

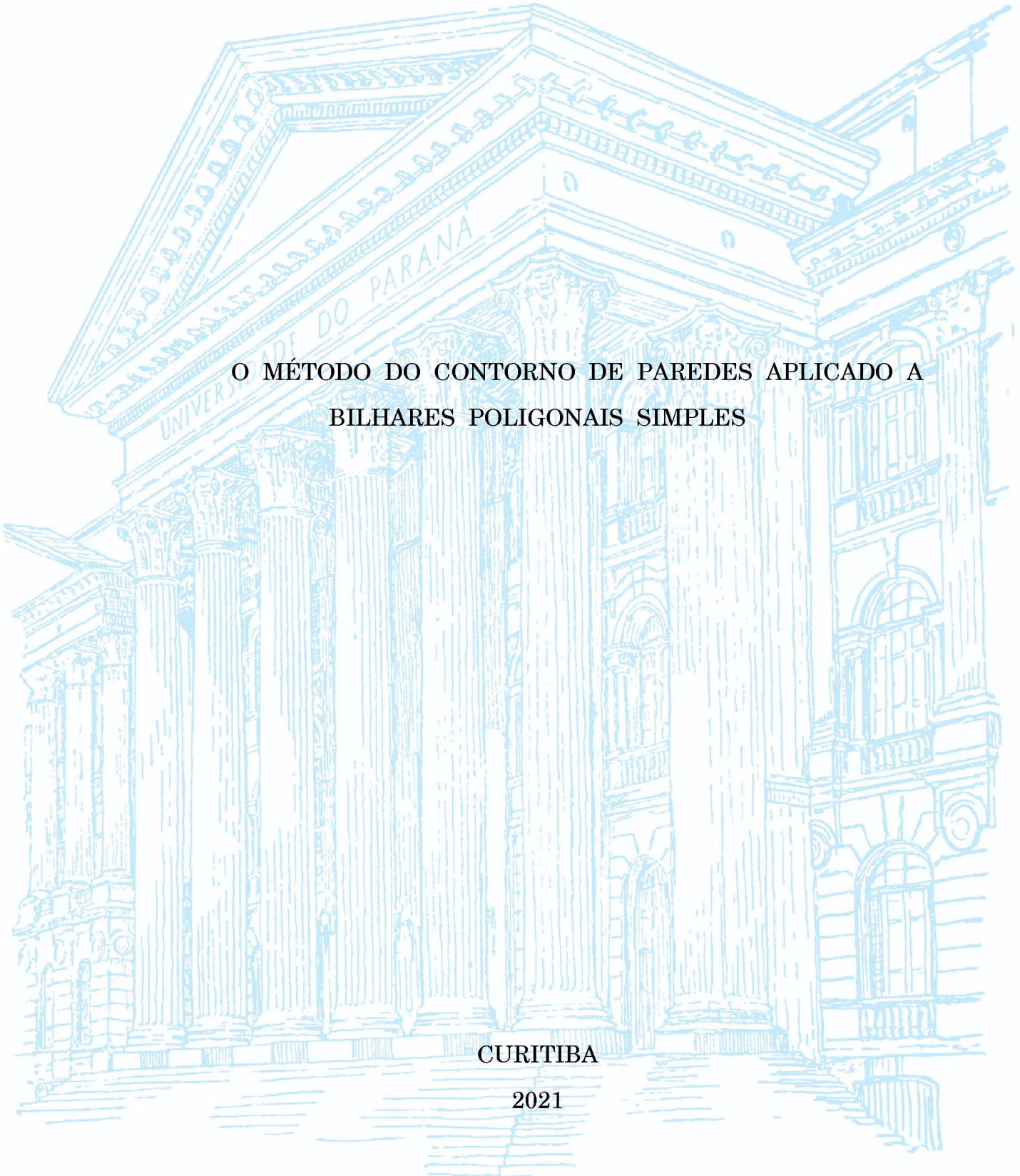
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

FELIPE TESTON

O MÉTODO DO CONTORNO DE PAREDES APLICADO A
BILHARES POLIGONAIS SIMPLES

CURITIBA

2021



FELIPE TESTON

O MÉTODO DO CONTORNO DE PAREDES APLICADO A
BILHARES POLIGONAIS SIMPLES

Tese apresentada ao curso de Pós-Graduação em Física do Setor de Ciências Exatas da Universidade Federal do Paraná como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Física.

Orientador: Prof. Dr. Marcos Gomes Eleutério da Luz

CURITIBA

2021

Catálogo na Fonte: Sistema de Bibliotecas, UFPR
Biblioteca de Ciência e Tecnologia

T345m Teston, Felipe
O Método do Contorno de Paredes aplicado a bilhares poligonais simples [recurso eletrônico] / Felipe Teston – Curitiba, 2021.

Tese - Universidade Federal do Paraná, Setor de Ciências Exatas, Programa de Pós-graduação em Física.

Orientador: Prof. Dr. Marcos Gomes Eleutério da Luz.

1. Método do Contorno de Paredes. 2. Bilhares quânticos. I. Universidade Federal do Paraná. II. Luz, Marcos Gomes Eleutério da. III. Título.

CDD: 530.12

Bibliotecária: Roseny Rivelini Morciani CRB-9/1585

TERMO DE APROVAÇÃO

Os membros da Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em FÍSICA da Universidade Federal do Paraná foram convocados para realizar a arguição da tese de Doutorado de **FELIPE TESTON** intitulada: "**O Método do Contorno de Paredes aplicado a bilhares poligonais simples**", sob orientação do Prof. Dr. MARCOS GOMES ELEUTÉRIO DA LUZ, que após terem inquirido o aluno e realizada a avaliação do trabalho, são de parecer pela sua APROVAÇÃO no rito de defesa. A outorga do título de doutor está sujeita à homologação pelo colegiado, ao atendimento de todas as indicações e correções solicitadas pela banca e ao pleno atendimento das demandas regimentais do Programa de Pós-Graduação.

