rightarrow$ Autovetor do problema não perturbado H_0 . Sendo que em sistemas formados por bósons $|\varphi_{nm}\rangle$ representará o autovetor simetrizado, ou seja, para bósons $|\varphi_{nm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\phi_n\rangle|\phi_m\rangle + |\phi_m\rangle|\phi_n\rangle]$.

Então temos $H \rightarrow$ Hamiltoniano do problema perturbado de tal forma que $H = H_0 + V$, onde V é o potencial de interação entre as partículas mais potencial externo (quando houver).

Portanto

$$H_{nm} = \langle \varphi_{n_1 n_2} | H | \varphi_{m_1 m_2} \rangle = \langle \varphi_{n_1 n_2} | H_0 | \varphi_{m_1 m_2} \rangle + I_{nm},$$

onde

$$I_{nm} = \langle \varphi_{n_1 n_2} | V | \varphi_{m_1 m_2} \rangle.$$

$\langle \varphi_{n_1 n_2} | H_0 | \varphi_{m_1 m_2} \rangle$ são os elementos da matriz diagonal do problema não perturbado, e I_{nm} são os elementos devido ao potencial de interação entre as partículas mais o potencial externo (quando for o caso).

Construção da matriz

A matriz (H) pode ser construída de diversas formas, todos porém devem resolver o problema inicial de relacionar os quatro números quânticos n_1, n_2, m_1, m_2 , aos dois índices usuais de linha e coluna, i e j , respectivamente [30]. Como temos vários índices e queremos construir uma matriz que possui somente dois índices, devemos fazer $h_{nm} = h_{(n_1 n_2, m_1 m_2)} = h_{ij}$, ou seja, $i = (n_1 n_2)$ e $j = (m_1 m_2)$. Por exemplo, supondo que $n_j = 1, 2, 3$ e $m_j = 1, 2, 3$, podemos gerar uma matriz com dimensão nove, onde os elementos de matriz se dispõem da seguinte forma:

(que no nosso caso pode ser V) que é par sob reflexão, tem todos os elementos de matriz iguais à zero, exceto entre estados de mesma paridade.” Gottfried pág 308 [32]. Desta forma, no estudo das estatísticas citadas devemos sempre nos concentrar em uma determinada simetria das soluções, pois estados de simetrias diferentes não estão correlacionados entre si.

Além disso, existe também uma razão de ordem prática para separarmos as simetrias ao diagonalizarmos o hamiltoniano. Ao fazermos isto, temos a matriz H em forma de blocos, e cada bloco pode ser gerado e resolvido em separado. Isto faz com que possamos ter maior precisão numérica, pois ao invés de, por exemplo, diagonalizarmos uma matriz (com 4 simetrias distintas) de 2000×2000 para obtermos os autoestados e autoenergias, podemos diagonalizar 4 matrizes de 2000×2000 , cada uma correspondendo a uma simetria e com isso, logicamente, aumentamos a precisão numérica de nossos cálculos.

Passamos agora a aplicação deste método aos sistemas específicos.

3.2 Sistemas com condições de contorno periódicas

Aqui vamos discutir o método descrito anteriormente aos 3 sistemas que envolvem condições de contorno periódicas, ou seja, círculo, círculo-curto e círculo-ext.

Para utilizarmos o método apresentado na seção anterior, temos que a solução para o sistema com uma partícula livre dentro de um círculo é simplesmente o problema do rotor rígido [29] dada por:

$$\phi = \frac{1}{\sqrt{L}} \exp[2\pi i n x], \text{ com } n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, ..$$

Para duas partículas sem interação dentro do círculo temos

$$\varphi_{n_1 n_2}(x_1, x_2) = \frac{e^{2\pi i(n_1 x_1 + n_2 x_2)/L}}{L}$$

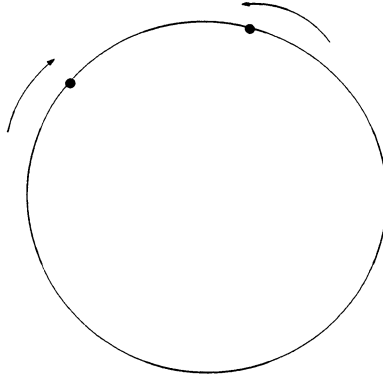


Figura 3.3: Desenho representando duas partículas num círculo.

Usando estas autofunções como base para a nossa matriz, teremos:

$$H_{nm} = \langle \varphi_{n_1 n_2} | H_0 | \varphi_{m_1 m_2} \rangle + I_{nm} \quad (3.1)$$

Por comodidade de notação vamos definir: $\mu_1 = \mu$, $\mu_2 = \beta\mu$, $\lambda = 2\pi^2\hbar^2\sigma/\mu L$ e

$$\Delta(z) = \begin{cases} 0 & : z \neq 0 \\ 1 & : z = 0 \end{cases}$$

Assim

$$\langle \varphi_{n_1 n_2} | H_0 | \varphi_{m_1 m_2} \rangle = \frac{2\pi^2\hbar^2}{L^2\mu} \left(n_1^2 + \frac{n_2^2}{\beta} \right) \Delta(m_1 - n_1) \Delta(m_2 - n_2).$$

O elemento de matriz I_{nm} depende do tipo de potencial de interação, e se há potencial externo ou não, assim temos os casos a seguir.

No círculo

$V(x_1, x_2) = \lambda\delta(x_1 - x_2)$, e portanto

$$I_{nm} = \frac{1}{L^2} \int_0^L dx_1 \int_0^L dx_2 e^{-2\pi i(m_1 x_1 + m_2 x_2)/L} \lambda \delta(x_1 - x_2) e^{2\pi i(n_1 x_1 + n_2 x_2)/L}$$

$$I_{nm} = \frac{2\pi^2\hbar^2\sigma}{L^2\mu} \Delta(m_1 + m_2 - n_1 - n_2).$$

Mas temos agora que analisar as seguintes integrais:

1-)

$$I = \int_0^d dx_1 \int_{x_1-d}^0 dx_2 F_{nm}(x_1, x_2),$$

onde agora $V(x_1, x_2) = V(|x_1, x_2|)$ com $|x_1 - x_2| \leq d$

2-)

$$I = \int_{(L-d)}^L dx_1 \int_0^{x_1+d} dx_2 F_{nm}(x_1, x_2),$$

onde agora $V(x_1, x_2) = V(|x_1, x_2|)$ com $|x_1 - x_2| \leq d$

Desta forma podemos finalmente escrever

$$I_{nm} = \frac{1}{L^2} \int_0^L dx_1 \int_{x_1-d}^{x_1+d} dx_2 \exp[iax_1 + ibx_2] V(|x_1, x_2|), \text{ com } \begin{cases} a = \frac{2\pi}{L}(n_1 - m_1) \\ b = \frac{2\pi}{L}(n_2 - m_2) \end{cases}$$

Fazendo a seguinte mudança de variável $x = x_1 - x_2 \Rightarrow -dx = dx_2$ e escrevendo $F_b = \int_{-d}^{+d} dx \exp[-ibx] V(|x|)$, temos em resumo

$$I_{mn} = \begin{cases} 0 & , \text{ se } (a + b) = \frac{2\pi}{L}(n_1 + n_2 - m_1 - m_2) \neq 0 \\ \frac{1}{L} \int_{-d}^{+d} dx e^{-i\frac{2\pi}{L}(n_2 - m_2)x} V(|x|) & , \text{ se } (a + b) = \frac{2\pi}{L}(n_1 + n_2 - m_1 - m_2) = 0 \end{cases}$$

Apresentamos aqui a solução para dois casos particulares,

1-) Potencial tipo barreira, onde $V(|x_1, x_2|) = V_0 = cte$, então

Para $(n_1 + n_2 - m_1 - m_2) = 0$, temos

$$I_{mn} = \frac{V_0}{L} \int_{-d}^{+d} dx \exp[-i\frac{2\pi}{L}(n_2 - m_2)x],$$

assim se

$$a-) n_2 - m_2 = 0 \Rightarrow I_{nm} = \frac{V_0 2d}{L}$$

Neste caso, definindo V_0 tal que $V_0 = \frac{2\pi^2 \hbar^2 \zeta}{L\mu}$, teremos

$$I_{nm} = 2 \frac{2\pi^2 \hbar^2 \zeta}{L^2 \mu} a.$$

$$b-) n_2 - m_2 \neq 0 \Rightarrow I_{nm} = \frac{V_0}{\pi} \frac{1}{(n_2 - m_2)} \text{sen} \left[\frac{2\pi}{L}(n_2 - m_2)d \right]$$

Assim, fazendo $\lambda_{ext} = \frac{2\pi^2 \hbar^2 \sigma_{ext}}{\mu L}$, teremos

$$I_{nm} = \frac{2\pi^2 \hbar^2 \sigma}{L^2 \mu} \Delta(m_1 + m_2 - n_1 - n_2) + \frac{2\pi^2 \hbar^2 \sigma_{ext}}{L^2 \mu} (\Delta(m_1 - n_1) + \Delta(m_2 - n_2)),$$

e se definirmos $\epsilon = E \left(\frac{2\pi^2 \hbar^2}{L^2 \mu} \right)^{-1}$, onde E é o autovalor de energia e ϵ o autovalor normalizado, teremos que diagonalizar a matriz dada por:

$$h_{nm} = \left(n_1^2 + \frac{n_2^2}{\beta} \right) \Delta(m_1 - n_1) \Delta(m_2 - n_2) + \sigma \Delta(m_1 + m_2 - n_1 - n_2) + \sigma_{ext} (\Delta(m_1 - n_1) + \Delta(m_2 - n_2)).$$

Construção da matriz e a separação das simetrias

Círculo e círculo-curto

Ao observarmos os resultados acima, verificamos que tanto o círculo quanto o círculo-curto, só possuem elementos fora da diagonal principal quando $m_1 + m_2 - n_1 - n_2 = 0$, e isto faz com que a separação de simetrias em ambos os casos seja idêntica.

Ao construirmos a matriz (figura 3.4), observamos que podemos separá-la em forma de 5 blocos devido à 5 simetrias.

(i) Quando ambas as partículas possuem o mesmo k (vetor de onda do problema não perturbado), porém em sentidos opostos, ou seja, $k_1 = -k_2$ ($k_1 = 2\pi n$, $k_2 = 2\pi m$).

(ii) Quando $k_1 + k_2 > 0$ e $k_1 + k_2 = \text{par}$.

(iii) Quando $k_1 + k_2 > 0$ e $k_1 + k_2 = \text{ímpar}$.

(iv) Quando $k_1 + k_2 < 0$ e $k_1 + k_2 = \text{par}$.

(v) Quando $k_1 + k_2 < 0$ e $k_1 + k_2 = \text{ímpar}$.

Os autovalores das simetrias 2 e 4, são os mesmos, o que também ocorre entre as simetrias 3 e 5, o que se dá devido ao fato de que tais simetrias são uma a reflexão

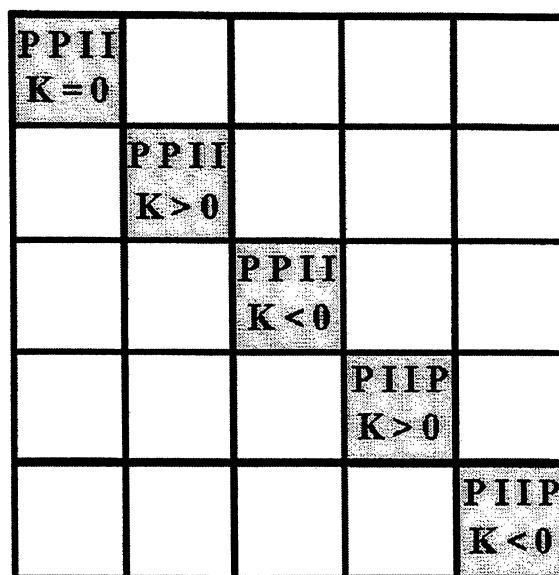


Figura 3.5: Diagrama demonstrativo da separação da matriz em blocos de simetria, aqui $K = k_1 + k_2 = 2\pi(n + m)$. PP significa que tanto n quanto m (n e m são números quânticos) são pares, PI significa que um número quântico é par e o outro é ímpar e assim por diante.

COMPARAÇÃO PARA BÓSONS
(CONDIÇÃO DE CONTORNO PERIÓDICA)

NÍVEL	DIF %	NUMÉRICO	ANALÍTICO
1	0.02	0.498000	0.497900
2	0.06	4.482700	4.481800
3	0.02	12.45200	12.44940
4	0.02	24.40590	24.40102
5	0.02	40.34450	40.33640
10	0.02	179.8078	179.7715
100	0.01	19732.03	19729.13
500	0.00	498205.4	498195.7
1000	0.00	1996211	1996200
1500	0.01	4494214	4493821
2000	0.01	7992258	7991265

Figura 3.6: Tabela comparativa para $\sigma = 100$.

Para o cálculo de I_{nm} temos os casos a seguir.

Para a caixa

$$I_{nm} = \frac{4\lambda}{L^2} \int_0^L \int_0^L \delta(x_1 - x_2) \text{sen}\left(\frac{n_1\pi x_1}{L}\right) \text{sen}\left(\frac{n_2\pi x_2}{L}\right) \text{sen}\left(\frac{m_1\pi x_1}{L}\right) \text{sen}\left(\frac{m_2\pi x_2}{L}\right) dx_1 dx_2. \quad (3.4)$$

Integrando a delta e fazendo-se uma mudança de variáveis, $\xi = \frac{x}{L}$, a integral fica

$$I_{nm} = \frac{4\lambda}{L} \int_0^1 \text{sen}(n_1\pi\xi) \text{sen}(n_2\pi\xi) \text{sen}(m_1\pi\xi) \text{sen}(m_2\pi\xi) d\xi,$$

que pode ser encontrada através de identidades trigonométricas. O resultado final pode ser escrito como

$$I_{nm} = \frac{\lambda}{2L} \Delta_b, \quad (3.5)$$

onde

$$\begin{aligned} \Delta_b &= \Delta(n_1 + n_2 + m_1 + m_2) - \Delta(n_1 + n_2 - m_1 + m_2) \\ &\quad - \Delta(n_1 - n_2 + m_1 + m_2) + \Delta(n_1 - n_2 - m_1 + m_2) \\ &\quad - \Delta(n_1 + n_2 + m_1 - m_2) + \Delta(n_1 + n_2 - m_1 - m_2) \\ &\quad + \Delta(n_1 - n_2 + m_1 - m_2) - \Delta(n_1 - n_2 - m_1 - m_2). \end{aligned}$$

Para simplificarmos um pouco a notação convém normalizar as equações (3.3) e (3.5), vamos definir $\mu = \mu_1$, $\mu_2 = \beta\mu$, $\lambda = \frac{\hbar^2\pi^2}{\mu L}\sigma$ e $\Delta_a = \Delta(m_1 - n_1)\Delta(m_2 - n_2)$. Substituindo nas equações temos

$$\langle \varphi_{n_1 n_2} | H_0 | \varphi_{m_1 m_2} \rangle = \frac{\hbar^2\pi^2}{2l^2\mu} \left(m_1^2 + \frac{m_2^2}{\beta} \right) \Delta_a$$

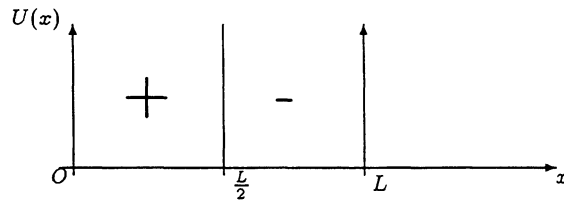
e

$$I_{nm} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2l^2\mu} \sigma \Delta_b.$$

Definindo agora, $\varepsilon = E \left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2l^2\mu} \right)^{-1}$, teremos que diagonalizar a matriz $h = H / \frac{\hbar^2\pi^2}{2l^2\mu}$, ou

$$h_{nm} = \left(m_1^2 + \frac{m_2^2}{\beta} \right) \Delta_a + \sigma \Delta_b \quad (3.6)$$

e para paridade ímpar a função de onda é antisimétrica



A matriz (H) possui dois termos. O primeiro está relacionado a energia cinética e envolve um conjunto de funções Δ (definidas no texto) que fazem com que este termo se anule em qualquer posição fora da diagonal principal. O segundo está relacionado a energia potencial e também envolve um conjunto de Δ 's, onde agora encontramos elementos não nulos em diversas posições da matriz, porém sendo bastante esparsos. Podemos gerar a matriz (H) em forma de blocos se tomarmos o cuidado de dispor os números quânticos de um modo particular. Analisando as Δ 's isto é conseguido quando seus argumentos envolvem três números quânticos pares e um ímpar, ou vice-versa. Assim a condição imposta para que um elemento de matriz devido ao potencial não seja certamente nulo é

$$n_1 + n_2 + m_1 + m_2 = \text{par} . \quad (3.9)$$

Também consideramos o caso das partículas serem idênticas. Conforme já discutimos anteriormente, em nossos estudos não há interesse nos férmions, assim trabalharemos apenas com bósons.

Construindo a matriz seguindo as idéias discutidas, o hamiltoniano sempre terá dois blocos totalmente nulos, resultantes da não verificação da condição (3.9) e dois outros blocos parcialmente nulos contendo cada um no caso de $\beta = 1$, duas simetrias, onde a maior delas é relativa aos estados simétricos \rightarrow bósons, e menor contém os estados anti-simétricos \rightarrow férmions (no caso de $\beta \neq 1$ os blocos não se subdividem). A forma geral do hamiltoniano com todas as suas simetrias separadas em blocos, na diagonal principal será:

Capítulo 4

Resultados

Neste capítulo apresentamos típicos resultados para os sistemas em estudo, primeiramente discutiremos sistemas tipo círculo e depois os sistemas tipo caixa, sendo que, nas estatísticas $P(s)$ e $\bar{\Delta}_3$ foram utilizados os quatrocentos primeiros níveis de energia, e nos gráficos da função de onda foram calculados 200×200 pontos e as matrizes foram truncadas com o tamanho de 1000×1000 . Adiaremos para o próximo capítulo as discussões e interpretações dos resultados.

4.1 Círculo

Fizemos uma análise variando σ (potencial de interação normalizado) e β (relação entre as massas) exaustivamente para este caso. O sistema sempre apresentou comportamento regular, isto sendo verdade tanto para bósons quanto para partículas distinguíveis. Resultados típicos das estatísticas $P(s)$ e $\bar{\Delta}_3$ são apresentados na figura 4.1.

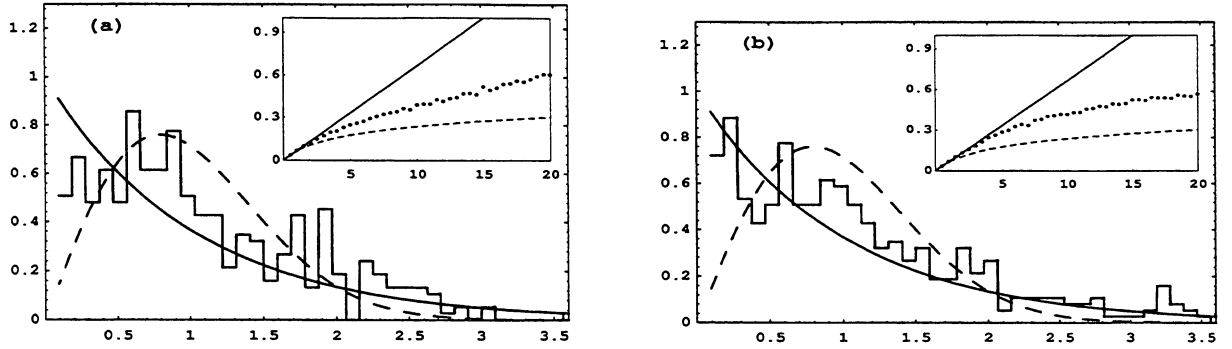


Figura 4.2: Estatísticas para o círculo-ext: (a) Estatísticas $P(s)$ (externo) e $\bar{\Delta}_3$ (interno), com $\beta = 1.5707963$, $\sigma = 108$ e $\sigma_{ext} = 1$, (b) Estatísticas $P(s)$ (externo) e $\bar{\Delta}_3$ (interno), com $\beta = 1.5707963$, $\sigma = 514$ e $\sigma_{ext} = 10$ (intensidade do potencial externo). Aqui foram utilizados os 400 primeiros níveis de energia.

próximos de 1000, os resultados típicos para bósons estão apresentados na figura 4.3 (a até b) e para partículas distinguíveis com massas diferentes na figura 4.3 (c até f). Apresentamos também o gráfico de algumas autofunções para bósons (figura 4.4), onde pode-se perceber claramente a simetria deste sistema. Para partículas distinguíveis com $\beta \neq 1$ os gráficos das autofunções estão nas figuras 4.5 e 4.6. Na figura 4.5 podemos observar que, ao contrário do que ocorre com partículas de massas iguais, os padrões das autofunções mudam significativamente ao alterarmos a intensidade do potencial de interação, já na figura 4.6 podemos verificar que a variação dos parâmetros β (relação entre as massas) e σ (intensidade do potencial de interação), pode gerar até mesmo regiões proibidas para as partículas. É interessante que Lewenkopf [37] estudou um sistema quântico, onde em uma das situações a partícula estava confinada em uma caixa bi-dimensional, havendo um potencial externo em $x = y$, de modo que $V(x,y) = \delta(x - y)$. É fácil de ver que este sistema equivale ao de duas partículas com massas iguais em nossa caixa unidimensional interagindo por meio de $V(x_1, x_2) = \delta(x_1 - x_2)$ (figura 4.7). Em seu artigo, Lewenkopf, assim como nós, também não encontrou caos nesta situação.