CURITIBA, 30 de Julho de 2021.

Assinatura Eletrônica

30/07/2021 18:08:02.0

MARCOS GOMES ELEUTÉRIO DA LUZ
Presidente da Banca Examinadora

Assinatura Eletrônica

02/08/2021 09:45:39.0

ANDRE GUSSO
Avaliador Externo (UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE)

Assinatura Eletrônica

02/08/2021 18:30:47.0

CÉLIA BEATRIZ ANTENEODO DE PORTO
Avaliador Externo (PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA DO RIO
DE JANEIRO)

Assinatura Eletrônica

30/07/2021 17:22:14.0

RODRIGO JOSÉ OCHEKOSKI MOSSANEK
Avaliador Interno (UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ)

Agradecimentos

- * Ao Prof. Dr. Marcos Gomes E. da Luz e ao Prof. Dr. Fabio M. Zanetti. Agradeço a paciência, a motivação e a confiança em delegar a mim este trabalho de que tanto me orgulho. *“...se fui capaz de ver mais longe, foi porque estive em pé sobre os ombros de gigantes...”*.
- * À minha família pelo apoio incondicional.
- * Aos colegas da pós-graduação, em especial aos colegas do grupo.
- * Ao secretário Leandro Camilo Florentino e à coordenação da pós-graduação.
- * À CAPES pelo apoio financeiro.

Dedico este trabalho a minha avó Zaira Savi (1939-2016) e aos meus tios Nevio Savi (1959-2017) e Norberto Savi (1961-2020). Não há luto que diminua a dor, nem tempo que apague esta saudade.

RESUMO

A proposta do presente trabalho é analisar as soluções dos bilhares quânticos triangular reto e retangular mediante variações de seus parâmetros relacionados à geometria e permeabilidade, respectivamente. Para o bilhar triangular, estudaremos as soluções quando a sua geometria varia na região de transição entre os regimes regular e caótico, sendo estas variações causadas pela modificação dos seus ângulos internos β e α . Para o bilhar retangular, a sua geometria será definida por um contorno externo formando um retângulo constituído também por um segmento de reta conectando dois vértices opostos, caracterizando a diagonal do sistema. Dessa forma, vamos buscar as soluções resultantes de variações na transmissão T_d nesta diagonal enquanto as paredes periféricas do contorno mantém transmissão T_p constante e próxima de zero.

O método utilizado para obtenção das soluções é o Método do Contorno de Paredes, uma ferramenta para cálculos de espalhamento quântico que tem por objeto principal a matriz T , a qual carrega informações da geometria e energia $E = k^2$ do bilhar. Utilizando as propriedades da matriz T , podemos obter o espectro do bilhar como função dos seus parâmetros de geometria e permeabilidade para então determinar a dinâmica das famílias de autoestados decorrentes destas variações no espaço de fase $k \times \beta$ e $k \times T_d$. Através da análise das funções de onda associadas a estes autoestados, obtivemos informações de certos comportamentos característicos observados como, por exemplo, a repulsão entre famílias. Ao final, analisamos também a distribuição dos níveis de energia usando a teoria do espaçamento de níveis para identificar a dinâmica do sistema.

Palavras-chaves: Dinâmica dos níveis de energia. Bilhar quântico triangular e retangular. Método do Contorno de Paredes.

ABSTRACT

The purpose of this work is to analyze the solutions of straight and rectangular triangular quantum billiards by varying their parameters related to geometry and permeability, respectively. For triangular billiards, we will study the solutions when their geometry varies in the transition region between the regular and chaotic regimes, these variations being caused by the modification of their internal angles β and α . For rectangular billiards, its geometry will be defined by an external contour forming a rectangle also constituted by a line segment connecting two opposite vertices, characterizing the diagonal of the system. Thus, we will seek solutions resulting from variations in the T_d transmission on this diagonal while the peripheral walls of the contour keep T_p transmission constant and close to zero.

The method used to obtain solutions is the boundary wall method, a tool for quantum scattering calculations whose main object is the T -matrix, which carries information about the geometry and energy $E = k^2$ of billiards. Using the properties of the T -matrix, we can obtain the billiard spectrum as a function of its geometric parameters and then determine the dynamics of the families of eigenstates resulting from these variations in the $k \times \beta$ and $k \times T_d$ phase space. By analyzing the wave functions associated with these eigenstates, we obtained information about certain observed behaviors such as, for example, the repulsion among families. In the end, we also analyze the distribution of energy levels using the level spacing theory to identify system dynamics.

Key-words: Level dynamics. Rectangular and triangular quantum billiards. Boundary Wall Method.

Lista de Figuras

1.1	Exemplos de possíveis formatos da barreira espalhadora: a) bilhar triangular (curva fechada); b) curva aberta; c) curva desconexa; d) ressonador aberto.	27
1.2	a) Representação esquemática do comportamento da luz na seção do plano $x - z$ do dispositivo. b) Estrutura geométrica do orifício de largura d . c) Densidade das distribuições de campo simuladas $ \Psi(x, z) ^2$. Fonte: [1].	28
1.3	a) Representação esquemática do acoplador direcional estudado, composto por dois canais de entrada, uma região de acoplamento e dois canais de saída. b-e) densidade da função de onda $ \Psi ^2$. Fonte: [2].	29
1.4	Geometria geral do triângulo reto com dimensões definidas pelo ângulo β	31
1.5	Geometria retangular com um segmento de reta caracterizando a diagonal do sistema.	31
2.1	Bilhar com regiões interna e externa de contorno Γ . As linhas tracejadas indicam a dinâmica de uma partícula sob o efeito de espalhamento.	34
2.2	Sistema de coordenadas $t - n$ “localmente separável” no ponto s em Γ	37
2.3	Processo de espalhamento na região a) interna e b) externa ao bilhar. A soma de todas as contribuições deste tipo levam à onda espalhada observada no ponto \vec{r}	40
2.4	Curva formando um bilhar Γ convexo. Os pontos sobre Γ são parametrizados por θ_s	44
2.5	Discretização da curva Γ . N define a dimensão $T(i, j) = [T_{ij}]_{N \times N}$	47

2.6	a) Gráfico de $k \times \langle T(i, j) ^2 \rangle$ para a faixa do espectro $k \in [20, 30]$ do bilhar triangular com $\gamma = \infty$. b) Valor médio da densidade de probabilidade da função de onda $\langle \psi(x, y) ^2 \rangle$ para as autoenergias (1) e (2), sendo θ o ângulo de incidência e $\theta_{(1)}$ e $\theta_{(2)}$ os de ressonância. c) Função de onda $ \psi(x, y) ^2$ associado aos estados com $k_{(1)} = 21,902$, $k_{(2)} = 27,064$, $k_{(3)} = 23,43$ e $k_{(4)} = 25,65$ ($\theta_{(3)} = 180^\circ$ e $\theta_{(4)} = 270^\circ$). Na representação da função de onda, as cristas e vales são mostradas por regiões claras e escuras, respectivamente.	52
2.7	a) Gráfico de $k \times \langle T_k(i, j) ^2 \rangle$ para os primeiros 15 autoestados associados ao bilhar quadrado de lado unitário obtidos numericamente via MCP. b) Densidade de probabilidade da função de onda do caso analítico via (2.62) e do caso numérico via MCP com: $k_{1,1}^{(MCP)} = 4,45$; $k_{2,2}^{(MCP)} = 8,89$; $k_{3,3}^{(MCP)} = 13,34$; $k_{1,5}^{(MCP)} = 16,03$; $k_{2,5}^{(MCP)} = 16,92$; $k_{3,5}^{(MCP)} = 18,32$. As setas indicam duas degenerescências (2×5) e (5×2), (3×5) e (5×3).	53
2.8	a) Gráfico de $k \times \langle T_k(i, j) ^2 \rangle$ para os primeiros nove autoestados associados ao bilhar triangular ($30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$) calculados numericamente via MCP. b) Densidade de probabilidade da função de onda do caso analítico via (2.68) e do caso numérico pelo MCP com: $k_{3,1}^{(MCP)} = 9,63$; $k_{5,2}^{(MCP)} = 15,84$; $k_{5,1}^{(MCP)} = 16,65$; $k_{6,1}^{(MCP)} = 20,23$; $k_{7,2}^{(MCP)} = 22,68$; $k_{7,1}^{(MCP)} = 23,82$	55
3.1	Bilhar triangular reto no plano (x, y) com lados $l_1 = L / dl $, $l_2 = L dl $ e $ l_3 $ e ângulos internos $\alpha + \beta = \pi/2$	57
3.2	Representação gráfica da equação (2.61) mostrando a dependência linear da dimensão da matriz T do triângulo mediante relação de $N \times k$ para $\beta = 45, 0^\circ$ e $\beta = 30, 0^\circ$ com $\mu = 0, 05$	58
3.3	a) Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle T_k(i, j) ^2 \rangle$. b) Densidade de probabilidade associada aos autoestados com $k_A = 4,99$, $k_B = 7,03$, $k_C = 8,03$ e $k_D = 9,17$. A geometria adotada é a mesma para cada família, ou seja, $\beta_1 = 44, 2^\circ$, $\beta_2 = 44, 4^\circ$, $\beta_3 = 45, 0^\circ$, $\beta_4 = 45, 4^\circ$ e $\beta_5 = 45, 8^\circ$	59
3.4	Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle T_k(i, j) ^2 \rangle$. As áreas limitadas por I e II exibem regiões do espaço com interação entre famílias.	60