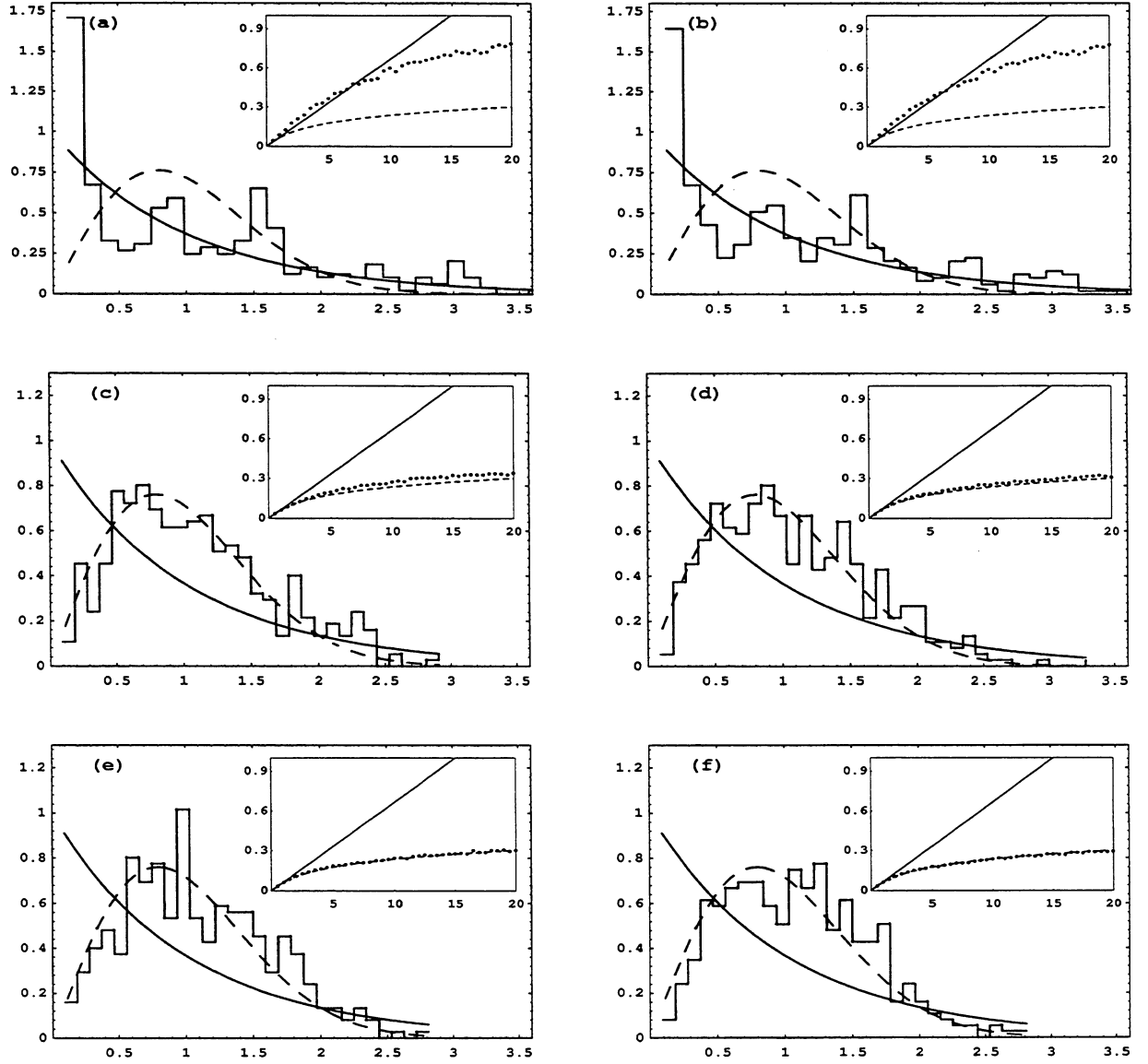


Figura 4.3: Caixa: (a) Estatísticas $P(s)$ e $\bar{\Delta}_3$ para bósons com $\sigma = 941$, (b) Idem (a) com $\sigma = 179$. (c) Estatísticas $P(s)$ e $\bar{\Delta}_3$ para relação de massas $\beta = 0.634543$ e com $\sigma = 108$, (d) Idem (c) com $\beta = 0.823124$ $\sigma = 514$. (e) Estatísticas $P(s)$ e $\bar{\Delta}_3$ para relação de massas $\beta = 0.611032$ e com $\sigma = 324$, (f) Idem (e) com $\beta = 0.596787$ $\sigma = 179$.

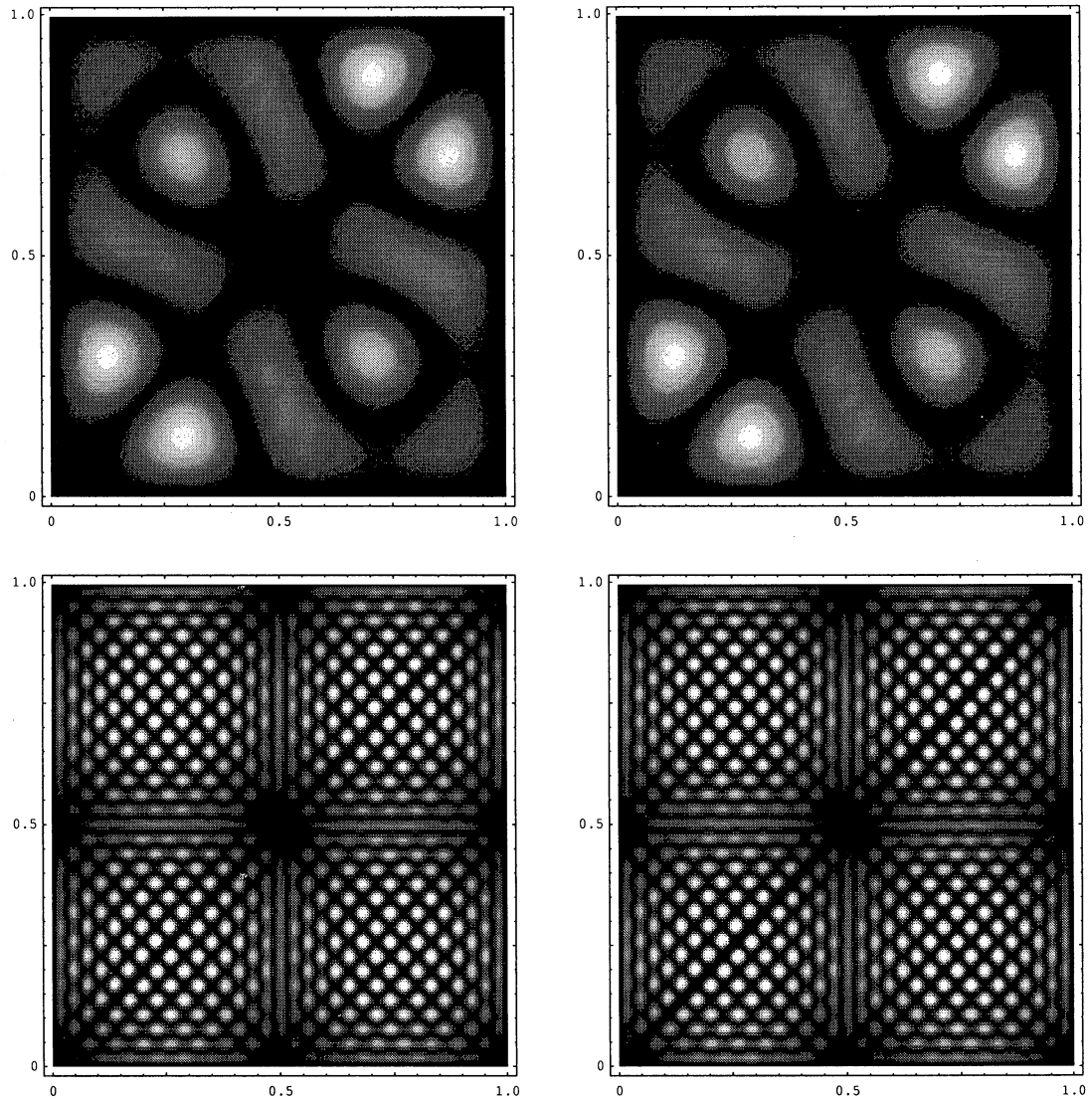


Figura 4.4: Caixa: acima à esquerda gráfico da função de onda para o autoestado 5 com autovalor igual a 29.12, para bósons com $\sigma = 108$. Acima à direita gráfico da função de onda para o autoestado 5 com autovalor igual a 29.22, para bósons com $\sigma = 997$. Abaixo à esquerda gráfico da função de onda para o autoestado 205 com autovalor igual a 1098.66, para bósons com $\sigma = 108$. Abaixo à direita gráfico da função de onda para o autoestado 205 com autovalor igual a 1102.24, para bósons com $\sigma = 997$. Note que aqui mesmo havendo uma grande variação na intensidade do potencial de interação entre as partículas as autofunções apresentam pouquíssimas alterações.

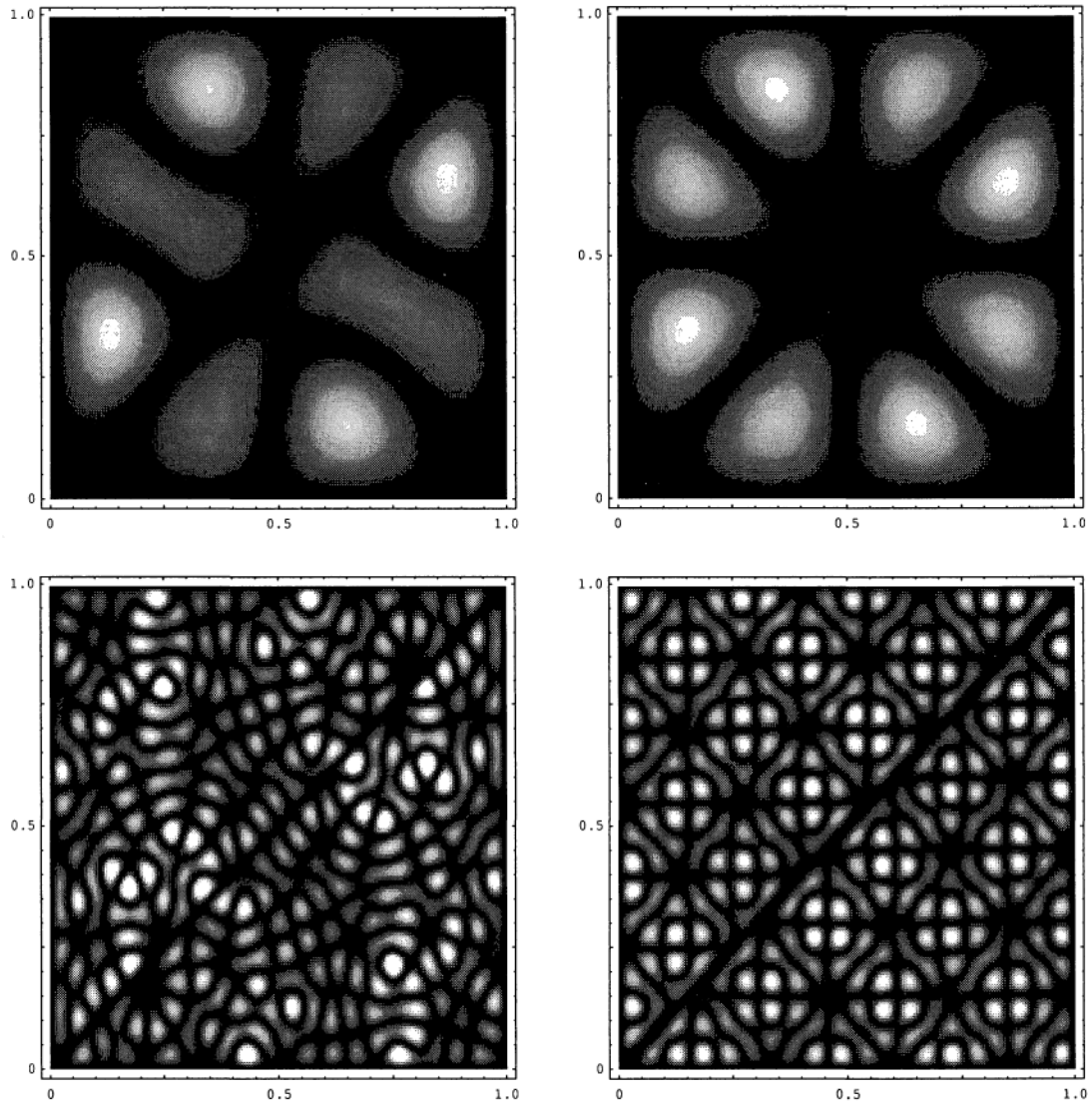


Figura 4.5: Caixa: acima à esquerda gráfico da função de onda para o autoestado 5 com autovalor igual a 25.73, para caixa com $\beta = 0.634543$ e $\sigma = 108$. Acima à direita gráfico da função de onda para o autoestado 5 com autovalor igual a 20.83, para caixa com $\beta = 0.923565$ e $\sigma = 997$. Abaixo à esquerda gráfico da função de onda para o autoestado 205 com autovalor igual a 719.84, para caixa com $\beta = 0.634543$ e $\sigma = 108$. Abaixo à direita gráfico da função de onda para o autoestado 205 com autovalor igual a 598.27, para caixa com $\beta = 0.923565$ e $\sigma = 997$. Note que aqui a variação na intensidade do potencial de interação entre as partículas já provoca mudanças significativas nas autofunções.

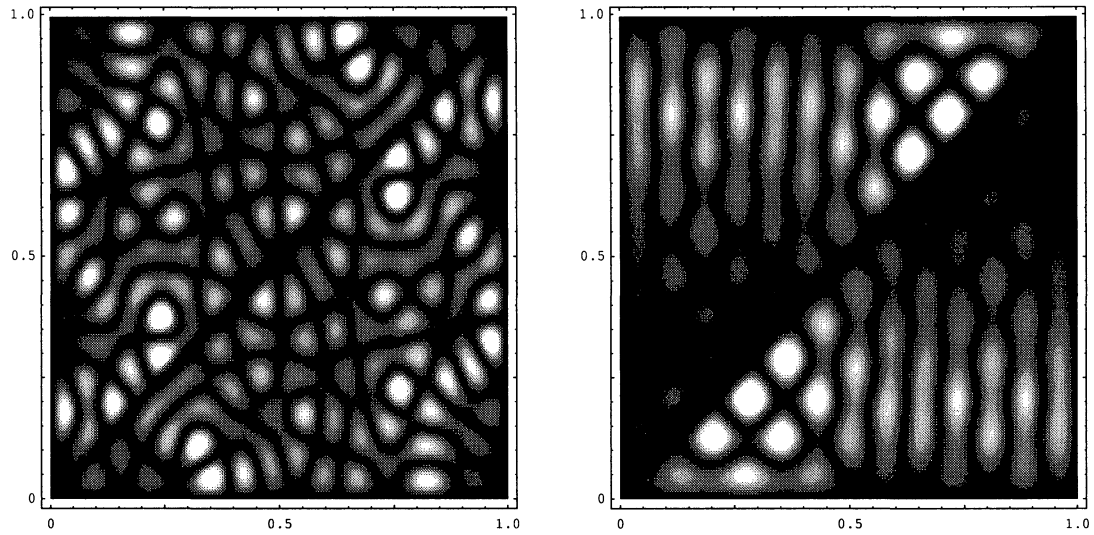


Figura 4.6: Caixa: à esquerda, gráfico da função de onda para o autoestado 105 com autovalor igual a 391.55, para a caixa com $\beta = 0.611032$ e $\sigma = 324$. À direita: gráfico da função de onda para o autoestado 55 com autovalor igual a 181.54, para a caixa com $\beta = 0.834654$ e $\sigma = 335$. Note que neste último gráfico fica evidente que há regiões proibidas para este autoestado.

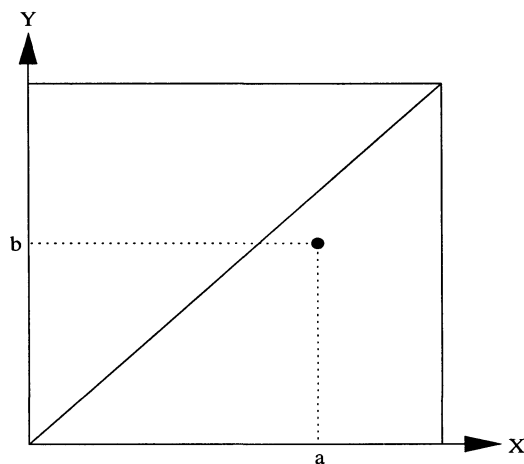


Figura 4.7: 2 part. idênticas interagindo por um potencial $V = \lambda\delta(x_1 - x_2)$ dentro de uma caixa unidimensional pode ser visualizada também como 1 partícula dentro de uma caixa de lados iguais com um potencial externo dado por $V = \lambda\delta(x - y)$.

4.4 Caixa-ext

Aqui, como esperado, os resultados obtidos tanto para os autovalores quanto para os autovetores foram bastante diferentes dos resultados obtidos sem o potencial externo. Variando significativamente os valores de β , σ e σ_{ext} (sendo que a posição do potencial externo também foi variada, mas a menos que se diga o contrário nos sistemas apresentados a posição da δ é $a = 0.25713$), observou-se que sistemas de bósons não apresentam caos (figura 4.8a - figura 4.8d), enquanto que sistemas com $\beta \neq 1$ podem ou não apresentar caos (figura 4.8e e figura 4.8f).

Algo interessante se dá nos gráficos das funções de onda, onde percebe-se claramente a presença do potencial externo, que como as figuras revelam pode até mesmo gerar um confinamento das partículas (figuras 4.10, 4.11, 4.12, 4.13). Outra observação que fizemos foi que para sistemas semelhantes nos quais a única diferença está na posição do potencial externo pequenas alterações nesta posição podem implicar em grandes diferenças na função de onda, como mostra a figura 4.14.

No próximo capítulo apresentamos as discussões e interpretações destes resultados. Antes porém faremos a exposição de algumas novas propostas para caracterização de caos nos problemas aqui analisados.