- 3.5 Gráfico de densidade $\langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$ em função do espaço de parâmetros $k \times \beta$. A linha pontilhada horizontal forma o bilhar triangular ($45^\circ, 45^\circ, 90^\circ$). As regiões definidas por I a VII serão ampliadas para dar mais detalhes a discussão sobre a função de onda. 61
- 3.6 Gráfico $k \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$ que mostra a simetria presente nas linhas que descrevem os níveis de energia do bilhar $\beta = 45, 0^\circ \pm 0, 6^\circ$ 62
- 3.7 a) Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$ da região I. b) Densidade de probabilidade da função de onda $|\psi|^2$ associada aos estados: **a1)** $k = 100, 99$, $\beta = 44, 92^\circ$; **a2)** $k = 100, 989$, $\beta = 44, 96^\circ$; **a3)** $k = 100, 989$, $\beta = 45, 0^\circ$; **a4)** $k = 100, 989$, $\beta = 45, 04^\circ$; **a5)** $k = 100, 99$, $\beta = 45, 08^\circ$; **b1)** $k = 101, 063$, $\beta = 44, 92^\circ$; **b2)** $k = 100, 063$, $\beta = 44, 96^\circ$; **b3)** $k = 100, 063$, $\beta = 45, 0^\circ$; **b4)** $k = 101, 063$, $\beta = 45, 04^\circ$; **b5)** $k = 101, 063$, $\beta = 45, 08^\circ$ 63
- 3.8 a) Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$ da região II. Ao lado é plotado os autoestados b1 e b4 sob o ponto de vista tridimensional. b) Densidade de probabilidade da função de onda $|\psi|^2$ associada aos estados: **a1)** $k = 101, 191$, $\beta = 44, 7^\circ$; **a2)** $k = 101, 186$, $\beta = 44, 84^\circ$; **a3)** $k = 101, 188$, $\beta = 45, 20^\circ$; **a4)** $k = 101, 191$, $\beta = 45, 30^\circ$; **b1)** $k = 101, 205$, $\beta = 44, 70^\circ$; **b2)** $k = 101, 190$, $\beta = 44, 84^\circ$; **b3)** $k = 101, 194$, $\beta = 45, 20^\circ$; **b4)** $k = 101, 205$, $\beta = 45, 30^\circ$; **ab)** $k = 101, 185$, $\beta = 45, 00^\circ$. As setas indicam alterações na função de onda na transição de um autoestado para outro. 65
- 3.9 a) Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$ da região III. b) Densidade de probabilidade da função de onda $|\psi|^2$ associada aos estados: **a1)** $k = 100, 601$, $\beta = 44, 64^\circ$; **a2)** $k = 100, 599$, $\beta = 44, 80^\circ$; **a3)** $k = 100, 599$, $\beta = 45, 20^\circ$; **a4)** $k = 100, 601$, $\beta = 45, 35^\circ$; **b1)** $k = 100, 609$, $\beta = 44, 65^\circ$; **b2)** $k = 100, 601$, $\beta = 44, 80^\circ$; **b3)** $k = 100, 601$, $\beta = 45, 20^\circ$; **b4)** $k = 100, 609$, $\beta = 45, 35^\circ$; **c1)** $k = 100, 634$, $\beta = 44, 70^\circ$; **c2)** $k = 100, 614$, $\beta = 44, 80^\circ$; **c3)** $k = 100, 614$, $\beta = 45, 20^\circ$; **c4)** $k = 100, 34$, $\beta = 45, 30^\circ$; **abc)** $k = 100, 598$, $\beta = 45, 00^\circ$. As setas indicam alterações na função de onda na transição de um autoestado para outro. 66

- 3.10 a) Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$ da região IV. b) Densidade de probabilidade da função de onda $|\psi|^2$ associada aos estados: **a1)** $k = 100, 283$, $\beta = 44, 34^\circ$; **a2)** $k = 100, 2867$, $\beta = 44, 37^\circ$; **a3)** $k = 100, 2864$, $\beta = 44, 43^\circ$; **a4)** $k = 100, 2846$, $\beta = 44, 45^\circ$; **b1)** $k = 100, 3005$, $\beta = 44, 34^\circ$; **b2)** $k = 100, 297$, $\beta = 44, 37^\circ$; **b3)** $k = 100, 3$, $\beta = 44, 43^\circ$; **b4)** $k = 100, 3026$, $\beta = 44, 45^\circ$. c) Gráfico de $k \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$. Os picos indicam autoenergias do sistema que, quando associados a $\beta = 45, 37^\circ$, constroem os autoestados a2 e b2. 68
- 3.11 a) Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$ da região V. b) Densidade de probabilidade da função de onda $|\psi|^2$ associada aos estados: **a1)** $k = 101, 266$, $\beta = 45, 60^\circ$; **a2)** $k = 101, 271$, $\beta = 45, 62^\circ$; **a3)** $k = 101, 275$, $\beta = 45, 68^\circ$; **a4)** $k = 101, 273$, $\beta = 45, 70^\circ$; **b1)** $k = 101, 287$, $\beta = 45, 60^\circ$; **b2)** $k = 101, 284$, $\beta = 45, 62^\circ$; **b3)** $k = 101, 289$, $\beta = 45, 68^\circ$; **b4)** $k = 101, 295$, $\beta = 45, 70^\circ$ 69
- 3.12 a) Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$ da região VI. b) Densidade de probabilidade da função de onda $|\psi|^2$ associada aos estados: **a1)** $k = 101, 323$, $\beta = 44, 65^\circ$; **a2)** $k = 101, 329$, $\beta = 44, 7^\circ$; **a3)** $k = 101, 333$, $\beta = 44, 75^\circ$; **a4)** $k = 101, 332$, $\beta = 44, 79^\circ$; **b1)** $k = 101, 336$, $\beta = 44, 65^\circ$; **b2)** $k = 101, 335$, $\beta = 44, 7^\circ$; **b3)** $k = 101, 334$, $\beta = 44, 77^\circ$; **b4)** $k = 101, 334$, $\beta = 44, 8^\circ$; **c1)** $k = 101, 341$, $\beta = 45, 65^\circ$; **c2)** $k = 101, 339$, $\beta = 45, 70^\circ$; **c3)** $k = 101, 341$, $\beta = 44, 77^\circ$; **c4)** $k = 101, 345$, $\beta = 44, 81^\circ$ 71
- 3.13 a) Gráfico $\langle |T_k(i, j)|^2 \rangle \times k \times \beta$ da região VII. Ao lado é plotado o autoestado c4 sob o ponto de vista tridimensional. A linha colorida indica qualitativamente a trajetória de uma partícula no seu bilhar análogo clássico. b) Densidade de probabilidade da função de onda $|\psi|^2$ associada aos estados: **a1)** $k = 101, 655$, $\beta = 45, 61^\circ$; **a2)** $k = 101, 643$, $\beta = 45, 62^\circ$; **a3)** $k = 101, 636$, $\beta = 44, 68^\circ$; **a4)** $k = 101, 646$, $\beta = 45, 72^\circ$; **b1)** $k = 101, 612$, $\beta = 45, 58^\circ$; **b2)** $k = 101, 604$, $\beta = 45, 765^\circ$; **b3)** $k = 101, 587$, $\beta = 45, 66^\circ$; **b4)** $k = 101, 580$, $\beta = 45, 71^\circ$; **c1)** $k = 101, 563$, $\beta = 45, 58^\circ$; **c2)** $k = 101, 57$, $\beta = 45, 63^\circ$; **c3)** $k = 101, 563$, $\beta = 45, 68^\circ$; **c4)** $k = 101, 550$, $\beta = 45, 69^\circ$ 72

3.14 a)	Ilustração de uma partícula com dinâmica descrita por $\psi'(x, y)$ confinada em uma órbita periódica para um determinado bilhar definido por β e l_1 e l_2 .	
b)	Após variações significativas nas dimensões do bilhar mediante $\Delta\beta$ e Δl_1 e Δl_2 , a periodicidade é “quebrada” e a trajetória, agora aleatória, passa a ser descrita por $\psi''(x, y)$.	73
3.15	Densidade da função de onda $ \psi ^2$ do bilhar estádio de Bonimovich com energia correspondente $k^2 = 1395,7$. As linhas amarelas indicam a trajetória de uma partícula no seu bilhar análogo clássico. Figura retirada da referência [3].	74
3.16 a)	Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle T_k(i, j) ^2 \rangle$. Ao lado é mostrado os autoestados a5 e b5 sob o ponto de vista tridimensional. As linhas coloridas indicam qualitativamente a trajetória de uma partícula no seu bilhar análogo clássico.	
b)	Densidade de probabilidade da função de onda $ \psi ^2$ associada aos estados: a1) $k = 101, 135, \beta = 43, 96^\circ$; a2) $k = 101, 44, \beta = 44, 21^\circ$; a3) $k = 101, 69, \beta = 44, 2^\circ$; a4) $k = 101, 86, \beta = 44, 57^\circ$; a5) $k = 102, 1, \beta = 44, 8^\circ$; b1) $k = 101, 235, \beta = 43, 47^\circ$; b2) $k = 101, 565, \beta = 44, 82^\circ$; b3) $k = 101, 905, \beta = 44, 21^\circ$; b4) $k = 102, 085, \beta = 44, 44^\circ$; b5) $k = 102, 185, \beta = 44, 59^\circ$; c1) $k = 101, 23, \beta = 42, 35^\circ$; c2) $k = 101, 645, \beta = 42, 68^\circ$; c3) $k = 101, 83, \beta = 42, 83^\circ$; c4) $k = 102, 14, \beta = 43, 12^\circ$; c5) $k = 102, 25, \beta = 43, 31^\circ$.	76
3.17 a)	Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle T_k(i, j) ^2 \rangle$.	
b)	Densidade de probabilidade da função de onda $ \psi ^2$ associada aos estados: d1) $k = 101, 122, \beta = 41, 22^\circ$; d2) $k = 101, 29, \beta = 41, 43^\circ$; d3) $k = 101, 451, \beta = 41, 6^\circ$; d4) $k = 101, 665, \beta = 41, 81^\circ$; e1) $k = 101, 122, \beta = 39, 66^\circ$; e2) $k = 101, 402, \beta = 40, 177^\circ$; e3) $k = 101, 78, \beta = 40, 74^\circ$; e4) $k = 102, 169, \beta = 41, 25^\circ$; f1) $k = 101, 99, \beta = 39, 26^\circ$; f2) $k = 102, 085, \beta = 39, 49^\circ$; f3) $k = 102, 176, \beta = 39, 69^\circ$; f4) $k = 102, 305, \beta = 39, 93^\circ$.	78
3.18	Função de escada espectral dos primeiros 1280 níveis de energia para ângulos compreendidos nas proximidades da região regular do triângulo. As curvas representam as soluções analíticas e numéricas por (3.1) (Weyl) e MCP, respectivamente.	80