4.5 Algumas propostas alternativas para a análise dos sistemas estudados neste trabalho

Como mencionamos na introdução, poucos trabalhos foram feitos no sentido de estudar manifestações de caos em sistemas quânticos com poucas partículas. Assim sendo, procuramos analisar aqui fatores peculiares à estes sistemas, para com isso tentar entender como tais fatores poderiam levar a um comportamento caótico. Um aspecto fundamental em sistemas compostos por mais de uma partícula são as

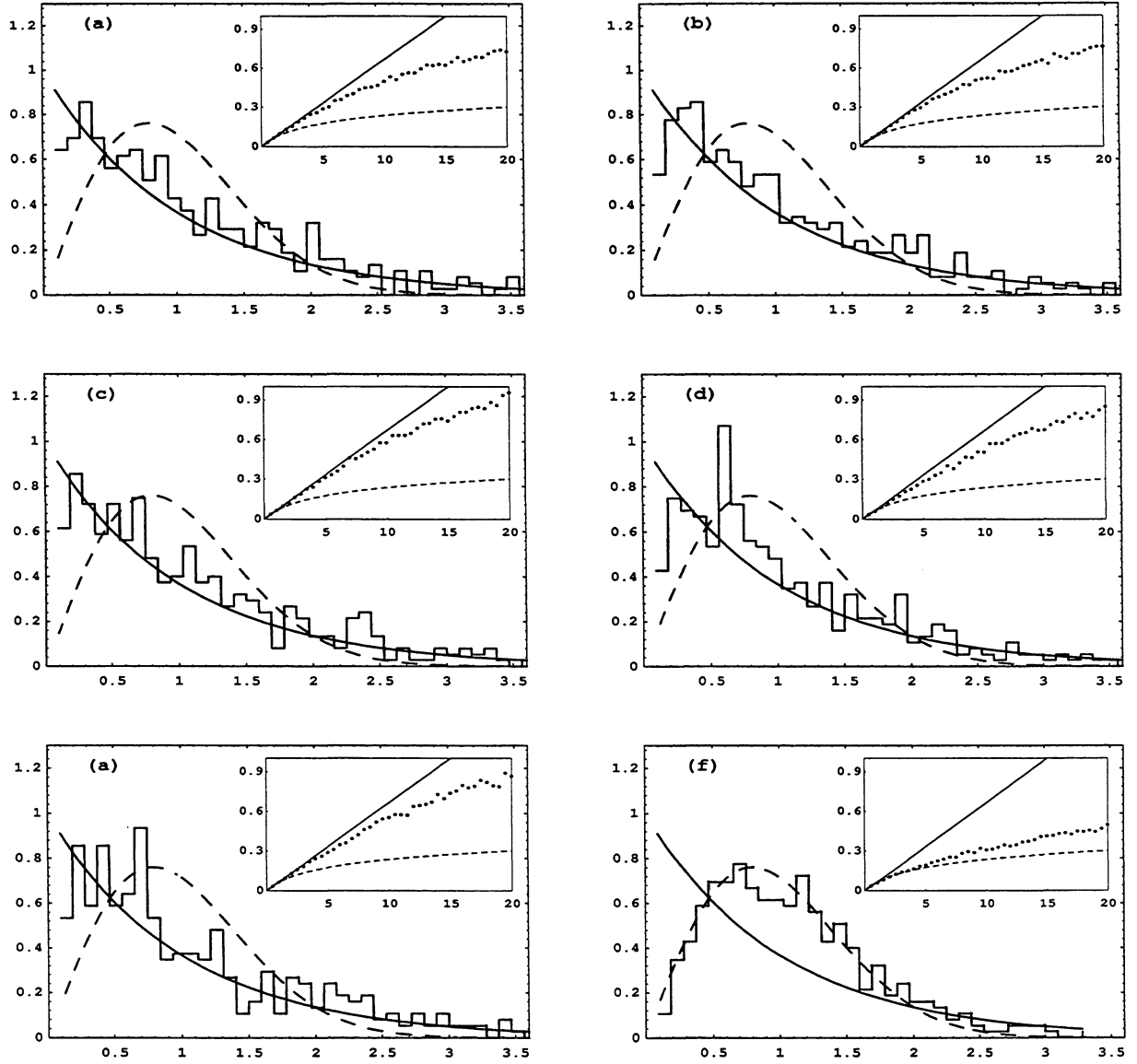


Figura 4.8: Caixa-ext: (a) Estatísticas $P(s)$ e $\bar{\Delta}_3$, para bósons com $\sigma = 324$, $\sigma_{ext} = 30$ e $a = 0.31426$ (posição de ação do potencial externo), (b) Idem anterior com $\sigma = 941$, $\sigma_{ext} = 20$ e $a = 0.31426$. (c) Estatísticas $P(s)$ e $\bar{\Delta}_3$, para bósons com $\sigma = 324$, $\sigma_{ext} = 30$ e $a = 0.41426$, (d) Idem anterior com $\sigma = 941$, $\sigma_{ext} = 20$ e $a = 0.41426$. (e) Estatísticas $P(s)$ e $\bar{\Delta}_3$, com $\beta = 0.924214$, $\sigma = 194$ e $\sigma_{ext} = 5$, (f) Idem anterior com $\beta = 0.611032$, $\sigma = 324$ e $\sigma_{ext} = 10$.

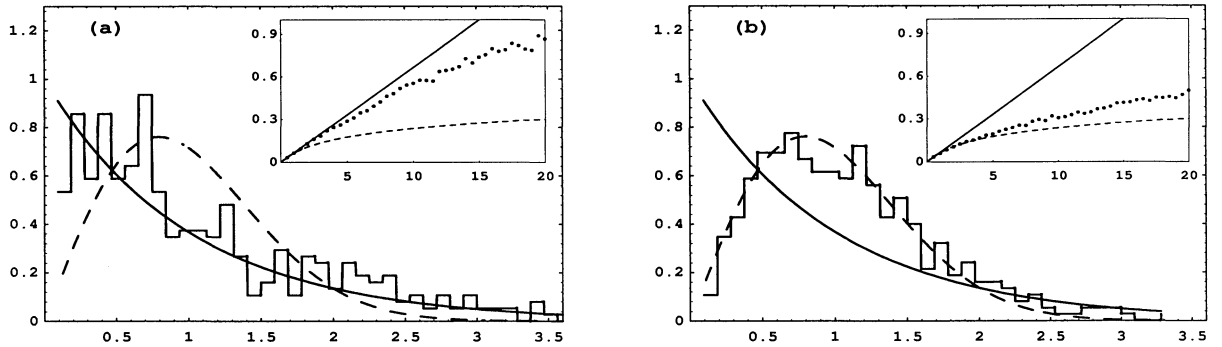


Figura 4.9: Caixa-ext: (a) Estatísticas $P(s)$ e $\bar{\Delta}_3$, com $\beta = 0.924214$, $\sigma = 194$ e $\sigma_{ext} = 5$, (b) Idem anterior com $\beta = 0.611032$, $\sigma = 324$ e $\sigma_{ext} = 10$.

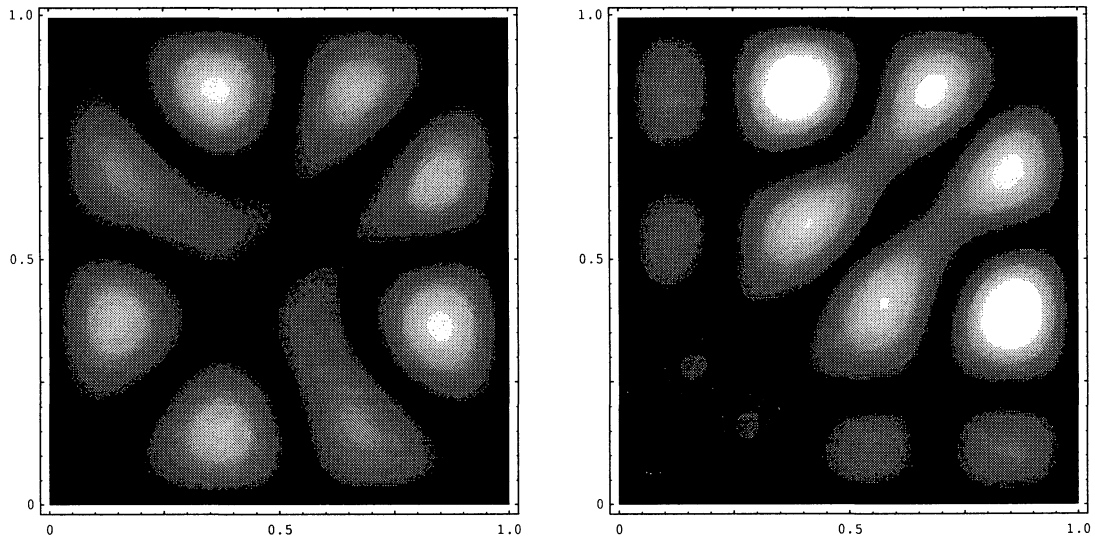


Figura 4.10: Caixa-ext: à esquerda gráfico da função de onda para o autoestado 5 com autovalor igual a 21.25, para bósons com $\sigma = 514$ e $\sigma_{ext} = 1$. À direita gráfico da função de onda para o autoestado 5 com autovalor igual a 23.93, para bósons com $\sigma = 194$ e $\sigma_{ext} = 5$. Note que a variação na intensidade do potencial externo já começa a alterar as autofunções.

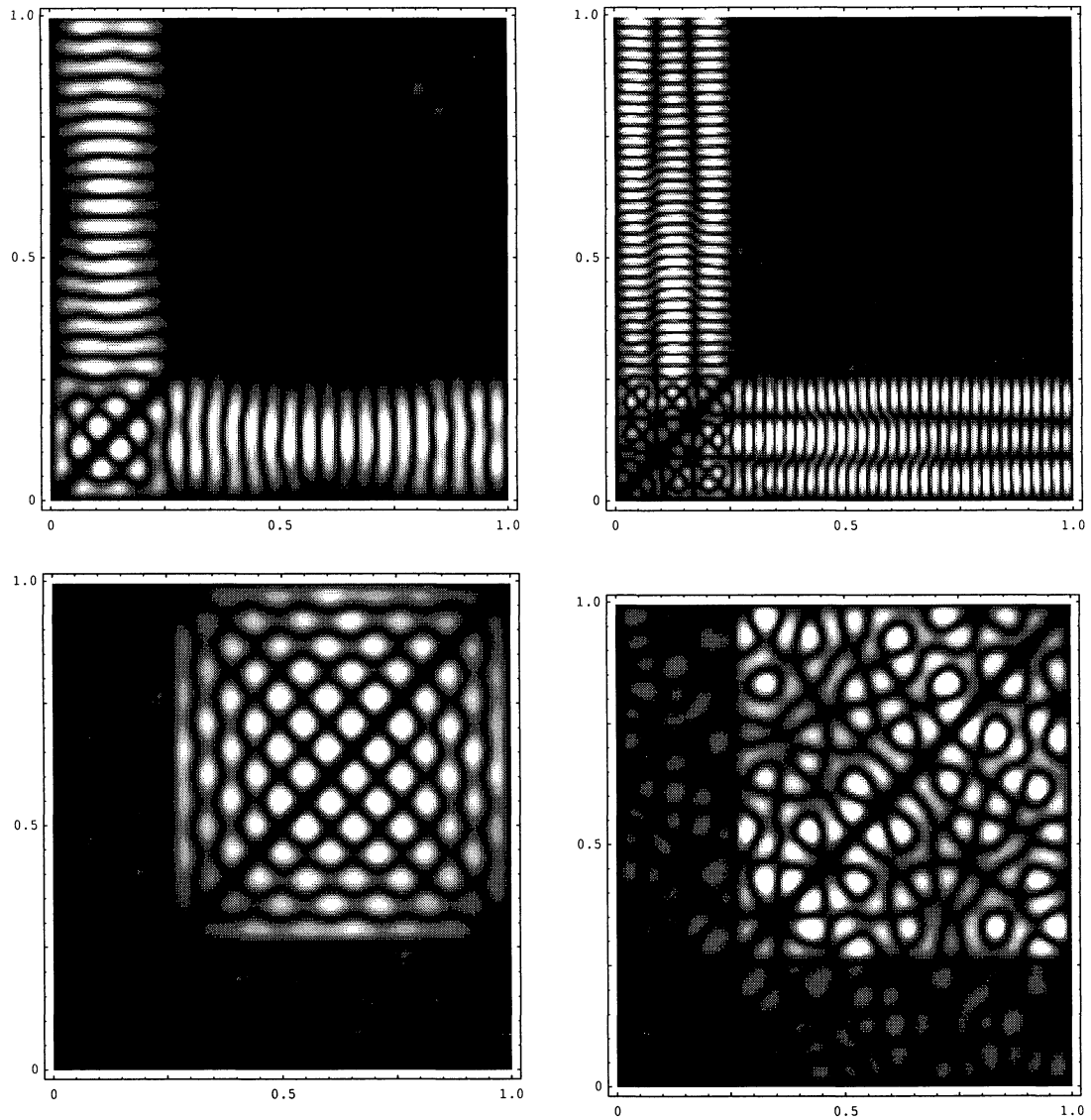


Figura 4.11: Caixa-ext : acima à esquerda gráfico da função de onda para o autoestado 205 com autovalor igual a 599.32, para bósons com $\sigma = 179$ e $\sigma_{ext} = 30$. Acima à direita gráfico da função de onda para o autoestado 750 com autovalor igual a 2110.34, para bósons com $\sigma = 447$ e $\sigma_{ext} = 70$. Abaixo à esquerda gráfico da função de onda para o autoestado 105 com autovalor igual a 622.17, para bósons com $\sigma = 391$ e $\sigma_{ext} = 200$. Abaixo à direita gráfico da função de onda para o autoestado 155 com autovalor igual a 503.36, para bósons com $\sigma = 997$ e $\sigma_{ext} = 300$. Veja que nestas situações ocorre o confinamento das partículas em determinadas regiões, e em alguns casos cada partícula fica numa região distinta da caixa como mostra a figura acima à direita.

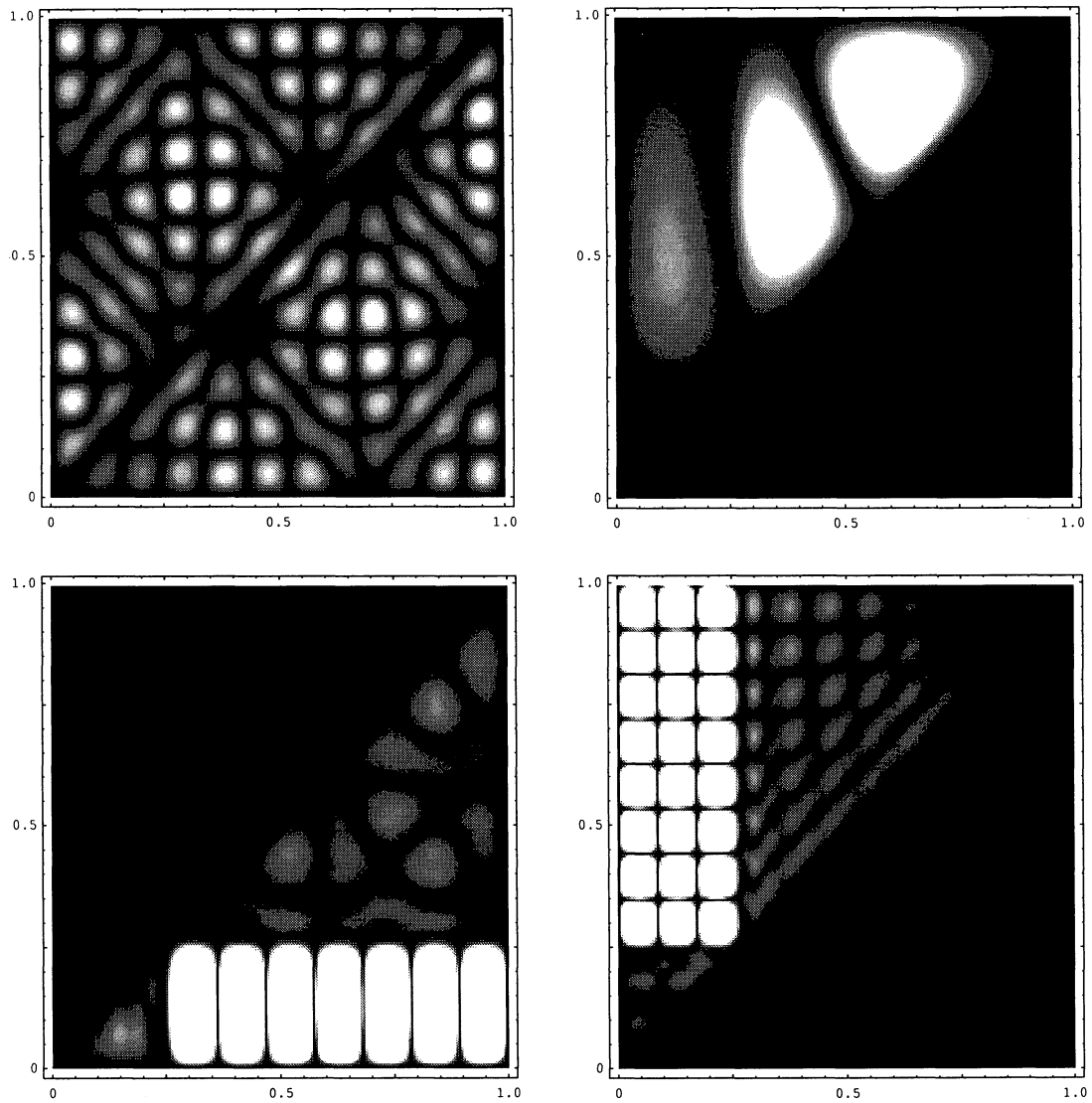


Figura 4.12: Caixa-ext., gráficos das funções de onda: acima à esquerda, para o autoestado 155 com autovalor igual a 253.27, da caixa com $\beta = 0.823124$, $\sigma = 514$ e $\sigma_{ext} = 1$; acima à direita autoestado 5 com autovalor igual a 22.60 , da caixa com $\beta = 0.611032$, $\sigma = 324$ e $\sigma_{ext} = 10$; abaixo à esquerda, autoestado 55 com autovalor igual a 106.12, da caixa com $\beta = 0.845883$, $\sigma = 16$ e $\sigma_{ext} = 50$; abaixo à direita, autoestado 155 com autovalor igual a 271.47, da caixa com $\beta = 0.845883$, $\sigma = 16$ e $\sigma_{ext} = 50$. Veja que só no primeiro caso não houve confinamento das partículas. Sendo que nas duas figuras debaixo vemos que em cada caso as partículas ficam restritas a diferentes regiões da caixa.

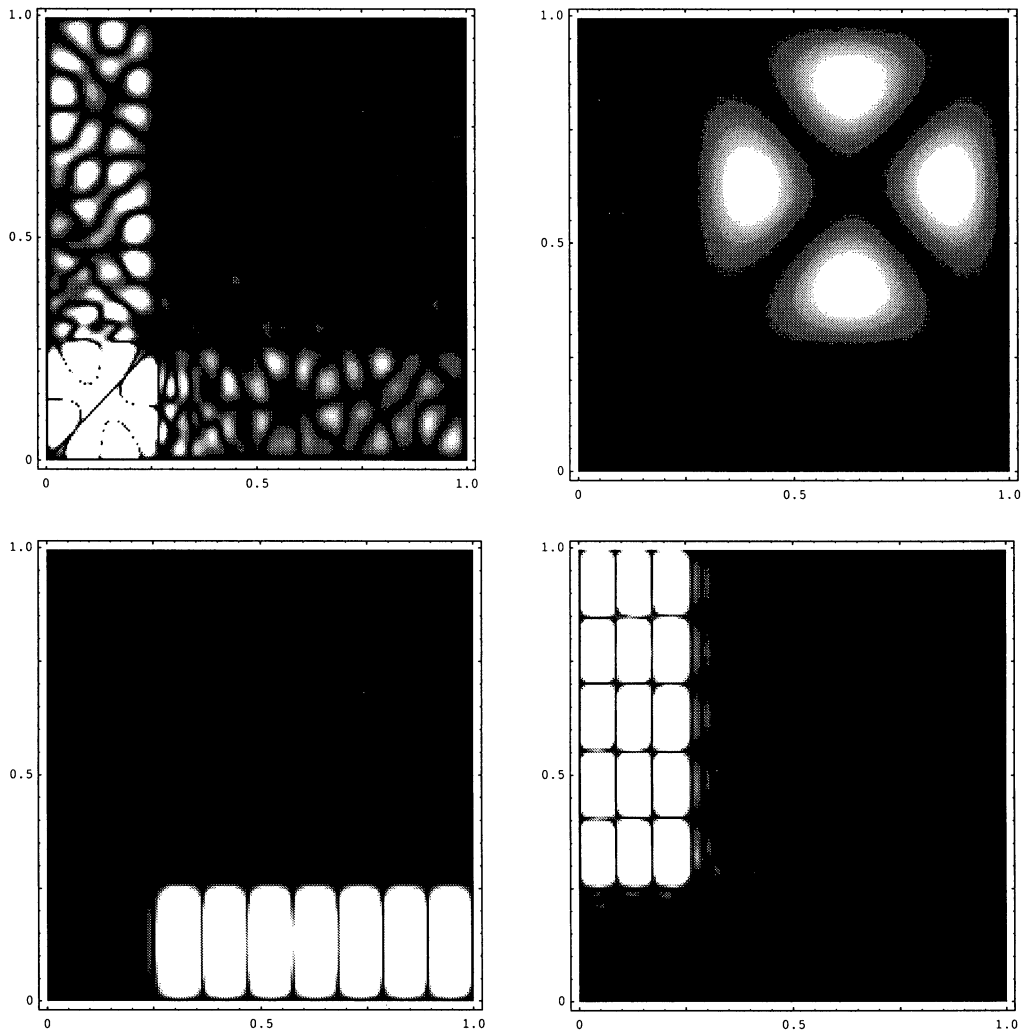


Figura 4.13: Caixa-ext: acima à esquerda gráfico da função de onda para o autoestado 205 com autovalor igual a 362.32, para caixa com $\beta = 0.782647$, $\sigma = 651$ e $\sigma_{ext} = 60$, neste caso houve confinamento das partículas . Acima à direita gráfico da função de onda para o autoestado 5 com autovalor igual a 18.83, para caixa com $\beta = 0.925676$, $\sigma = 447$ e $\sigma_{ext} = 50$, aqui o sistema se comportou como se simplesmente a caixa fosse menor. Abaixo à esquerda gráfico da função de onda para o autoestado 55 com autovalor igual a 110.52, para o mesmo sistema anterior . Abaixo à direita gráfico da função de onda para o autoestado 105 com autovalor igual a 185.09, para o mesmo sistema anterior. Veja que nas duas figuras debaixo em cada caso as partículas ficam restritas a diferentes regiões da caixa.