3.19 a) Função de escada espectral mediante resultados analíticos (usando Weyl- (3.1) e (3.2)) e numéricos via MCP. A legenda “s/ deg” indica autovalores de (3.2) com apenas um autoestado por degenerescência. b) Distribuição dos níveis de energia $P(s)$ para as primeiras 953 autoenergias do triângulo (45°, 45°, 90°). As linhas contínuas representam as distribuições de Poisson e Wigner (GOE).	81
3.20 Densidade de probabilidade $P(s)$ para ângulos $\beta = 44, 0^\circ$, $\beta = 44, 2^\circ$, $\beta =$ $44, 4^\circ$, $\beta = 44, 5^\circ$, $\beta = 44, 6^\circ$ e $\beta = 44, 8^\circ$. As linhas contínuas representam $P(s)$ de Poisson, Wigner (GOE) e Berry-Robnik (BR). Os histogramas são montados numericamente via MCP.	83
3.21 a) Gráfico de densidade $\langle T_k(i, j) ^2 \rangle$ em função do espaço de parâmetros $k \times \beta$. Densidade de probabilidade da função de onda $ \psi ^2$ com $k^{(a1)} = 5, 211$, $k^{(a2)} =$ $k^{(a3)} = 5, 18$; $k^{(a4)} = k^{(a5)} = 5, 148$; $k^{(b1)} = 8, 568$; $k^{(b2)} = 8, 536$; $k^{(b3)} = k^{(b4)} =$ $8, 505$; $k^{(b5)} = 8, 473$; $k^{(c1)} = k^{(c2)} = k^{(c3)} = 10, 341$; $k^{(c4)} = k^{(c5)} = 10, 31$; $k^{(d1)} = 11, 925$; $k^{(d2)} = 11, 893$; $k^{(d3)} = 11, 861$; $k^{(d4)} = 11, 83$; $k^{(d5)} = 11, 798$. As setas indicam variações na morfologia da função de onda na transição de um autoestado para outro.	84
3.22 Gráfico de densidade $\langle T_k(i, j) ^2 \rangle$ em função do espaço de parâmetros $k \times \beta$. A linha pontilhada horizontal forma o bilhar triangular (30°, 60°, 90°). As regiões I a VI serão ampliadas para uma discussão mais detalhada da função de onda.	85
3.23 a) Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle T_k(i, j) ^2 \rangle$ da região I. Ao lado são exibidos os estados a1 e a3 em três dimensões. b) Densidade de probabilidade da função de onda $ \psi ^2$ associada aos estados: a1) $k = 101, 389$, $\beta = 29, 89^\circ$; a2) $k = 101, 38$, $\beta = 29, 95^\circ$; a3) $k = 101, 369$, $\beta = 30, 0^\circ$; a4) $k = 101, 371$, $\beta = 30, 05^\circ$; a5) $k = 101, 354$, $\beta = 30, 13^\circ$; b1) $k = 101, 427$, $\beta = 29, 86^\circ$; b2) $k = 101, 426$, $\beta = 29, 95^\circ$; b3) $k = 101, 425$, $\beta = 30, 0^\circ$; b4) $k = 101, 426$, $\beta = 30, 05^\circ$; a5) $k = 101, 426$, $\beta = 30, 1^\circ$. As setas indicam flutuações na distribuição espacial da função de onda com a variação da geometria.	87

- 3.24 a) Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$ da região II. b) Densidade de probabilidade da função de onda $|\psi|^2$ associada aos estados: **a1)** $k = 100,841$, $\beta = 29,91^\circ$; **a2)** $k = 100,843$, $\beta = 29,96^\circ$; **a3)** $k = 100,843$, $\beta = 30,0^\circ$; **a4)** $k = 100,843$, $\beta = 30,03^\circ$; **a5)** $k = 100,841$, $\beta = 30,08^\circ$; **b1)** $k = 100,865$, $\beta = 29,92^\circ$; **b2)** $k = 100,864$, $\beta = 29,96^\circ$; **b3)** $k = 100,862$, $\beta = 30,0^\circ$; **b4)** $k = 100,863$, $\beta = 30,04^\circ$; **b5)** $k = 100,865$, $\beta = 30,08^\circ$ 88
- 3.25 a) Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$ da região III. b) Densidade de probabilidade da função de onda $|\psi|^2$ associada aos estados: **a1)** $k = 100,18$, $\beta = 29,85^\circ$; **a2)** $k = 100,181$, $\beta = 29,9^\circ$; **a3)** $k = 100,181$, $\beta = 30,1^\circ$; **a4)** $k = 100,18$, $\beta = 30,15^\circ$; **b1)** $k = 100,191$, $\beta = 29,85^\circ$; **b2)** $k = 100,186$, $\beta = 29,9^\circ$; **b3)** $k = 100,186$, $\beta = 30,1^\circ$; **b4)** $k = 100,192$, $\beta = 30,15^\circ$; **ab)** $k = 100,182$, $\beta = 30,0^\circ$ 89
- 3.26 a) Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$ da região IV. Ao lado são plotados a4 e b2 em três dimensões. b) Densidade de probabilidade da função de onda $|\psi|^2$ associada aos estados: **a1)** $k = 100,165$, $\beta = 29,43^\circ$; **a2)** $k = 100,166$, $\beta = 29,46^\circ$; **a3)** $k = 100,155$, $\beta = 29,49^\circ$; **a4)** $k = 100,144$, $\beta = 29,5^\circ$; **b1)** $k = 100,194$, $\beta = 29,45^\circ$; **b2)** $k = 100,18$, $\beta = 29,467^\circ$; **b3)** $k = 100,168$, $\beta = 29,5^\circ$; **b4)** $k = 100,169$, $\beta = 29,53^\circ$ 90
- 3.27 a) Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$ da região V. Ao lado é plotado a4 sob ponto de vista tridimensional. b) Densidade de probabilidade da função de onda $|\psi|^2$ associada aos estados: **a1)** $k = 100,926$, $\beta = 30,65^\circ$; **a2)** $k = 100,929$, $\beta = 30,67^\circ$; **a3)** $k = 100,921$, $\beta = 30,71^\circ$; **a4)** $k = 100,909$, $\beta = 30,73^\circ$; **b1)** $k = 100,96$, $\beta = 30,67^\circ$; **b2)** $k = 100,945$, $\beta = 30,69^\circ$; **b3)** $k = 100,936$, $\beta = 30,74^\circ$; **b4)** $k = 100,94$, $\beta = 30,77^\circ$ 91

- 3.28 a) Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$ da região VI. Ao lado são plotados a1 e c4 em três dimensões. b) Densidade de probabilidade da função de onda $|\psi|^2$ associada aos estados: **a1)** $k = 100, 52, \beta = 29, 3^\circ$; **a2)** $k = 100, 537, \beta = 29, 32^\circ$; **a3)** $k = 100, 547, \beta = 29, 33^\circ$; **a4)** $k = 100, 531, \beta = 29, 38^\circ$; **b1)** $k = 100, 556, \beta = 29, 27^\circ$; **b2)** $k = 100, 554, \beta = 29, 3^\circ$; **b3)** $k = 100, 551, \beta = 29, 33^\circ$; **b4)** $k = 100, 547, \beta = 29, 38^\circ$; **c1)** $k = 100, 586, \beta = 29, 27^\circ$; **c2)** $k = 100, 564, \beta = 29, 32^\circ$; **c3)** $k = 100, 58, \beta = 29, 346^\circ$; **c4)** $k = 100, 6, \beta = 29, 36^\circ$ 92
- 3.29 a) Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$. Ao lado são plotados os autoestados b1 e c1 em três dimensões. As linhas vermelhas indicam a trajetória de uma partícula no seu bilhar análogo clássico. No detalhe, uma porção ilustrada do grupo D. b) Densidade de probabilidade da função de onda $|\psi|^2$ associada aos estados: **a1)** $k = 100, 64, \beta = 29, 39^\circ$; **a2)** $k = 100, 782, \beta = 29, 45^\circ$; **a3)** $k = 100, 948, \beta = 29, 62^\circ$; **a4)** $k = 100, 044, \beta = 29, 7^\circ$; **a5)** $k = 101, 192, \beta = 29, 82^\circ$; **b1)** $k = 100, 92, \beta = 29, 23^\circ$; **b2)** $k = 101, 012, \beta = 29, 33^\circ$; **b3)** $k = 101, 084, \beta = 29, 4^\circ$; **b4)** $k = 101, 144, \beta = 29, 48^\circ$; **b5)** $k = 101, 25, \beta = 29, 61^\circ$; **c1)** $k = 100, 652, \beta = 30, 74^\circ$; **c2)** $k = 100, 862, \beta = 30, 52^\circ$; **c3)** $k = 100, 956, \beta = 30, 42^\circ$; **c4)** $k = 101, 312, \beta = 30, 31^\circ$; **c5)** $k = 101, 212, \beta = 30, 14^\circ$; **d1)** $k = 100, 849, \beta = 30, 75^\circ$; **d2)** $k = 100, 982, \beta = 30, 64^\circ$; **d3)** $k = 101, 072, \beta = 30, 54^\circ$; **d4)** $k = 101, 14, \beta = 30, 45^\circ$; **d5)** $k = 101, 22, \beta = 30, 35^\circ$ 94
- 3.30 Função de escada espectral dos primeiros 1290 níveis de energia para ângulos compreendidos nas proximidades da região regular do triângulo. As curvas representam as soluções analíticas e numéricas por (3.1) (Weyl) e MCP, respectivamente. 96
- 3.31 a) Função de escada espectral mediante resultados analíticos e numéricos via MCP. b) Distribuição dos níveis de energia $P(s)$ para os primeiros 1009 autoestados do triângulo ($30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$). As linhas contínuas representam as curvas de Poisson e GOE. 98

3.32	Densidade de probabilidade $P(s)$ para ângulos $\beta = 29^\circ$, $\beta = 29,25^\circ$, $\beta = 22,5^\circ$, $\beta = 30,5^\circ$, $\beta = 30,75^\circ$ e $\beta = 31^\circ$. As linhas contínuas representam $P(s)$ de Wigner (GOE) e Berry-Robnik (BR). Os histogramas são montados numericamente via MCP.	99
4.1	Bilhar retangular com diagonal permeável.	103
4.2	Função de escada spectral mediante MCP com $n_d = 2$, $\beta = 30^\circ$ e $T_d = 0$. O “ajuste” consiste na remoção de uma das energias duplicadas. As demais curvas representam autoestados obtidos analiticamente. A divergência visível do MCP com Weyl é resultado da presença de degenerescências no triângulo $(30^\circ, 60^\circ, 90^\circ)$	104
4.3	Representação gráfica da equação (2.61) mostrando a dependência linear da dimensão da matriz T do retângulo da relação $N \times k$ para $\beta = 30,0^\circ$ e $\beta = 22,5^\circ$ com $\mu = 0,05$	105
4.4	Estrutura da geometria atribuída ao bilhar retangular com uma parede que forma a diagonal do sistema.	105
4.5	Gráfico de $k \times T_d \times \langle T(i, j) ^2 \rangle$ para $\beta = 30,0^\circ$. As regiões claras formando curvas representam famílias de autoestados do bilhar retangular com diagonal permeável. As setas indicam esquematicamente o processo de variação da transmissão na parede \overline{ac} . Ao lado é mostrado a relação entre os estados inicial e final diante da permabilidade calculada nos limites inferior e superior, respectivamente.	106
4.6	a) Gráfico de $k \times T_d \times \langle T(i, j) ^2 \rangle$ da região I. b) Densidade de probabilidade $ \psi ^2$ associada aos estados: a1) $k = 9,62$, $T_d = 0$; a2) $k = 8,80$, $T_d = 0,235$; a3) $k = 8,21$, $T_d = 0,525$; a4) $k = 7,58$, $T_d = 0,79$; a5) $k = 6,30$, $T_d = 1$; b2) $k = 9,35$, $T_d = 0,26$; b3) $k = 9,18$, $T_d = 0,535$; b4) $k = 8,90$, $T_d = 0,845$; b5) $k = 8,33$, $T_d = 1$	108