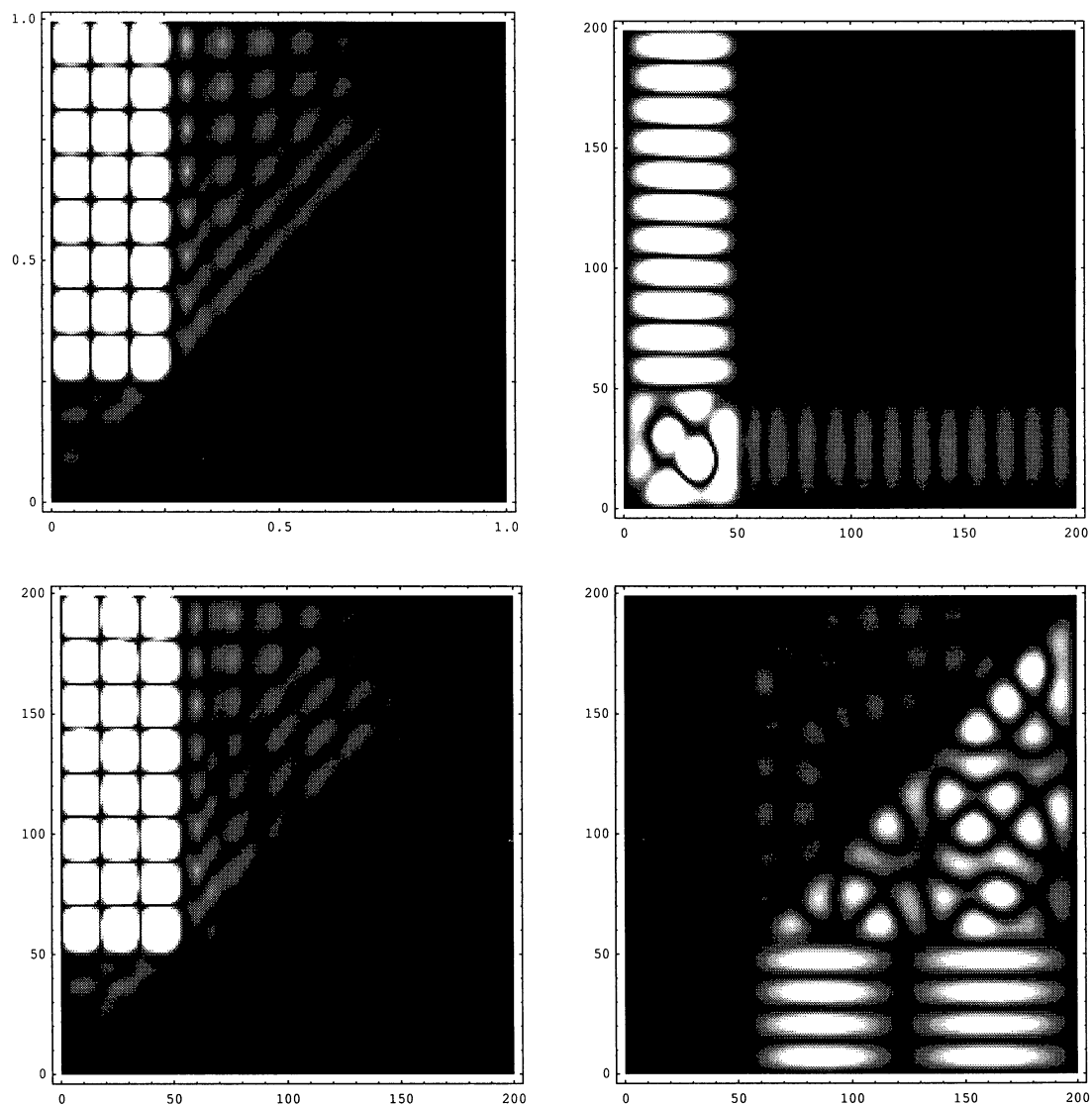


Figura 4.14: Caixa-ext: acima à esquerda gráfico da função de onda para o autoestado 155 com autovalor igual a 271.47, para caixa com $\beta = 0.845883$, $\sigma = 16$ e $\sigma_{ext} = 50$ e $a = 0.25713$. Acima à direita idem anterior com $a = 0.255$, e energia 270.78. Abaixo à esquerda idem anterior mas com $a = 0.260$ e energia 269.58. Abaixo à direita idem anterior mas com $a = 0.265$ e energia 264.88

colisões entre elas. As colisões provocam espalhamento que no caso quântico unidimensional (para o potencial repulsivo não infinito) se transladam em reflexão ou transmissão mútua das partículas (no caso de transmissão temos que uma partícula tunela através da outra). Desta forma nos parece natural investigar como se dá a transferência de energia cinética entre as partículas devido as interações (sempre assumidas serem de curto alcance) e também como se dão as reflexões e transmissões das partículas quando as mesmas colidem (que no caso da transmissão ou tunelamento, são um fenômeno puramente quântico).

4.5.1 Análise da distribuição dos coeficientes da expansão

Primeiramente lembramos que as funções de onda do problema perturbado são escritas como $\psi_n(x_1, x_2) = \sum_{ij} a_{ij}^n \varphi_{ij}(x_1, x_2)$, onde φ_{ij} é autofunção do sistema não perturbado. Assim, uma análise interessante é investigar como se distribuem os $|a_{ij}|^2$, comparando tais distribuições nos casos em que aparece ou não caos quântico. Acreditamos ser razoável esperar que os autoestados dos sistemas caóticos sejam constituídos pela soma de um número bem maior de autoestados não perturbados do que no caso de sistemas não caóticos. A motivação para isto é que como já mencionado supõem-se que funções de onda de sistemas caóticos são basicamente formadas pela combinação linear de infinitas ondas planas de fases aleatórias [23], que em nosso caso significa usar um número maior de estados de base para podermos descrever $\psi_n(x_1, x_2)$. É bom mencionar que um tal tipo de análise já foi feita no contexto de ergodicidade em mecânica quântica na ref. [37].

Para concretizar a idéia discutida acima sobre os coeficientes de expansão $|a_{ij}|^2$ propomos a seguinte metodologia: calcular as distâncias médias (no espaço de números quânticos) entre coeficientes vizinhos que possuem peso significativo, tanto para sistemas caóticos quanto não-caóticos, salvar esta informação para um grande número de autoestados, gerando assim um histograma de tal distribuição, este histograma registra o espaçamento entre os coeficientes que contribuem signifi-

cativamente para os autoestados perturbados.

4.5.2 Transferência de energia

Em bilhares, que são um paradigma no estudo de caos quântico, o comportamento caótico é gerado basicamente pelas condições de contorno, ou seja, a forma do bilhar [18, 30]. Salvo algumas exceções [16, 35], pouco existe no estudo da geração de caos devido a fatores dinâmicos, tais como choque entre as partículas. Como no choque entre as partículas há transferência de momento, logo há também transferência de energia cinética e talvez esta informação seja relevante na caracterização de caos em sistemas de poucas partículas.

Desta forma calculamos o valor esperado da energia cinética de cada uma das partículas do nosso sistema, em função do tempo. Sendo que consideramos que a função de onda inicial do sistema é o produto de duas gaussianas, estando inicialmente uma partícula centrada em \bar{x}_1 e a outra em \bar{x}_2 , tendo as partículas diferentes momentos médios iniciais \bar{p}_i . Os cálculos para os valores esperados de p_i^2 , estão expostos detalhadamente no Apêndice B.

Aqui em detalhes técnicos: é importante estabelecer uma escala de tempo apropriada, assim definimos nossa unidade de tempo τ como sendo o tempo que uma partícula com velocidade $v = v_1 + v_2$ leva para percorrer toda a extensão da caixa, ou seja, $\tau = \mu L / (\hbar(k_1 + k_2/\beta))$ (onde os k 's estão relacionados aos momentos das partículas - Apêndice B).

Capítulo 5

Discussão dos resultados

A partir dos resultados observados no capítulo anterior podemos inicialmente esboçar alguns comentários preliminares. Parece que $\beta \neq 1$ é condição indispensável para gerar caos nos nossos sistemas, além disso, a condição de contorno tipo parede infinita também é bastante importante uma vez que para o círculo não observamos caos quântico mesmo para massas diferentes.

Assim, os resultados nos induzem a acreditar que um fator dinâmico, a diferença de massas, é que gera caos mas, por sua vez, se manifesta apenas para condições geométricas apropriadas, caixa.

Sabe-se de longa data que o “ansatz” de Bethe permite resolver o problema de N corpos interagindo por potenciais δ (Lieb e Liniger em [13]). Basicamente o “ansatz” de Bethe diz que podemos escrever a função de onda de um certo problema fazendo combinações lineares de ondas planas, sendo que dependendo se temos bósons, férmions ou partículas distinguíveis, permutações apropriados dos números de onda devem ser feitas para preservar a paridade correta da função de onda (um exemplo deste tipo de cálculo é apresentado no Apêndice C). Porém o “ansatz” de Bethe não funciona para sistemas de partículas que tenham massas diferentes.

Como mostramos no Apêndice C, se considerarmos a solução de duas partículas quânticas no espaço unidimensional livre, que interagem por um potencial delta, então a troca de momento entre elas se dará da seguinte forma: se elas se chocarem verifica-se a troca de momento exatamente análoga ao que teríamos para o caso de choque de duas partículas clássicas, se elas tunelarem uma pela outra (transmissão) então cada uma permanecerá com o seu momento inicial.

Devido ao fato de termos nossos sistemas confinados, ou no círculo ou na caixa, esperamos, usando uma visão clássica do problema, que existam múltiplos choques entre as partículas e que nesses choques há troca de momento. Ao escrevermos $\psi = \sum c_n \phi_n$, podemos imaginar que os c_n 's estão distribuídos de acordo com a maior ou menor variedade com que diferentes valores para os momentos das partículas são gerados nestas múltiplas interações. Isto está em completa analogia com a idéia de se escrever a função de onda de um bilhar caótico como sendo a combinação linear de infinitas ondas planas que sofrem reflexões nas paredes do bilhar (ver, por exemplo, [38]).

É importante mencionar aqui que Hasegawa em [34] observou no análogo clássico do problema de 2 partículas com $\beta \neq 1$ na caixa uma grande proliferação de diferentes momentos nos processos de choques das partículas entre si e com as paredes. Como encontramos caos para este sistema temos então um forte indício que nosso argumento esteja no caminho certo. É face a estas observações que iremos nos guiar neste capítulo.

Finalmente, uma questão que naturalmente surge é se os pontos discutidos acima são gerais ou apenas particulares a forma especial do potencial, no caso, função δ . Iremos discutir este ponto a seguir para o círculo no caso do potencial de curto alcance constituindo-se em um dos principais resultados desta tese. Logo após estaremos dando a interpretação dos resultados obtidos no capítulo anterior.

5.1 Círculo com potencial geral de curto alcance - solução analítica

No capítulo 3 apresentamos a solução numérica para o problema periódico de duas partículas que interagem por meio de um potencial de curto alcance. Nesta seção apresentamos a solução analítica para este tipo de sistema quando $\beta = 1$. Este sistema pode ser visualizado como mostra a figura 5.1, onde x_1 é a coordenada da partícula 1 e x_2 é a coordenada da partícula 2, sendo que as partes hachurradas indicam aonde se verifica o potencial de interação. Fazendo-se uma mudança de variáveis podemos passar para o referencial do centro de massa, onde $x = x_1 - x_2$, $X = (\mu_1 x_1 + \mu_2 x_2) / (\mu_1 + \mu_2)$, $1/\mu_{rel} = 1/\mu_1 + 1/\mu_2$ e $\mu_{cm} = \mu_1 + \mu_2$. Assim a caixa da figura 5.1 se transforma no losango da figura 5.2a. Nestas novas coordenadas podemos separar os movimentos da distância relativa x (vertical) e do centro de massa X (horizontal). Nas figuras 5.2a e 5.2b vemos que todas as trajetórias na vertical do losango são equivalentes, enquanto que no caso das trajetórias na horizontal temos duas situações distintas, na primeira situação o movimento se dá sempre numa região onde $V = 0$, e na segunda situação o movimento ocorre sempre numa região de potencial constante.

Para se encontrar as autofunções e autovalores para este sistema, pode-se calcular a solução da equação de Schrodinger, ou a função de Green. Sendo que como $G(x_f, x_i, E) = \sum_n \frac{\varphi_n(x_f)\varphi_n^*(x_i)}{(E-E_n)}$, obtemos os autovalores identificando os pólos da função, e as autofunções são dadas pelo resíduo.

Num trabalho recente [39] foi demonstrado como se obtém a função de Green exata para potenciais segmentados (ou seja, potenciais que são nulos fora de certa região). A construção se dá somando-se sobre os caminhos resultantes dos múltiplos espalhamentos. Este método foi derivado para potenciais de suporte compacto distribuídos ao longo de uma linha infinita, mas ele também vale para uma partícula num círculo. Assim optamos por resolver a função de Green. A idéia é

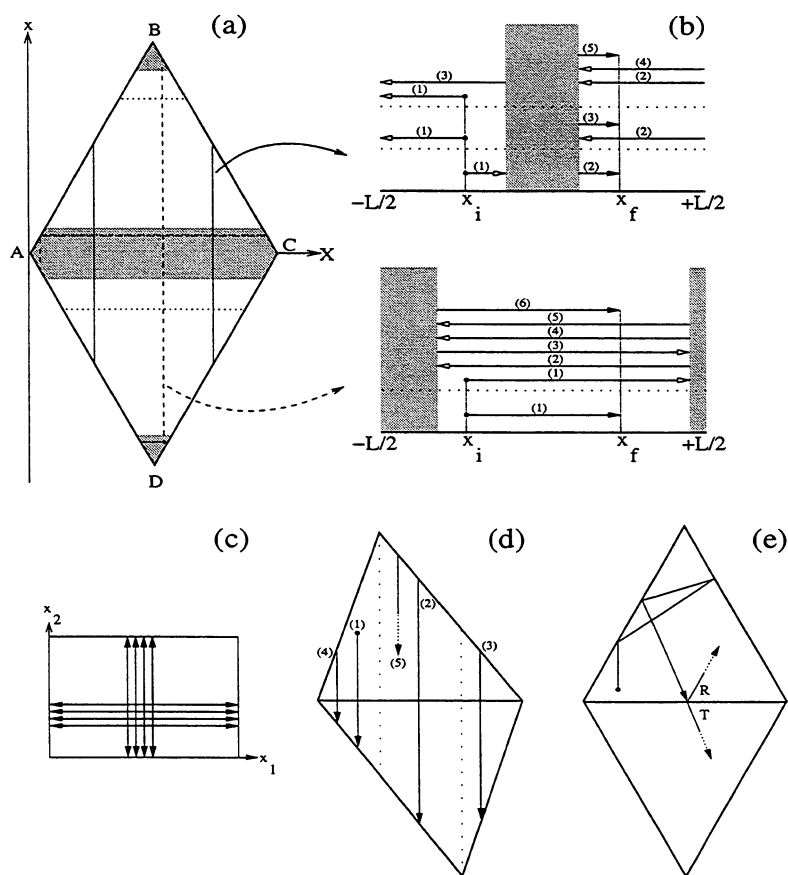


Figura 5.2: (a) representação da figura 5.1 nas coordenadas x e X ; em (b) vemos a representação dos possíveis caminhos de espalhamento relacionados a (a); (c) Indicativo da separação de variáveis num bilhar quadrado; (d) Nesta figura vemos que quando β (a relação entre as massas das partículas) é diferente de 1, as órbitas não são fechadas; (e) Num sistema tipo caixa unidimensional, como as condições de contorno não são periódicas, uma transformação de variáveis igual a que usamos para o círculo não funcionaria, pois além das órbitas não serem periódicas ainda podem ser parcialmente refletidas e parcialmente transmitidas, o que torna impossível o uso da transformação aqui apresentada para se obter a solução para a caixa.

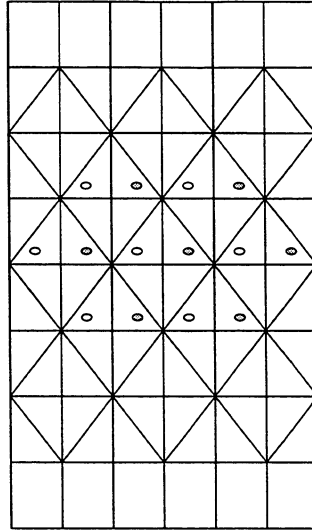


Figura 5.3: Desenho esquemático da “rede”, onde vemos que os pontos hachurrados são equivalentes entre si, assim como os não hachurrados, isto devido as condições de contorno específicas deste tipo de sistema.

onde

$$g^{\pm} = (1 \mp t \exp[ik(L - d)])^2 - (r \exp[ik(L - d)])^2. \quad (5.2)$$

Os resultados do problema são obtidos a partir dos pólos de G , logo:

$$(R \pm T) \exp[ik(L - d)] = \pm 1 \text{ estados simétricos}$$

$$(R \mp T) \exp[ik(L - d)] = \pm 1 \text{ estados anti-simétricos}$$

é a equação transcendental para os k 's e portanto para E_k .

Como sabemos para sistemas separáveis (por exemplo, bilhar quadrado, ver figura 5.2c) a energia total do sistema quântico é obtida somando-se a energia correspondente à quantização de cada uma das direções unidimensional em separado, logo $E = E_{(x)} + E_{(X)}$. Na direção X temos que a quantização é simplesmente a de um rotor rígido, $E_{(X)} = E_K = \frac{\hbar^2 K^2}{(2n\pi L)^2}$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Finalmente temos agora que, para obter a energia total devemos somar $E_K + E_k$. Entretanto, devemos ter cuidado ao fazer tal soma e isto se deve às condições de contorno que devemos impor à função de onda total - ψ . A figura 5.3 ajuda a ver a peculiaridade das condições periódicas deste sistema, como $\overline{AB} \equiv \overline{DC}$ e $\overline{AD} \equiv \overline{BC}$ na figura 5.2a, podemos visualizar isto como uma rede [27] figura 5.3, portanto $\psi(x, X) = \psi(x + L, X + \frac{L}{2}) = \psi(x - L, X + \frac{L}{2}) = \psi(x, X + L)$.

Na figura 5.3 temos periodicidade $2L$ ao longo de x e L ao longo de X . As condições de contorno exigem que as funções de onda sejam iguais a situações onde nos deslocamos $\frac{2L}{2}$ em x e $\frac{L}{2}$ em X . Logo se ganhamos uma fase π ao andarmos L na direção x , também temos que ganhar uma fase π se andarmos $\frac{L}{2}$ em X . Assim não fica difícil de ver que $E_{total} = E_K + E_k$ deve ser escrito como $E_k(\text{anti-simétrica}) + E_K(\text{n=ímpar})$ ou $E_k(\text{simétrica}) + E_K(\text{n=par})$. Por fim a função de onda total ψ pode ser escrita como $\psi = \phi(x)\varphi(X)$ respeitando a combinação apropriada feita para as energias. Assim qualquer que seja V , o cálculo acima fornece a solução analítica exata do problema. Testamos agora para o potencial barreira e potencial triangular (com solução numérica exposta no capítulo 3) e os resultados são mostrados nas tabelas 5.5 e 5.4.

Círculo

O resultado obtido para o círculo pode ser entendido com base nos resultados analíticos expostos anteriormente. Porém, é interessante interpretá-los em termos de dinâmica de choques entre as partículas. A idéia usada aqui ao longo deste capítulo é pensar que estados quânticos do problema surgem seguindo a construção feita para a função de Green, sendo que ψ é o resultado da combinação das múltiplas reflexões de ondas planas. Esta é uma argumentação bastante “pictórica”, mas se mostra muito poderosa dando conta de todos os resultados obtidos neste trabalho. Além disso

**Tabela Comparativa de Autovalores
Potencial de Curto Alcance Tipo Triângulo**

N	Analítico	Numérico
1	1.2259	1.22590
2	1.7259	1.72590
3	3.2259	3.22590
4	4.8621	4.86213
5	5.3621	5.36213
10	10.7728	10.77279
50	48.4866	48.48653
100	85.7259	85.72590

Figura 5.4:

**Tabela Comparativa de Autovalores
Potencial de Curto Alcance Tipo Barreira**

N	Analítico	Numérico
1	1.6825	1.68247
2	2.1825	2.18315
3	3.6825	3.68306
4	6.1825	6.18315
5	6.7202	6.72021
10	14.1825	14.18315
50	59.7097	59.73225
100	111.7080	111.72845

Figura 5.5:

segue a linha de argumentação usada para se entender caos ondulatório. Pensando em termos de troca de momento no caso quântico, como discutido na Apêndice C, neste caso cada partícula pode ter no máximo dois diferentes valores de momento, ou seja, se antes da primeira reflexão a partícula 1 tem momento p_{1i} , após esta reflexão ela passará a ter um momento p_{1f} , mas quando houver uma nova reflexão o seu momento passará a ser novamente p_{1i} , e isto independe do valor de β . Assim sendo o sistema apresenta espectro regular como verificado.

Caixa

O fato de nestes sistemas quando $\beta = 1$ nunca observarmos caos já era esperado, visto que este sistema possui solução analítica [38]. Também podemos entender este fato observando que no momento do “choque” podem ocorrer duas coisas. Primeiro é possível que haja tunelamento, o que evidentemente não geraria caos, pois neste caso uma partícula não sente a outra, e seria o mesmo de termos simplesmente partículas livres. Segundo é possível que haja reflexão, e neste caso a troca de momento, como já vimos, se dá exatamente da mesma forma que no caso clássico, ou seja, partículas com massas iguais quando colidem apenas trocam o momento entre si, ou seja, se antes da colisão o momento da partícula 1 era p_1 , e da partícula 2 era p_2 , após a colisão a partícula 1 passa a ter momento p_2 e a partícula 2 passa a ter momento p_1 , e isto gera pouca complexidade no sistema, o efeito das paridades aqui é apenas de mudar o sentido dos p 's.

Já em sistemas quando $\beta \neq 1$, há um aumento de complexidade em função das múltiplas reflexões que ocorrem entre as partículas e entre cada partícula e as paredes. Quando $\beta = 1$, estas reflexões também ocorrem, mas de forma bem mais ordenada. A tabela abaixo mostra alguns dos possíveis valores para as velocidades de duas partículas rígidas clássicas dentro de uma caixa quando $\beta = 1$, e quando $\beta = 0.8$, sendo que a primeira colisão ocorre no centro da caixa.

interação, enquanto que o seu análogo clássico nunca apresenta caos, nesta situação, estaríamos diante do típico comportamento de caos ondulatório (Shigehara em [18]). Por este motivo, varremos uma grande quantidade de parâmetros em busca de uma tal situação. T. Shigehara [18] mostra tal efeito para sistemas de uma partícula em duas dimensões, nos quais conforme se varia o valor da intensidade de um potencial espalhador pontual vai-se de Poisson a GOE retornando-se a Poisson. Testamos isso para sistemas onde para um determinado valor de σ havia-se constatado caos, e então elevamos σ a valores muito grandes $\sigma \rightarrow \infty$. O que vimos foi que os sistemas com $\beta \neq 1$ (tanto para valores racionais como irracionais) a partir do momento que começam a apresentar caos para certos valores de σ , em geral pequenos, continuam dali em diante a sempre apresentar caos quando aumentamos σ o que parece indicar que para tais relações de massa os sistemas clássicos correspondentes não sejam integráveis, como também especulou Hasegawa [34], ao contrário, apresentam um caos muito “suave” no sentido que o sistema tende a ergodicidade muito lentamente no tempo.

Na figura 5.6, vemos que de fato um autoestado de um sistema caótico é formado pela soma de um número bem maior de autoestados da base não perturbada do que no caso de um sistema não caótico. Também os histogramas dos c_n 's, construído como discutido anteriormente, indicam diferenças entre sistemas caóticos e não caóticos. Ajustamos as curvas típicas para sistemas caóticos e não caóticos obtendo: (i) para sistemas não caóticos $N(\epsilon) = \frac{1}{4}e^{-\frac{3}{4}\sqrt{\epsilon}}$, onde ϵ é o espaçamento entre os coeficientes com peso significativo; e (ii) para sistemas caóticos $N(\epsilon) = \frac{1}{2}e^{-\epsilon^{\frac{2}{3}}}$. Aqui o aspecto mais importante é que em sistemas caóticos os autoestados da base que formam o autoestado perturbado se distribuem de maneira quase contínua, enquanto que em sistemas não caóticos esta distribuição é quase discreta (fig. 5.6) e o reflexo disto no histograma dos c_n 's é o grande pico para valores pequenos de ϵ para os sistemas caóticos, em contraste com os sistemas não caóticos que apresentam um pico bem menor (fig. 5.7). Além disto a figura 5.8 faz um comparativo entre as estatísticas $P(s)$ e $\bar{\Delta}_3$ versus estatística dos coeficientes.

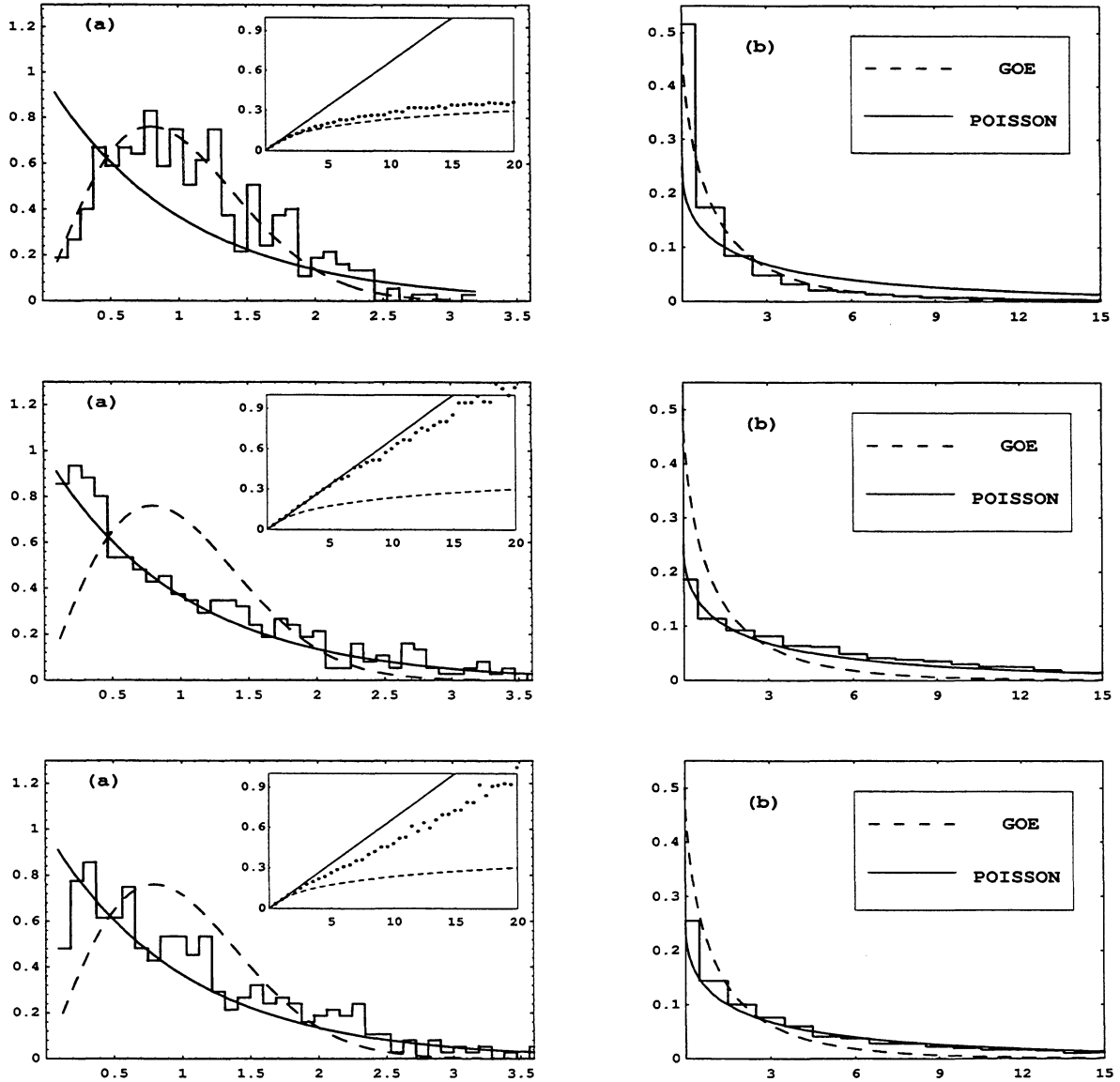


Figura 5.8: COMPARATIVO entre estatísticas, aqui comparamos os resultados obtidos pelas estatísticas $P(s)$ e $\bar{\Delta}_3$ (à esquerda) com a estatística dos c_n^s (à direita), em três situações: acima para sistemas que apresentam caos, no meio para sistemas integráveis, e abaixo para sistemas em regimes intermediários, observe a plena concordância em todos os casos.

Círculo-ext

Para este sistema, desde que as massas não sejam iguais, foi possível encontrar no máximo um “caos fraco”. Ficou evidente pelos resultados, que a impossibilidade de identificarmos uma separação de simetrias (na base escolhida) impediu-nos de observar mais claramente o caos através das estatísticas $P(s)$ e $\bar{\Delta}_3$. Um dos fatores geradores de caos é a inversão dos momentos das partículas quando estas sofrem reflexão devido ao potencial externo, pois isto gera um grande número de possíveis valores para k_1 e k_2 , sendo que dependendo da relação de massas estas mudanças ocorrem mais, ou menos frequentemente, e quando a intensidade do potencial externo vai ao infinito, este sistema torna-se idêntico a caixa unidimensional com interação tipo δ entre as partículas. Este fato nos levou a testar o limite quando $\sigma_{ext} \rightarrow \infty$ e comparar os resultados obtidos para autovalores com aqueles obtidos para a caixa unidimensional. Sendo que os resultados nos ajudaram a entender ainda mais a importância da separação de simetrias, já que apesar de ambos os cálculos fornecerem os mesmos autovalores, as estatísticas feitas para o círculo não identificaram caos, enquanto que para a caixa identificaram caos para valores específicos de σ e β .

Nossa conclusão é que o círculo com potencial externo tipo δ , na realidade é caótico para determinados parâmetros, mas como não há separação possível para as simetrias (na base escolhida, sendo que acreditamos que seja um estudo interessante identificar uma base na qual esta separação seja possível), a sua identificação é difícil. Os gráficos nas figuras 5.9 e 5.10, mostram além das estatísticas tradicionais, a estatística dos coeficientes, que pode estar indicando a presença de caos nestes sistemas.

Caixa-ext

Já em sistemas com massas diferentes encontramos caos em várias circunstâncias. Vamos analisar 4 situações: (1) um sistema apresenta caos quando a intensidade do potencial externo σ_{ext} é zero (figura 5.11), ou seja quando não há potencial externo;

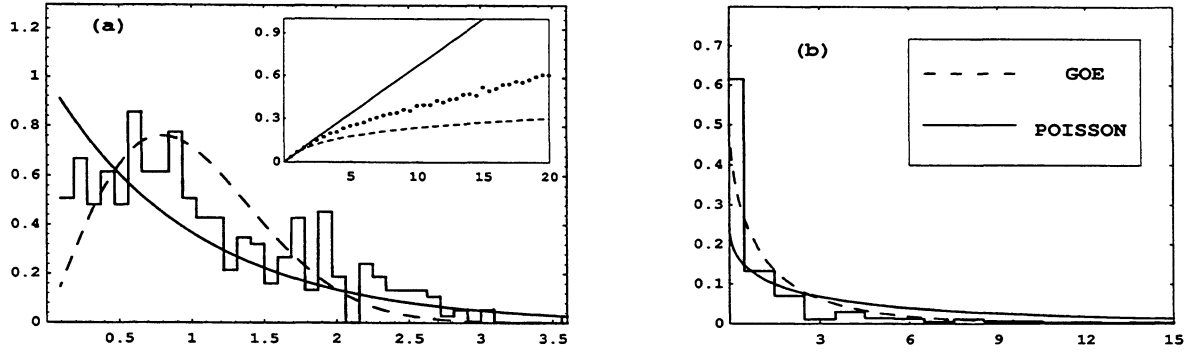


Figura 5.9: Círculo-ext: (a) Estatísticas $P(s)$ e $\bar{\Delta}_3$, com $\beta = 1.5707963$, $\sigma = 108$ e $\sigma_{ext} = 1$, (b) Estatística dos coeficientes para o mesmo sistema.

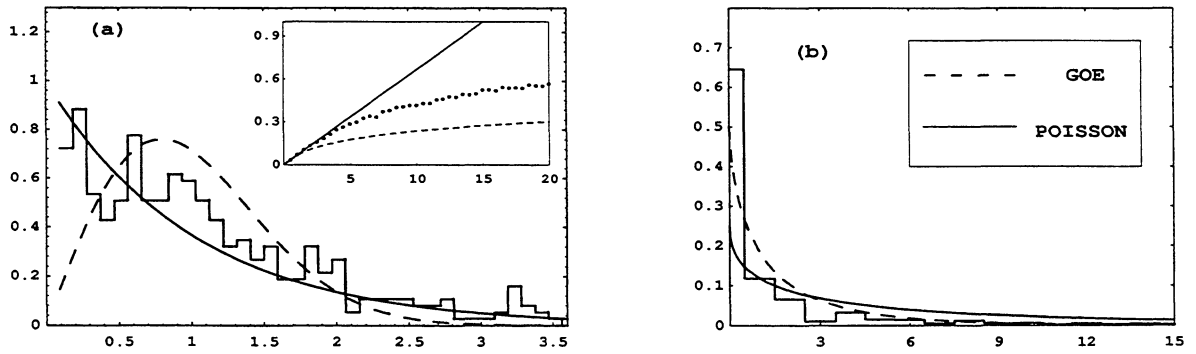


Figura 5.10: Círculo-ext (a) Estatísticas $P(s)$ e $\bar{\Delta}_3$, com $\beta = 1.5707963$, $\sigma = 514$ e $\sigma_{ext} = 10$, (b) Estatística dos coeficientes para o mesmo sistema.

(2) um sistema similar onde acrescenta-se um potencial externo bastante pequeno torna-se aparentemente não caótico (figura 5.12), digo aparentemente porque a presença do potencial externo mistura todas as simetrias, independentemente da intensidade deste potencial, e isto faz com que simetrias inicialmente não correlacionadas se misturem, e assim as estatísticas $P(s)$ e $\bar{\Delta}_3$ acabam sendo feitas com os níveis misturados, o que as faz indicar integrabilidade, quando na verdade o sistema ainda deve ser caótico; (3) ao se aumentar o valor de σ_{ext} , obtêm-se caos (figura 5.13); (4) por fim quando $\sigma_{ext} \rightarrow \infty$, novamente o sistema torna-se não caótico (figura 5.14), sendo que nesta situação queremos ressaltar dois aspectos importantes: (i) claramente que quando $\sigma_{ext} \rightarrow \infty$ há estados nos quais partículas ficam confinadas em diferentes regiões da caixa como mostra a figura 5.15, e isto explica a ordem no sistema; (ii) nesta situação a estatística de coeficientes parece indicar caos, mas na realidade, neste caso o número de autoestados não perturbados que formam o autoestado perturbado é grande simplesmente porque agora é necessário em muitos casos descrever uma função de onda num pedaço da caixa em função de autofunções da caixa inteira.

Situações onde ao se variar a intensidade do potencial externo ora obtêm-se caos, ora não, são caracterizadas como caos ondulatório [18], assim acreditamos que a passagem da situação (3) para a (4) indica caos ondulatório.

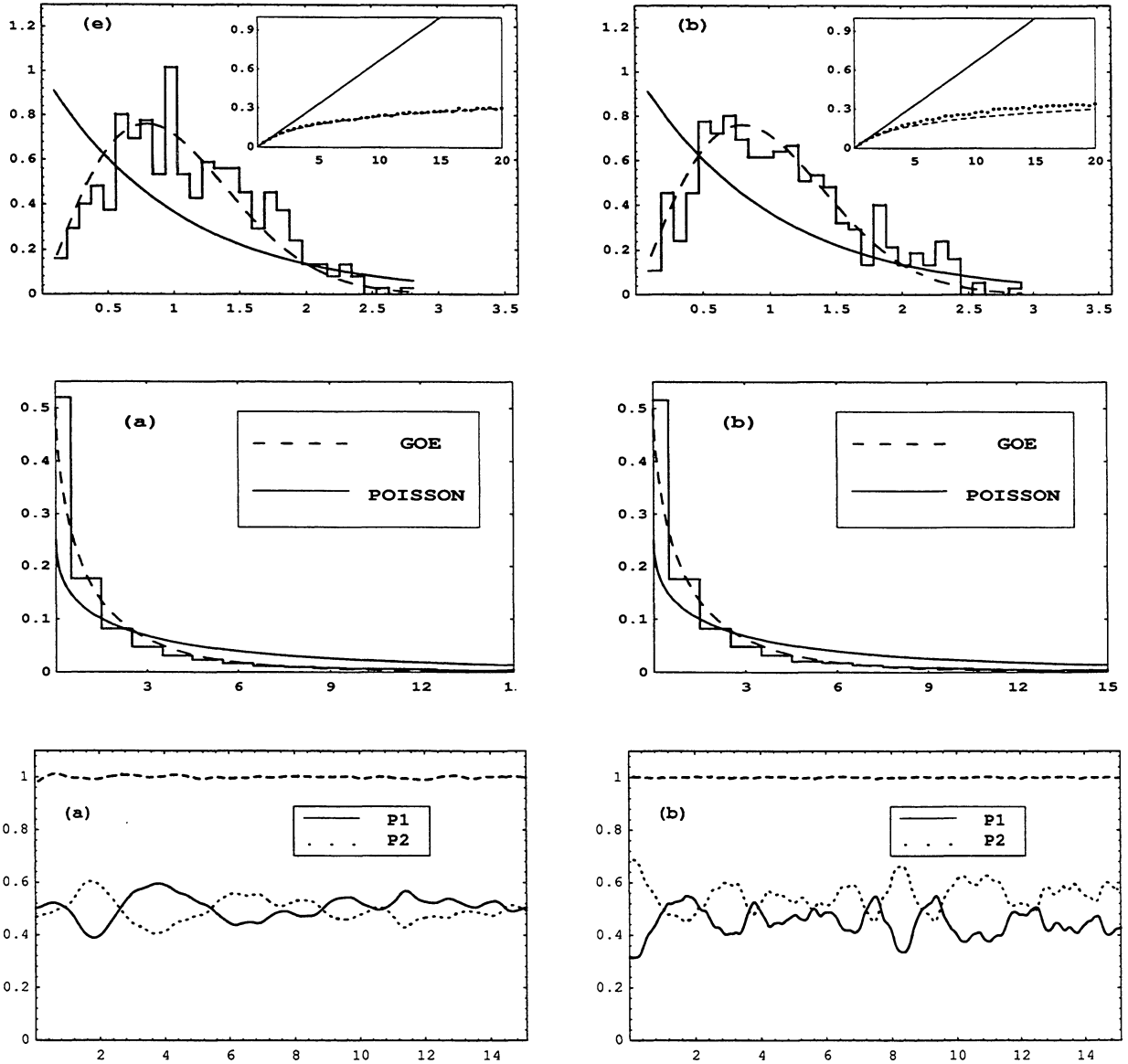


Figura 5.11: Nesta e nas próximas 3 figuras estão expostas as estatísticas $P(s)$, $\bar{\Delta}_3$, $c'_n s$ e transferência de energia para sistemas que diferem entre si apenas na intensidade do potencial externo. Apresentamos 2 sistemas um a esquerda e outro a direita. Nesta primeira figura temos à esquerda o sistema da caixa com $\beta = 0.611032$ e $\sigma_{ext} = 0$, e à direita sistema da caixa com $\beta = 0.634543$ e $\sigma_{ext} = 0$. Observe que aqui as partículas constantemente trocam energia entre si.

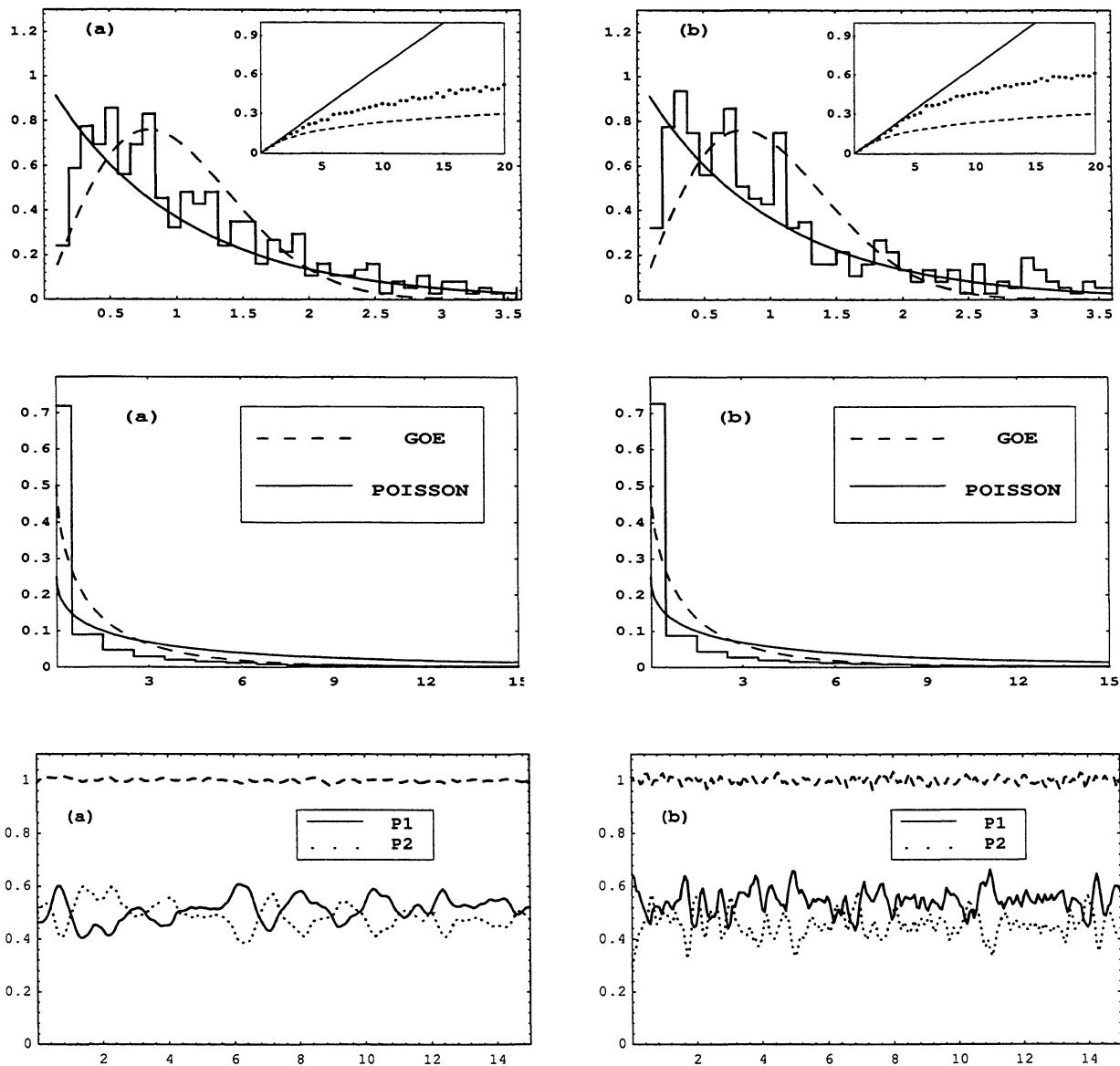


Figura 5.12: Idem figura anterior, mas com $\sigma_{ext} = 0.8$. Note que aqui as partículas continuam trocando energia com algumas interferências, que indicam reflexões com o potencial externo.

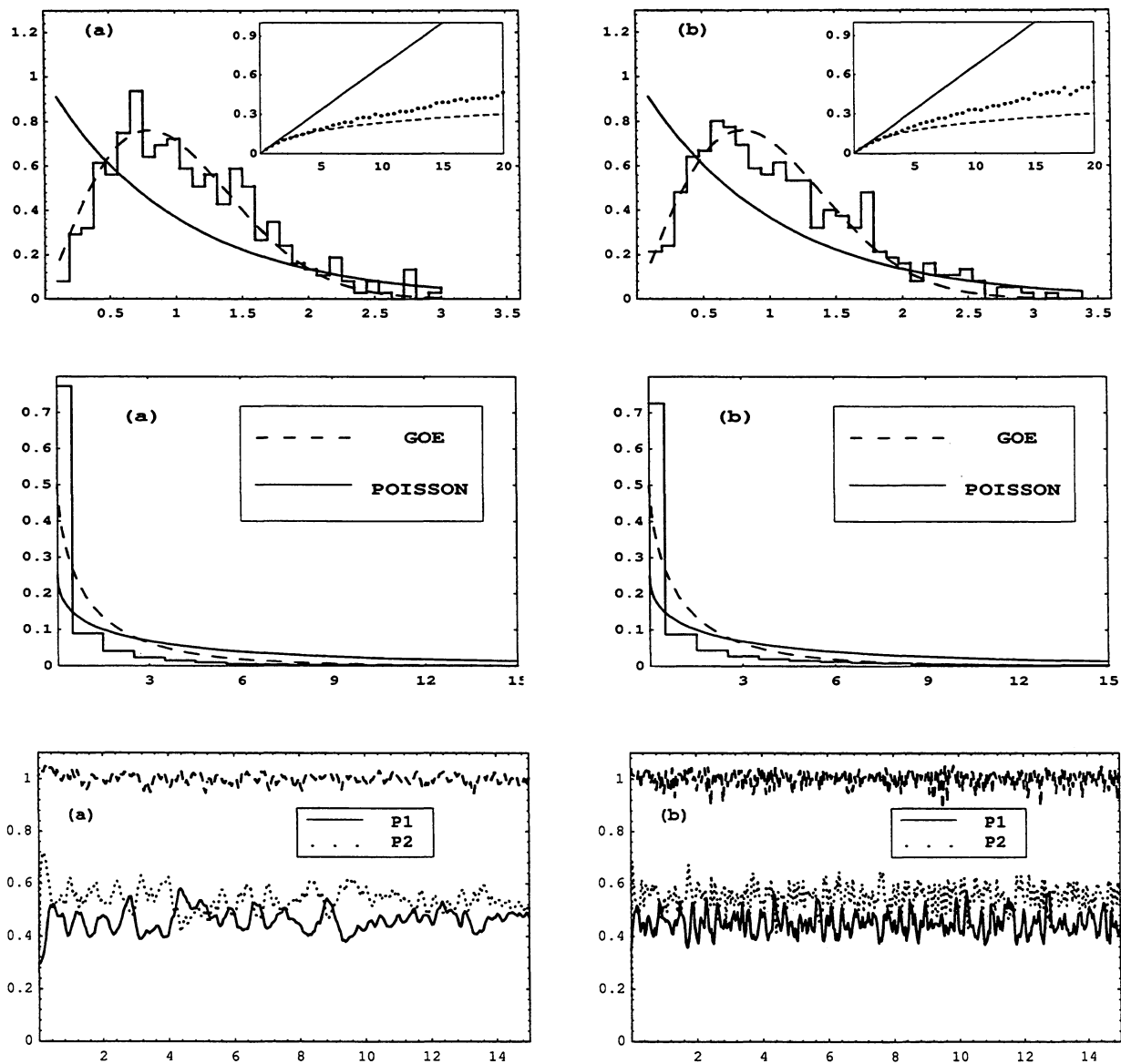


Figura 5.13: Idem figura anterior, mas com $\sigma_{ext} = 10$. Perceba que aqui as partículas ainda trocam energia entre si mas as reflexões com o potencial externo aumentaram.

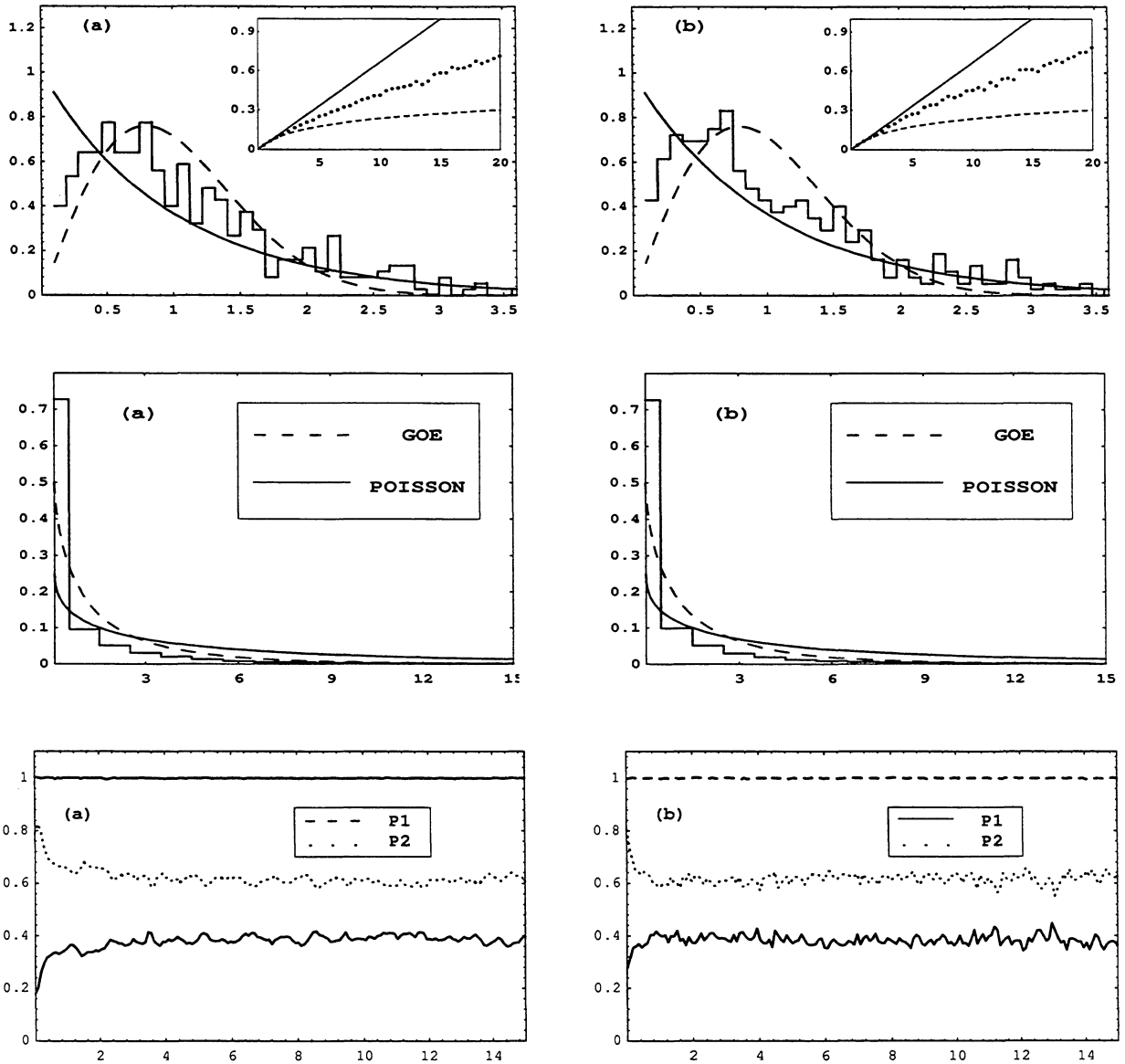


Figura 5.14: Idem figura anterior, mas com $\sigma_{ext} = 300$. Veja que aqui as partículas não mais trocam energia entre si, mas apenas sofrem reflexões com o potencial externo.

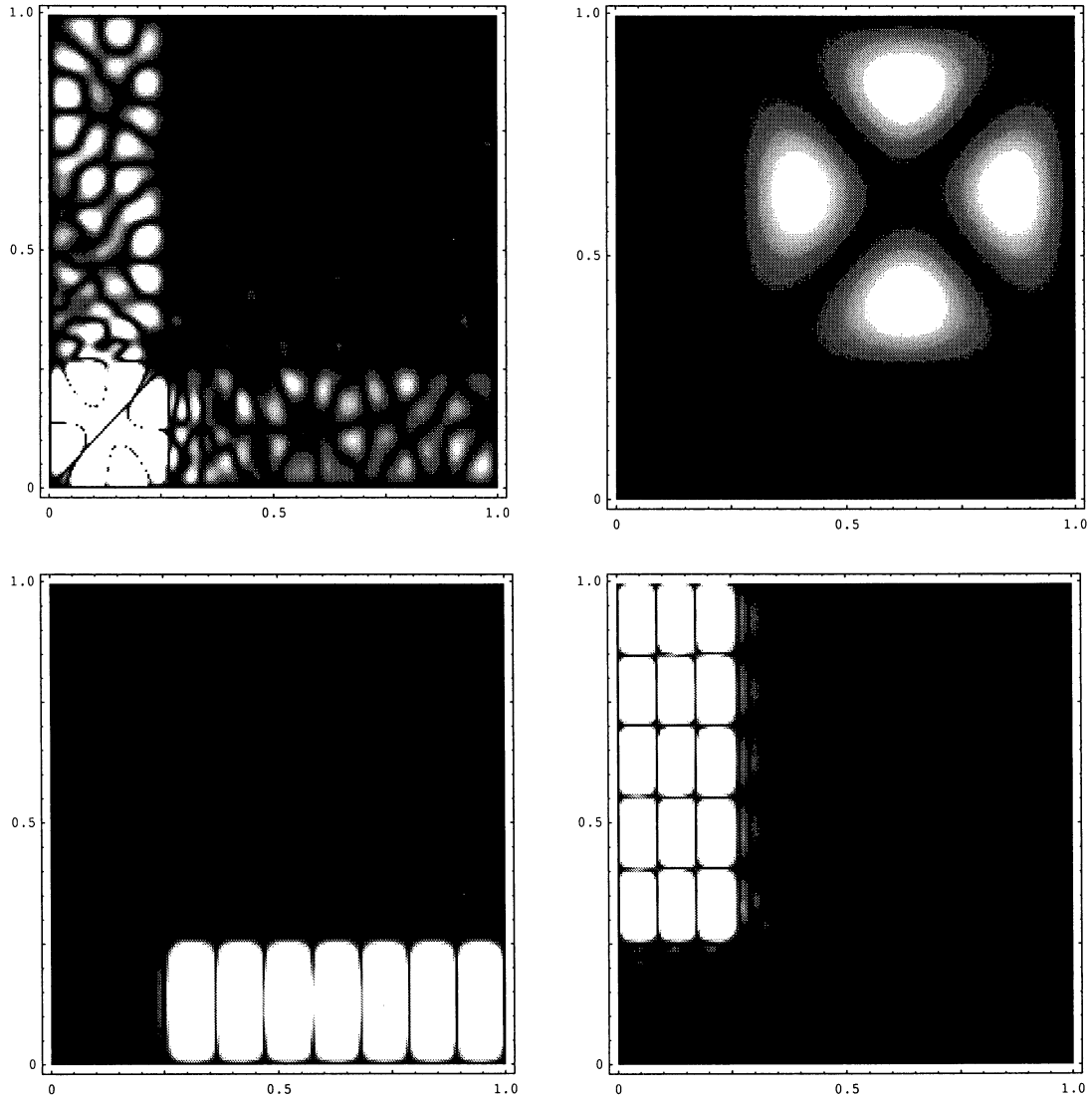


Figura 5.15: Caixa-ext: gráficos da função de onda, acima à esquerda autoestado 205 com energia 362.32, para caixa com $\beta = 0.782647$, $\sigma = 651$ e $\sigma_{ext} = 60$, neste caso houve confinamento das partículas . Acima à direita o autoestado 5 com energia 18.83, para caixa com $\beta = 0.925676$, $\sigma = 447$ e $\sigma_{ext} = 70$, aqui o sistema se comportou como se a caixa fosse menor. Abaixo à esquerda o autoestado 55 com energia 110.52, para o mesmo sistema anterior . Abaixo à direita o autoestado 105 com energia 185.09, para o mesmo sistema anterior. Veja que nas duas figuras debaixo em cada caso as partículas ficam restritas a diferentes regiões da caixa.

Capítulo 6

Conclusões

Nosso objetivo com este trabalho foi o de analisar o surgimento ou não de comportamento caótico em sistemas quânticos constituídos por poucas partículas interagentes. Para isto escolhemos uma situação simples o suficiente para que seu estudo não requeresse ferramentas analíticas e computacionais muito pesadas, mas, que por outro lado, apresentasse o mínimo das condições encontradas em situações mais realísticas. Desta forma, escolhemos sistemas unidimensionais formados por duas partículas interagindo por potenciais de curto alcance, em particular por funções δ . Consideramos também situações onde havia potenciais externos, também dados por δ 's. Estes sistemas nos mostraram uma interessante variedade de comportamentos.

Os parâmetros relevantes em nossos problemas eram a relação de massas das partículas (β) e as intensidades das interações (λ). Também importantíssimo foram as condições de contorno escolhidas, periódicas (círculo) ou paredes infinitas (caixa). No caso de interações pontuais, ficou claro que a relação de massas entre as partículas desempenham um papel fundamental para a ocorrência de caos em nossos sistemas. Em primeiro lugar, em nenhuma situação onde $\beta = 1$ realmente observamos comportamento caótico. Isto está intimamente relacionado a possibilidade de aplicarmos a hipótese de Bethe para a obtenção de soluções analíticas para as funções de onda.

O ‘ansatz’ de Bethe pode ser usado sempre que as massas são iguais, isto tanto para a caixa quanto para o círculo (considerando-se que não há potenciais externos).

Na verdade, fomos além, provamos o resultado (até onde sabemos, inédito) de que a hipótese de Bethe para duas partículas no círculo é sempre verdade quando os potenciais de interação são de curto alcance. Isto nos dá uma indicação de que condições periódicas de uma certa forma tornam sistemas unidimensionais mais ‘facilmente’ integráveis (para uma discussão de integrabilidade muito interessante veja B. Sutherland em [40]).

As condições de contorno também são importantes, mas neste caso não suficientes para gerar caos em nossos sistemas. A idéia é que o aspecto dinâmico, que gera transferência de momento nos choques, é regido por $\beta \neq 1$. Entretanto, dependendo das condições de contorno isto pode ser ou não realçado. Para a caixa, o efeito é fortemente intensificado, gerando um intervalo enorme de valores possíveis para os momentos das partículas nos múltiplos espalhamentos. Assim, seguindo a idéia usual de que estados quânticos caóticos podem ser pensados como combinação linear de ondas planas aleatórias, então esta argumentação consegue explicar o comportamento caótico encontrado nesta situação.

A intensidade dos potenciais também é importante, já que a menos que tivessem um valor mínimo, não observamos caos nos sistemas. Isto é entendido uma vez que precisamos ter λ alto o suficiente para que na grande maioria dos choques as partículas fossem refletidas. Quando a probabilidade de transmissão é alta as partículas tunelam uma pela outra, não há troca de momento e, portanto, a dinâmica não é complexa.

Devido as particularidades discutidas acima, propusemos uma maneira de quantificar o grau de complexidade das funções de onda através da análise de proliferação e espaçamento dos coeficientes de expansão de ψ em termos dos auto-estados de base. Vimos clara diferença entre o caso caótico e integrável. Kaplan e Heller chamam

isto de ergodicidade quântica [24], pois indica como um estado caótico ‘espalha-se’ no espaço de estados do problema não perturbado. Esta análise mostrou-se bastante interessante no caso de considerarmos uma δ externa bastante fraca atuando sobre um sistema caótico. Apesar de sabermos que, neste caso, as diversas simetrias do sistema original são quebradas, esta quebra é bastante fraca, com isto, queremos dizer que agora existem elementos de matriz não-nulos fora dos blocos que representam as simetrias na matriz do Hamiltoniano, porém estes elementos são esparços e pequenos. Assim, ao calcularmos as estatística $P(s)$ e $\bar{\Delta}_3$ agora para todos os níveis sem mais separarmos as simetrias, podemos ser induzidos a crer que o sistema não é caótico, mas isto não sendo o caso, como nossos histogramas de c_n ’s mostraram.

Por fim, mencionamos que a presença de δ ’s externas geraram comportamento típico de caos ondulatório, ou seja, sua presença, mesmo para valores de λ_{ext} relativamente baixos geraram localização da função de onda. Além disso, pequenas alterações de suas posições faziam com que determinados estados tivessem grande mudança em sua autofunções.

Nosso trabalho não visou fechar uma linha de pesquisa, muito pelo contrário, analisamos sistemas bastante simples objetivando dar os primeiros passos na tentativa de compreender o problema de caos em sistemas quânticos com poucas partículas. Desta forma muita coisa pode ser feita, tanto em continuação a este trabalho como em abertura de novas propostas de estudos. Assim, sugerimos possíveis rumos para trabalhos futuros. (1) Acreditamos que, fazendo uso de algum tipo de transformação de coordenadas, possamos obter soluções analíticas para o sistema do círculo com potencial externo tipo δ e relação de massas igual a 1, um indicativo disto é que vimos que quando a intensidade do potencial externo vai para infinito este sistema recai na caixa unidimensional que possui solução analítica. (2) Como o caso de $\beta = 1$ na caixa possui solução analítica conhecida, acreditamos existir um método análogo ao exposto no capítulo 5 (para o círculo) para obtê-la no caso da interação δ . (3) Todas estas análises poderiam ser feitas considerando-se não duas, mas sim três ou mais

partículas, tanto na caixa, quanto no círculo. (4) Estudar estes mesmos problemas no caso de duas ou três dimensões. Podemos adiantar que isto já está sendo feito, e resultados preliminares já mostraram comportamento caótico bastante rico.

Acreditamos que muito se pode avançar em termos de se achar novos critérios para a caracterização de caos quântico em sistemas de poucas partículas, critérios estes que, sem dúvida, devem levar em conta efeitos como trocas de energia entre as partículas, efeitos de espalhamento, condições de contorno e dimensionalidade espacial.

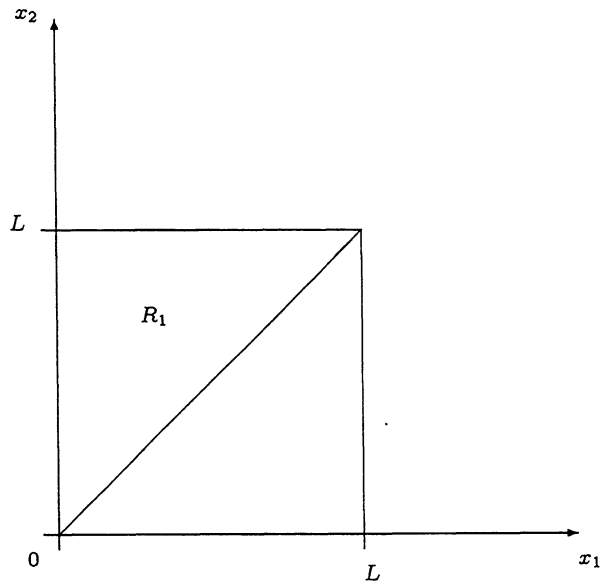
Apêndice A

Solução Exata para o Sistema de Dois Corpos que Interagem por uma Função Tipo δ Sujeito a Condições de Contorno Periódicas

A equação de Schrödinger tomando $\hbar = 2m = 1$ é:

$$\left[- \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) + 2c \delta(x_1 - x_2) \right] \psi = E\psi \quad (\text{A.1})$$
$$R_1 = \{(x_1, x_2) \mid 0 \leq x_1 \leq x_2 \leq L\}.$$

Onde a região R_1 é mostrada na fig 1, e $2c = \lambda$, que é a intensidade do potencial de interação.



As condições de contorno são,

$$\left(\frac{\partial}{\partial x_2} - \frac{\partial}{\partial x_1}\right) \psi \Big|_{x_2=x_1} = c \psi \Big|_{x_2=x_1},$$

$$\psi(0, x_2) = \psi(L, x_2) \quad , (a)$$

$$\psi(L, x_2) = \pm \psi(x_2, L) \quad , (b)$$

e

$$\psi'(x_1, x_2) \Big|_{x=0} = \pm \psi'(x_2, x_1) \Big|_{x=L}.$$

Hipótese de Bethe:

$$\psi(x_1, x_2) = \alpha e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2)} + \beta e^{i(k_2 x_1 + k_1 x_2)}$$

$$\psi(x_1, x_2) = \sqrt{\frac{1}{2}} \frac{1}{L} [e^{i(k_1 x_1 + k_2 x_2)} - e^{i\theta_{21}} e^{i(k_2 x_1 + k_1 x_2)}]$$

$$\psi(x_2, x_1) = \pm \psi(x_1, x_2)$$

Usando (A.3) e (A.4), temos:

$$e^{(k_2 - k_1)L} = e^{2i\theta_{21}}$$

Definindo $\delta = (k_2 - k_1)L$, $\gamma = \frac{cL}{2}$ a equação acima toma a forma:

$$\delta = 2\theta_{21} + 2\pi n_1 = -4\tan^{-1}\left(\frac{\delta}{2\gamma}\right) + 2\pi n_1, \quad n_1 = \text{inteiros}$$

$$\left(\frac{\delta}{2\gamma}\right) = \begin{cases} -\tan\left(\frac{\delta}{4}\right) & , \quad n_1 = \text{pares} \\ \left[\tan\left(\frac{\delta}{4}\right)\right]^{-1} & , \quad n_1 = \text{ímpares} \end{cases}$$

As raízes podem ser reais ou imaginárias, ($\gamma > 0$ reais) e ($\gamma < 0$, $\delta = \pm i\alpha$ para $n_1 = 0$)

$$e^{(k_2 - k_1)L} = 1$$

$$p_n = k_2 + k_1 = \left(\frac{2\pi}{L}\right) n_c, \quad n_c = \text{inteiros}$$

Para cada raiz de δ_1 , temos:

$$\begin{cases} k_2 L = -k_1 L = \frac{\delta}{2} & , \quad p = 0, (n_1 = \text{ímpares}) \\ k_2 L = \pi + \frac{\delta}{2} \text{ e } k_1 L = \pi + \frac{\delta}{2} & , \quad p = \frac{2\pi}{L}, (n_1 = \text{pares}) \end{cases}$$

$$\text{Logo } E_{n_c, n_1} = (k_1^2 + k_2^2)_{n_c n_1}$$

$$\gamma > -2 \quad \delta = \pm i\alpha \text{ e } \alpha > -2\gamma \quad \Rightarrow \quad E_c = -\frac{\alpha^2}{2L^2} < -\frac{c}{2}$$

$$\psi(x_1, x_2) = e^{-\frac{c}{2}|x_1 - x_2|}$$

Apêndice B

Transferência de energia

Nosso objetivo aqui é calcular o valor esperado da energia cinética, para cada uma das duas partículas dentro da caixa unidimensional, assim teremos que calcular $\langle p_i^2 \rangle$

Sabemos que na caixa a função de onda para cada partícula sem interação é

$$\phi_i = \sqrt{\frac{2}{l}} \sin\left(\frac{n_i \pi x_i}{l}\right), \text{ sendo } \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \phi_i = -\frac{n_i \pi x_i}{l} \phi_i.$$

Logo os autovetores do problema perturbado (2 partículas com interação na caixa), podem ser escritos como $\psi_n = \sum_{ij} a_{ij} \phi_i \phi_j$.

O estado inicial do sistema pode ser descrito como

$$\Psi_{(0)} = \phi_0(x_1) \phi_0(x_2) \text{ ou } \Psi_{(0)} = \sum_n c_n \psi_n, \text{ logo } \Psi_{(t)} = \sum_n c_n e^{\frac{-i\varepsilon_n t}{\hbar}} \psi_n, \text{ onde,}$$

$$c_n = \int_0^L \int_0^L dx_1 dx_2 \psi_n^* \Psi_{(0)} \text{ e } \varepsilon_n \text{ são os autovalores do problema perturbado.}$$

$$\text{Como } p_i^2 \rightarrow -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}, \text{ temos } \langle p_1^2 \rangle = \int_0^L \int_0^L dx_1 dx_2 \Psi_{(t)}^* \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x_1^2}\right) \Psi_{(t)}.$$

Assim,

$$\langle p_1^2 \rangle = -\hbar^2 \int_0^L \int_0^L dx_1 dx_2 \sum_{n'} c_n^* e^{\frac{+i\varepsilon_{n'} t}{\hbar}} \psi_{n'}^* \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} \sum_n c_n e^{\frac{-i\varepsilon_n t}{\hbar}} \psi_n$$

$$\begin{aligned}
\langle p_1^2 \rangle &= -\hbar^2 \sum_{n'} c_{n'}^* e^{\frac{+i\epsilon_{n'} t}{\hbar}} \sum_n c_n e^{\frac{-i\epsilon_n t}{\hbar}} \int_0^L \int_0^L dx_1 dx_2 \sum_{ij} a_{ij} \phi_i \phi_j \frac{\partial^2}{\partial x^2} \sum_{ij} b_{ij} \phi_i \phi_j \\
\langle p_1^2 \rangle &= -\hbar^2 \sum_{n'} c_{n'}^* e^{\frac{+i\epsilon_{n'} t}{\hbar}} \sum_n c_n e^{\frac{-i\epsilon_n t}{\hbar}} \int_0^L \int_0^L dx_1 dx_2 \sum_{ij} a_{ij} \phi_i \phi_j \left(\frac{-\pi^2}{L^2} \right) \sum_{ij} b_{ij} n_i^2 \phi_i \phi_j \\
\langle p_1^2 \rangle &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{L^2} \sum_{n'} c_{n'}^* e^{\frac{+i\epsilon_{n'} t}{\hbar}} \sum_n c_n e^{\frac{-i\epsilon_n t}{\hbar}} \sum_{ij} a_{ij} \sum_{ij} b_{ij} n_i^2 \int_0^L \int_0^L \phi_i \phi_j \phi_i \phi_j dx_1 dx_2 \\
\langle p_1^2 \rangle &= \left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{L^2} \right) \sum_{n'} c_{n'}^* e^{\frac{+i\epsilon_{n'} t}{\hbar}} \sum_n c_n e^{\frac{-i\epsilon_n t}{\hbar}} \sum_{ij} a_{ij}^{(n')} b_{ij}^{(n)} n_i^2 .
\end{aligned}$$

Mas como $e^{i(\theta_1 - \theta_2)} + e^{-i(\theta_1 - \theta_2)} = 2\cos(\theta_1 - \theta_2)$, temos:

1-) Para c_n reais:

$$\langle p_1^2 \rangle = \left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{L^2} \right) \left\{ \sum_n \left(c_n^2 \sum_{ij} a_{ij}^2 n_i^2 \right) + 2 \sum_{k < l} \left(c_k c_l \cos \left[\frac{(E_k - E_l)t}{\hbar} \right] \sum_{ij} a_{ij}^{(k)} b_{ij}^{(l)} n_i^2 \right) \right\}$$

Cálculo dos c_n

Supondo o estado inicial do problema como sendo

$$\Psi_0(x, y) = \frac{2}{L} \sin \left(\frac{k\pi x}{L} \right) \sin \left(\frac{l\pi y}{L} \right) \text{ ou } \Psi_0(x, y) = \sum_n c_n \psi_n \text{ onde}$$

ψ_n são os autovetores do problema perturbado, temos que

$$\begin{aligned}
c_n &= \int_0^L \int_0^L dx dy \psi_n^*(x, y) \Psi_0(x, y), \text{ mas } \Psi_n = \sum_{ij} a_{ij} \phi_i(x) \phi_j(y), \text{ assim} \\
c_n &= \int_0^L \int_0^L dx dy \left(\sum_{ij} a_{ij}^* \phi_i^*(x) \phi_j^*(y) \right) \frac{2}{L} \sin \left(\frac{k\pi x}{L} \right) \sin \left(\frac{l\pi y}{L} \right) \\
c_n &= \int_0^L \int_0^L dx dy \left(\sum_{ij} a_{ij} \phi_i(x) \phi_j(y) \right) \frac{2}{L} \sin \left(\frac{k\pi x}{L} \right) \sin \left(\frac{l\pi y}{L} \right) \\
c_n &= \int_0^L \int_0^L dx dy \left[\sum_{ij} a_{ij} \frac{2}{L} \sin \left(\frac{m_i \pi x}{L} \right) \sin \left(\frac{n_i \pi y}{L} \right) \right] \frac{2}{L} \sin \left(\frac{k\pi x}{L} \right) \sin \left(\frac{l\pi y}{L} \right) \\
c_n &= \frac{4}{L^2} \sum_{ij} a_{ij} \int_0^L \int_0^L dx dy \sin \left(\frac{m_i \pi x}{L} \right) \sin \left(\frac{n_i \pi y}{L} \right) \sin \left(\frac{k\pi x}{L} \right) \sin \left(\frac{l\pi y}{L} \right)
\end{aligned}$$

Fazendo $x' = \frac{x}{L}$ e $y' = \frac{y}{L}$ temos que $x = Lx'$, $dx = Ldx'$ e $y = Ly'$, $dy = Ldy'$ assim:

$$c_n = \frac{4}{L^2} \sum_{ij} a_{ij} \int_0^1 \int_0^1 dx' dy' L^2 \sin(m_i \pi x') \sin(n_i \pi y') \sin(k \pi x') \sin(l \pi y')$$

$$c_n = 4 \sum_{ij} a_{ij} \int_0^1 dx' \sin(m_i \pi x') \sin(k \pi x') \int_0^1 dy' \sin(n_i \pi y') \sin(l \pi y')$$

$$c_n = 4 \sum_{ij} a_{ij} \left\{ \int_0^1 dx' - \frac{1}{2} [\cos(m_i + k) \pi x' - \cos(m_i - k) \pi x'] \right\} \\ \left\{ \int_0^1 dy' - \frac{1}{2} [\cos(n_i + l) \pi y' - \cos(n_i - l) \pi y'] \right\}$$

$$c_n = \sum_{ij} a_{ij} \left\{ -\Delta(m_i + k) + \Delta(m_i - k) \right\} \left\{ -\Delta(n_i + l) + \Delta(n_i - l) \right\}$$

$$c_n = \sum_{ij} a_{ij} \Delta(m_i - k) \Delta(n_i - l)$$

2-) Para c_n complexos, temos:

$$\langle p_i^2 \rangle = \left(\frac{\hbar^2 \pi^2}{L^2} \right) \left\{ \sum_n (|c_n|^2 \sum_{ij} a_{ij}^2 n_i^2) + \right. \\ \left. 2 \sum_{k < l} \left(\text{Re}(c_k^* c_l) \cos \left[\frac{(E_k - E_l)t}{\hbar} \right] \sum_{ij} a_{ij}^{(k)} b_{ij}^{(l)} n_i^2 \right) - \right. \\ \left. 2 \sum_{k < l} \left(\text{Im}(c_k^* c_l) \sin \left[\frac{(E_k - E_l)t}{\hbar} \right] \sum_{ij} a_{ij}^{(k)} b_{ij}^{(l)} n_i^2 \right) \right\}$$

Vamos supor agora que o estado inicial é dado por um pacote gaussiano para cada partícula de tal forma que:

$$\varphi(x_1, 0) = [2\pi \Delta x_1^2]^{-\frac{1}{4}} \exp \left[-\frac{(x_1 - a)^2}{4\Delta x_1^2} + ik_1 x_1 \right]$$

e

$$\varphi(x_2, 0) = [2\pi \Delta x_2^2]^{-\frac{1}{4}} \exp \left[-\frac{(x_2 - b)^2}{4\Delta x_2^2} + ik_2 x_2 \right]$$

Podemos escrever de forma genérica:

$$\varphi(x_i, 0) = A_i \exp \left[-\frac{(x_i - a_i)^2}{4\Delta x_i^2} + ik_i x_i \right]$$

A função de onda total do sistema portanto é em $t = 0$

$$\Psi_0(x_1, x_2) = A_1 A_2 \exp \left[-\frac{(x_1 - a)^2}{4\Delta x_1^2} + ik_1 x_1 \right] \exp \left[-\frac{(x_2 - b)^2}{4\Delta x_2^2} + ik_2 x_2 \right]$$

$$\Psi_0(x_1, x_2) = C' \exp[-l_1(x_1 - a)^2 + ik_1x_1] \exp[-l_2(x_2 - b)^2 + ik_2x_2]$$

Onde $C' = A_1A_2$, $l_1 = (4\Delta x_1^2)^{-1}$ e $l_2 = (4\Delta x_2^2)^{-1}$. Mas $\Psi_0(x, y)$ também pode ser escrita como:

$$\Psi_{(0)} = \sum_n c_n \psi_n, \text{ onde } c_n = \int_0^L \int_0^L dx dy \psi_n^* \Psi_0(x, y)$$

O que precisamos agora, para calcular a transferência de energia, é dos c_n 's

Cálculo dos c_n 's para o pacote de onda gaussiano

$$c_n = \int_0^L \int_0^L dx dy \psi_n^*(x, y) \Psi_0(x, y),$$

onde $\Psi_n = \sum_{ij} a_{ij} \phi_i(x) \phi_j(y)$

$$c_n = \int_0^L \int_0^L dx dy \left(\sum_{ij} a_{ij} \phi_i \phi_j \right) C' \exp[-l_1(x_1 - a)^2 - l_2(x_2 - b)^2 + ik_1x_1 + ik_2x_2]$$

$$c_n = \int_0^L \int_0^L dx dy \left(\sum_{ij} a_{ij} \sin\left(\frac{m_i \pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n_i \pi y}{L}\right) \right) \frac{2}{L} C' \exp[-l_1(x_1 - a)^2 - l_2(x_2 - b)^2 + ik_1x_1 + ik_2x_2]$$

$$c_n = \frac{2C'}{L} \sum_{ij} a_{ij} \int_0^L \int_0^L dx dy \sin\left(\frac{m_i \pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n_i \pi y}{L}\right) \exp[-l_1(x_1 - a)^2 - l_2(x_2 - b)^2 + ik_1x_1 + ik_2x_2]$$

$$c_n = \frac{2C'}{L} \sum_{ij} a_{ij} I_x I_y,$$

onde

$$I_x = \int_0^L dx \sin\left(\frac{m_i \pi x}{L}\right) \exp[-l_1(x - a)^2 + ik_1x]$$

$$I_y = \int_0^L dy \sin\left(\frac{n_i \pi y}{L}\right) \exp[-l_2(y - b)^2 + ik_2y]$$

Solução para I_x :

$$I_x = \int_0^L dx \frac{1}{2i} \left\{ \exp\left(i \frac{m_i \pi x}{L}\right) - \exp\left(-i \frac{m_i \pi x}{L}\right) \right\} \exp[-l_1(x - a)^2 + ik_1x]$$

$$I_x = \frac{\{I_{1x} - I_{2x}\}}{2i}$$

$$I_{1x} = \int_0^L dx \exp\left[i\frac{m_i\pi x}{L} - l_1(x-a)^2 + ik_1x\right]$$

e

$$I_{2x} = \int_0^L dx \exp\left[-i\frac{m_i\pi x}{L} - l_1(x-a)^2 + ik_1x\right]$$

Solução para I_{1x} :

$$I_{1x} = \int_0^L dx \exp\left[\left(\frac{m_i\pi x}{L} + k_1\right)ix - l_1(x-a)^2\right]$$

fazendo, $\left(\frac{m_i\pi x}{L} + k_1\right)i = d$, temos

$$I_{1x} = \int_0^L dx \exp\left[dx - l_1x^2 - l_1a^2 + 2l_1ax\right]$$

fazendo, $-(v-f)^2 + g = -l_1x^2 - l_1a^2 + (2l_1a + d)x$, obtemos:

$$-v^2 - f^2 + 2vf + g = -l_1x^2 - l_1a^2 + (2l_1a + d)x,$$

logo

$$v = \sqrt{l_1}x,$$

$$2vf = (2l_1a + d)x$$

$$2\sqrt{l_1}xf = (2l_1a + d)x$$

$$f = \frac{2l_1a + d}{2\sqrt{l_1}}$$

$$-f^2 + g = -l_1a^2$$

$$-\frac{(2l_1a + d)^2}{4l_1} + g = -l_1a^2$$

$$-\frac{(4l_1^2a^2 + d^2 + 4l_1ad)}{4l_1} + g = -l_1a^2$$

$$-l_1a^2 - ad + \frac{d^2}{4l_1} + g = -l_1a^2$$

$$g = ad + \frac{d^2}{4l_1}$$

e como $v = \sqrt{l_1} x$ e $dx = \frac{dv}{\sqrt{l_1}}$

$$I_{1x} = \int_0^{L\sqrt{l_1}} dx \frac{dv}{\sqrt{l_1}} \exp[-(v-f)^2 + g]$$

$$I_{1x} = \frac{e^g}{\sqrt{l_1}} \int_0^{L\sqrt{l_1}} \exp[-(v-f)^2] dv$$

fazendo $v - f = u$, $dv = du$:

$$I_{1x} = \frac{e^g}{\sqrt{l_1}} \int_{-f}^{L\sqrt{l_1}-f} e^{-u^2} du$$

$$I_{1x} = \frac{e^g}{\sqrt{l_1}} \left\{ \int_0^{L\sqrt{l_1}-f} e^{-u^2} du - \int_0^{-f} e^{-u^2} du \right\}$$

$$I_{1x} = \frac{e^g}{\sqrt{l_1}} \left\{ \operatorname{erf}[L\sqrt{l_1}-f] - \operatorname{erf}[-f] \right\}$$

$$I_{1x} = \frac{e^g}{\sqrt{l_1}} \left\{ \operatorname{erf}[L\sqrt{l_1}-f] + \operatorname{erf}[f] \right\}$$

Solução para I_{2x}

$$I_{2x} = \int_0^L dx \exp\left[\left(-\frac{m_i \pi x}{L} + k_1\right)ix - l_1(x-a)^2\right]$$

fazendo $\left(-\frac{m_i \pi x}{L} + k_1\right)i = d^*$, temos

$$I_{2x} = \frac{e^{g^*}}{\sqrt{l_1}} \left\{ \operatorname{erf}[L\sqrt{l_1}-f^*] + \operatorname{erf}[f^*] \right\}$$

onde,

$$f^* = \frac{2l_1 a + d^*}{2\sqrt{l_1}} \quad \text{e} \quad g^* = ad^* + \frac{d^{*2}}{4l_1}.$$

Apêndice C

Duas Partículas Interagindo por um Potencial δ

Aqui descrevemos a solução para um sistema formado por duas partículas “livres” que interagem através de um potencial $V = \delta(x_1 - x_2)$.

$$\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} \right) + \lambda \delta(x_1 - x_2) \right] \varphi(x_1, x_2) = E \varphi(x_1, x_2) \quad (*)$$

Vamos definir $x = x_1 - x_2$, $X = \frac{\mu_1 x_1}{M}$, $M = \mu_1 + \mu_2$, $\frac{1}{\mu} = \frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\mu_2}$, logo (*) fica:

$$\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) + \lambda \delta(x) \right] \varphi(x, X) = E \varphi(x, X)$$

Sendo agora $\varphi(x, X) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{iKX} \phi(x)$ e $E = \frac{\hbar^2 K^2}{2M} + \frac{\hbar^2 K^2}{2\mu}$ então

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \lambda \delta(x) \right) \phi(x) = \frac{\hbar^2 K^2}{2\mu} \phi(x) \quad (**)$$

Temos agora a seguinte solução para (**)

$$\begin{cases} \phi_I(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \{ e^{iKX} + R e^{-iKx} \} & x < 0 \\ \phi_{II}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} T e^{iKx} \} & x > 0 \end{cases}$$

Com as condições de contorno

$$\begin{cases} \phi_I(0) = \phi_{II}(0) \\ \phi'_{II}(x) - \phi'_I(0) = \frac{2\mu\lambda}{\hbar^2} \phi_{II}(0) \end{cases}$$

Sendo $\frac{2\mu\lambda}{\hbar^2} = \sigma$ temos então por R e T :

$$\begin{cases} 1 + R = T \\ ik[T - (1 - R)] = \sigma T \end{cases} \implies \begin{cases} R = \frac{\sigma}{2ik - \sigma} \\ T = \frac{2ik}{2ik - \sigma} \end{cases}$$

Temos então: $x > 0 (x_1 \ll x_2)$

$$\phi_2(x, X) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{iKX} \{ e^{iKX} + R e^{-iKx} \}$$

Temos então: $x > 0 (x_1 < x_2)$

$$\phi_2(x, X) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{iKX} \{ e^{iKX} + R e^{-iKx} \}$$

Voltando as coordenadas antigas, temos:

$$\begin{cases} \phi_2(x_1, x_2) = \frac{1}{2\pi} \exp\left[i\frac{K}{M}(\mu_1 x_1 + \mu_2 x_2)\right] \{ \exp[ik(x_1 - x_2)] + R(x) \exp[ik(x_1 - x_2)] \}, x_1 > : \\ \phi(x_1, x_2) = \frac{T(k)}{2\pi} \exp\left[i\frac{K}{M}(\mu_1 x_1 + \mu_2 x_2)\right] \exp[ik(x_1 - x_2)], x_1 < x_2 \end{cases}$$

Definimos agora $k_1^{(\pm)} = (\pm)k + \mu_1 \frac{K}{M}$ e $k_2^{(\pm)} = (\pm)k + \mu_2 \frac{K}{M}$, então temos o seguinte:

i)

$$\frac{k_1^{(\pm)2}}{\mu_1} + \frac{k_2^{(\pm)2}}{\mu_2} = \frac{1}{\mu} \left(k + \mu_1 \frac{K}{M}\right)^2 + \frac{1}{\mu} \left(k + \mu_2 \frac{K}{M}\right)^2 = k^2 \left(\frac{1}{\mu_1} + \frac{1}{\mu_2}\right) + \frac{K^2}{M^2} (\mu_1 + \mu_2) = \frac{k^2 \mu}{\mu} + \frac{K^2}{M}$$

ii)

$$\mp \frac{k}{\mu} = \frac{k_1^{\pm}}{\mu_1} - \frac{k_2^{\mp}}{\mu_2}$$

iii)

$$\mp \frac{k}{\mu} = k_1^{\pm} + k_2^{\mp}$$

$$\mp k = \frac{1}{2}(k_1^\pm + k_2^\mp) \implies \begin{cases} k = \frac{1}{2}(k_1^+ + k_2^-) \\ k = -\frac{1}{2}(k_1^- + k_2^+) \end{cases}$$

$$\mu_1 = \mu_2 \implies k = -\frac{1}{2}(k_1^- + k_2^+)$$

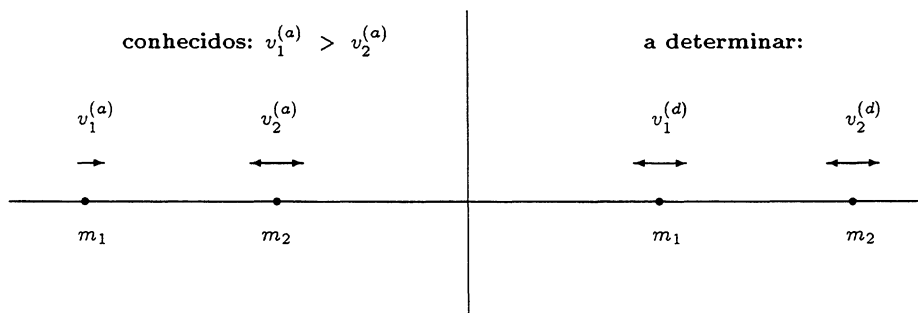
As funções de onda são então:

$$\begin{cases} \phi(x_1, x_2) = \frac{T(k)}{2\pi} \exp[i(k_1^{(+)}x_1 + k_2^{(-)}x_2)] & , x_1 \geq x_2 \\ \phi_2(x_1, x_2) = \frac{1}{2\pi} \left\{ \exp[i(k_1^{(+)}x_1 + k_2^{(-)}x_2)] + R(x) \exp[i(k_1^{(-)}x_1 + k_2^{(+)}x_2)] \right\} & , x_1 \leq x_2 \end{cases}$$

Problema clássico: 2 partículas interagindo e chocando-se

Conservação de momento e energia [$p_i^{(x)} = m_i v_i^{(x)}$]:

1-)



$$p_1^{(a)} + p_2^{(a)} = p_1^{(d)} + p_2^{(d)} \quad (C.1)$$

$$\frac{p_1^{(a)2}}{m_1} + \frac{p_2^{(a)2}}{m_2} = \frac{p_1^{(d)2}}{m_1} + \frac{p_2^{(d)2}}{m_2} \quad (C.2)$$

De (C.2) temos:

$$\frac{1}{m_2} [p_2^{(a)} - p_2^{(d)}] [p_2^{(a)} + p_2^{(d)}] + \frac{1}{m_1} [p_1^{(a)} - p_1^{(d)}] [p_1^{(a)} + p_1^{(d)}] = 0 \quad (C.3)$$

De (C.1) temos:

$$p_2^{(a)} + p_2^{(d)} = p_1^{(a)} - p_1^{(d)} \quad (C.4)$$

Combinando (C.3) com (C.4) e considerando a eq. C.1 mantida, temos:

$$\begin{cases} p_1^{(a)} + p_2^{(a)} = p_1^{(d)} + p_2^{(d)} \\ \frac{1}{m_2} [p_2^{(a)} + p_2^{(d)}] = \frac{1}{m_1} [p_1^{(a)} + p_1^{(d)}] \end{cases}$$

Temos então

$$\frac{1}{m_2} [p_2^{(a)} + p_1^{(a)} + p_2^{(a)} - p_1^{(d)}] = \frac{1}{m_1} [p_1^{(a)} + p_1^{(d)}] \implies p_1^{(d)} \left(\frac{1}{m_2} + \frac{1}{m_1} \right) = \frac{2p_2^{(a)}}{m_2} + \left(\frac{1}{m_2} - \frac{1}{m_1} \right) p_1^{(a)}$$

, ou $m_1 v_1^{(d)} = 2m_2 m_1 v_2^{(a)} + (m_1 - m_2) m_1 v_1^{(a)}$, ou finalmente

$$v_1^{(d)} = \frac{(m_1 - m_2)}{(m_1 + m_2)} v_1^{(a)} + \frac{(2m_2)}{(m_1 + m_2)} v_2^{(a)}$$

De forma análoga:

$$v_2^{(d)} = \frac{(m_2 - m_1)}{(m_1 + m_2)} v_2^{(a)} + \frac{(2m_1)}{(m_1 + m_2)} v_1^{(a)}$$

2-) Referencial do centro de massa:

$$\begin{cases} V^{(a)} = \frac{m_1 v_1^2 + m_2 v_2^2}{M} & , \quad M = m_1 + m_2 \\ v^{(a)} = v_1^{(a)} - v_2^{(a)} \end{cases}$$

$$V^{(d)} = V^{(a)}; \quad v^{(a)} = -v^{(d)}$$

Temos então que:

$$\begin{cases} v_1^{(d)} = V^a - \frac{m_2 v^a}{M} & , \quad v_2^d = V^a + \frac{m_1 v^a}{M} \\ v_1^{(a)} = V^d + \frac{m_2 v^a}{M} & , \quad v_2^a = V^d - \frac{m_1 v^a}{M} \end{cases}$$

Relação entre os dois problemas:

Temos que $p_i = \hbar k_i = m_i v_i$, portanto $v_i = \hbar \frac{k_i}{m_i}$, vamos também escrever $\hbar \frac{K}{M} = V^{(a)}$ e $\hbar \frac{k}{\mu} = v^{(a)}$. Assim temos que,

i)

$$\hbar \frac{k_1^{(+)}}{m_1} = \hbar \frac{k}{m_1} + \hbar \frac{K}{M} = V^{(a)} + \hbar \frac{\mu}{m_1} \frac{k}{\mu} = V^{(a)} + \hbar \frac{\mu}{m_1} v^{(a)}$$

mas, $\frac{\mu}{m_1} = \frac{m_1 m_2}{M m_1} = \frac{m_2}{M}$, logo:

$$\hbar \frac{k_1^{(+)}}{m_1} = V^{(a)} + \frac{m_2 v^{(a)}}{M} \implies \hbar \frac{k_1^{(+)}}{m_1} = v_1^{(a)}$$

ii) $\hbar \frac{k_2^{(-)}}{m_2} = -\hbar \frac{k_2}{m_2} + \hbar \frac{K}{M} = V^{(a)} - \frac{\mu}{m_2} v^{(a)}$, mas $\frac{\mu}{m_2} = \frac{m_1 m_2}{M m_2} = \frac{m_1}{M}$, logo:

$$\hbar \frac{k_2^{(-)}}{m_2} = V^{(a)} - \frac{m_1 v^{(a)}}{M} \implies \hbar \frac{k_2^{(-)}}{m_2} = v_2^{(a)}$$

iii)

$$\hbar \frac{k_1^{(-)}}{m_1} = -\hbar \frac{k}{m_1} + \frac{K}{M} \implies \hbar \frac{k_1^{(-)}}{m_1} = V^{(a)} - \frac{m_2 v^{(a)}}{M} \implies \hbar \frac{k_1^{(-)}}{m_1} = -v_1^{(d)}$$

iv)

$$\hbar \frac{k_2^{(+)}}{m_2} = -\hbar \frac{k}{m_2} + \frac{K}{M} \implies \hbar \frac{k_2^{(+)}}{m_2} = V^{(a)} - \frac{m_1 v^{(a)}}{M} \implies \hbar \frac{k_2^{(+)}}{m_2} = -v_2^{(d)}$$

Ou seja, as soluções são equivalentes.

Cálculo do coeficientes R e T em função dos k' s:

As expressões que fornecem R e T em função de k_1^\pm e k_2^\pm , são:

$$T = \frac{i \left[\frac{k_1^+}{\mu_1} - \frac{k_2^-}{\mu_2} \right]}{\left[i \left(\frac{k_1^+}{\mu_1} - \frac{k_2^-}{\mu_2} \right) - \frac{\lambda}{\hbar^2} \right]}$$

$$R = \frac{\frac{\lambda}{\hbar^2}}{\left[i \left(\frac{k_1^+}{\mu_1} - \frac{k_2^-}{\mu_2} \right) - \frac{\lambda}{\hbar^2} \right]}$$

Bibliografia

- [1] Gutzwiller M C 1990 *Chaos in Classical and Quantum Physics* (New York: Spring)
- [2] Friedrich H and Wintgen D 1989 *Phys. Rep.* 183 37
- [3] Karremans K, Vassen W and Hogervorst W 1999 *Phys. Rev. A* 60 2275
- [4] Flambaum V V, Gribakina A A, Gribakin G F and Ponomarev I V 1999 *Physica D* 131 205; Zelevinsky V 1999 *Int. J. Mod. Phys. B* 13 569
- [5] Marcus C M, Patel S R, Huibers A G, Cronenwett S M, Switkes M, Chan I H, Clarke R M, Folk J A, Godijn S F, Campman K and Gossard A C 1997 *Chaos, Solitons and Fractals* 8 1261
- [6] Ulloa S E and Pfannkuche D 1997 *Superlatt. and Microstruct.* 21 21; Meza-Montes L, Ulloa S E and Pfannkuche D (1997) *Physica E* 1 274
- [7] Li M Z, Chen L X, Yan Z J and Chen C H 1999 *Phys. Rev. A* 60 4168; Taichenachev A V, Tumaikin A N and Yudin V I 1999 *J. Opt. B: Quant. Semicl. Opt.* 5 557
- [8] Hinds E A and Hughes I G 1999 *J. Phys. D: Appl. Phys.* 32 R119

- [9] Flambaum V V *quant-ph/9911061*
- [10] Yang J and Zelevinsky V 1998 *Am. J. Phys.* 66 247
- [11] Anderson M H, Ensher J R, Matthews M R, Wieman C E and Cornell E A 1995 *Science* 269 198
- [12] Huang K and Yang C N 1957 *Phys. Rev.* 105 767; Huang K 1987 *Statistical Mechanics* (New York: John Wiley & Sons); Bradley C C, Sackett C A, Tollet J J and Hulet R G 1995 *Phys. Rev. Lett.* 75 1687
- [13] Girardeau M 1960 *J. Math. Phys.* 1 516; Lieb E H and Liniger W 1963 *Phys. Rev.* 130 1605; Lieb E H *ibid* 1616; McGuire J B 1964 *J. Math. Phys.* 5 622; McGuire J B 1965 *ibid* 6 432; Yang C N 1967 *Phys. Rev. Lett.* 19 1312; *ibid* 1968 *Phys. Rev.* 168 1920
- [14] Zorbas J 1980 *J. Math. Phys.* 21 840; Albeverio S, Gesztesy F, Hoegh-Krohn R and Holden H 1988 *Solvable Models in Quantum Mechanics* (Berlin: Springer); Park D K 1995 *J. Math. Phys.* 36 5453
- [15] Cheon T and Shigehara T 1997 *Phys. Lett A* 233 11;
- [16] Šeba P 1990 *Phys. Rev. Lett.* 64 1855; Albeverio S and Šeba P 1991 *J. Stat. Phys.* 64 369
- [17] Šeba P and Życzkowski K 1991 *Phys. Rev. A* 44 3457
- [18] Grosche C 1990 *J. Phys. A: Math. Gen.* 23 5205; Shigehara T 1994 *Phys. Rev. E* 50 4357; Weaver R L and Sornette D 1995 *Phys. Rev. E* 52 3341; Cheon T and Shigehara T 1996 *Phys. Rev. E* 54 3300; Shigehara T and Cheon T 1997 *Phys. Rev. E* 55 6832
- [19] Pathria R K 1998 *Am. J. Phys.* 66 1080

- [20] Heller E J 1984 *Phys. Rev. Lett.* 53 1515
- [21] Wigner E P 1957 *Proc Fourth Canadian Math Congress* 174
- [22] Dyson F J and Mehta M L 1963 *J. Math. Phys.* 4 489
- [23] Biswas D and Jain S R 1990 *Phys. Rev. A* 42 3170
- [24] Kaplan I and Heller E J 1992 *Physica D* 121 1-2
- [25] Heller E J, O'Connor P W and Gehlen J 1989 *Physica Scripta* 40 354
- [26] Zemlyakov A N and Katok A B 1975 *Math. Notes* 18 291
- [27] Richens P J and Berry M V 1981 *Physica D* 2 495; Życzkowski K 1992 *Acta Phys. Pol. B* 23 245
- [28] Pattanayak A K and Schieve W C 1994 *Phys. Rev. Lett.* 72 2855; Tomsovic S and Ullmo D 1994 *Phys. Rev. E* 50 145; Ashkenazy Y, Horwitz L P, Levitan J, Lewkowicz M and Rothschild Y 1995 *Phys. Rev. Lett.* 75 1070; Berkovits R, Ashkenazy Y, Horwitz L P, Levitan J 1997 *Physica A* 238 279
- [29] Cohen 1977 *Quantum Mechanics* 1
- [30] Miltenburg A G and Ruijgrok T W 1994 *Physica A* 210 476
- [31] Delande D 1989 *Chaos and quantum physics* Course 10
- [32] Gottfried Volume 1 1a. Ed.
- [33] Meza-Montes L and Ulloa S E 1997 *Phys. Rev. E* 55 R6319
- [34] Hasegawa M 1998 *Phys. Lett A* 242 19
- [35] Jacquod Ph and Shepelyansky D L 1997 *Phys. Rev. Lett* 79 1837; Meza-Montes L and Ulloa S E 1998 *Physica B* 249 224; Borgonovi F, Guarneri I, Izrailev F M and Casati G 1998 *Phys. Lett. A* 247 140

- [36] Sakurai *Modern Quantum Phys.*
- [37] Lewenkopf C H 1990 *Phys. Rev. A* 42 2431
- [38] Gaudin M 1971 *Phys. Rev. A* 4 386
- [39] Luz M G E, Heller E J and Cheng B K 1998 *J. Phys. A* 31 2975
- [40] *Chen Ning Yang: A Great Physicists of the Twenty Century*, eds. C.S. Liu, S.T. Yau (Cambridge USA, International Press, 1995)