- 4.7 a) Gráfico de $k \times T_d \times \langle |T(i, j)|^2 \rangle$ da região II. b) Densidade de probabilidade $|\psi|^2$ associada aos estados: **a1)** $k = 13, 11, T_d = 0$; **a2)** $k = 12, 27, T_d = 0, 325$; **a3)** $k = 11, 80, T_d = 0, 68$; **a4)** $k = 11, 42, T_d = 0, 9$; **a5)** $k = 10, 90, T_d = 1$; **b2)** $k = 12, 77, T_d = 0, 28$; **b3)** $k = 12, 32, T_d = 0, 715$; **b4)** $k = 11, 88, T_d = 0, 925$; **b5)** $k = 11, 35, T_d = 1$ 109
- 4.8 a) Gráfico de $k \times T_d \times \langle |T(i, j)|^2 \rangle$ da região III. b) Densidade de probabilidade $|\psi|^2$ associada aos estados: **a1)** $k = 15, 83, T_d = 0$; **a2)** $k = 14, 91, T_d = 0, 29$; **a3)** $k = 14, 38, T_d = 0, 57$; **a4)** $k = 13, 5, T_d = 0, 89$; **a5)** $k = 12, 58, T_d = 1$; **b2)** $k = 15, 57, T_d = 0, 23$; **b3)** $k = 15, 3, T_d = 0, 39$; **b4)** $k = 14, 69, T_d = 0, 7$; **b5)** $k = 13, 71, T_d = 1$; **c1)** $k = 16, 65, T_d = 0$; **c2)** $k = 15, 77, T_d = 0, 18$; **c3)** $k = 15, 39, T_d = 0, 51$; **c4)** $k = 15, 03, T_d = 0, 86$; **c5)** $k = 14, 41, T_d = 1$ 110
- 4.9 a) Gráfico de $k \times T_d \times \langle |T(i, j)|^2 \rangle$ da região IV. b) Densidade de probabilidade $|\psi|^2$ associada aos estados: **a1)** $k = 19, 22, T_d = 0$; **a2)** $k = 18, 6, T_d = 0, 17$; **a3)** $k = 17, 96, T_d = 0, 6$; **a4)** $k = 17, 63, T_d = 0, 79$; **ab5) = ac5)** $k = 16, 63, T_d = 1$; **b2)** $k = 18, 83, T_d = 0, 35$; **b3)** $k = 18, 29, T_d = 0, 69$; **b4)** $k = 17, 59, T_d = 0, 9$; **c1)** $k = 20, 22, T_d = 0$; **c2)** $k = 19, 55, T_d = 0, 15$; **c3)** $k = 18, 75, T_d = 0, 51$; **c4)** $k = 18, 19, T_d = 0, 87$; **c5)** $k = 17, 51, T_d = 1$ 112
- 4.10 Diagrama com a morfologia da função de onda associada aos estados do triângulo e retângulo nos extremos $T_d = 0$ e $T_d = 1$ para o bilhar ($30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$). . 116
- 4.11 a) Gráfico de $k \times T_d \times \langle |T(i, j)|^2 \rangle$ para $k \in [21, 30]$. As regiões V a VIII são ampliadas a direita para identificar a natureza dos pontos de convergência. C representa uma região de cruzamento. b) Densidade de probabilidade $|\psi|^2$ associada aos estados; **V) a1)** $k = 21, 94, T_d = 0, 086$; **a2)** $k = 21, 73, T_d = 0, 212$; **b1)** $k = 22, 1, T_d = 0, 082$; **b2)** $k = 21, 83, T_d = 0, 22$. **VI) a1)** $k = 25, 08, T_d = 0, 298$; **a2)** $k = 24, 88, T_d = 0, 45$; **b1)** $k = 25, 19, T_d = 0, 304$; **b2)** $k = 24, 95, T_d = 0, 456$. **VII) a1)** $k = 25, 8, T_d = 0, 47$; **a2)** $k = 25, 64, T_d = 0, 612$; **b1)** $k = 25, 89, T_d = 0, 482$; **b2)** $k = 25, 71, T_d = 0, 616$. **VIII) a1)** $k = 28, 23, T_d = 0, 058$; **a2)** $k = 28, 08, T_d = 0, 13$, **b1)** $k = 28, 31, T_d = 0, 064$; **b2)** $k = 28, 15, T_d = 0, 15$ 117

4.12	Densidade de probabilidade $P(s)$ dos primeiros 1200 níveis de energia para valores intermediários de transmissão. Os histogramas são construídos numericamente via MCP enquanto as curvas representam as distribuições de Poisson e Berry-Robnik.	119
4.13	Estrutura geométrica atribuída ao bilhar retangular com uma diagonal conectando dois vértices.	120
4.14	Gráfico de $k \times T_d \times \langle T(i, j) ^2 \rangle$ para $\beta = 22, 5^\circ$. As regiões claras formando curvas representam famílias de autoestados do bilhar com diagonal permeável. As setas indicam esquematicamente como ocorre o processo de variação de transmissão na parede diagonal.	121
4.15	a) Gráfico de $k \times T_d \times \langle T(i, j) ^2 \rangle$ da região I. b) Densidade de probabilidade $ \psi ^2$ associada aos estados: a1) $k = 12, 02, T_d = 0$; a2) $k = 11, 38, T_d = 0, 15$; a3) $k = 10, 64, T_d = 0, 5$; a4) $k = 9, 89, T_d = 0, 78$; a5) $k = 8, 24, T_d = 1$; b2) $k = 11, 59, T_d = 0, 16$; b3) $k = 11, 16, T_d = 0, 52$; b4) $k = 10, 86, T_d = 0, 75$; b5) $k = 9, 87, T_d = 1$	122
4.16	a) Gráfico de $k \times T_d \times \langle T(i, j) ^2 \rangle$ da região II. b) Densidade de probabilidade $ \psi ^2$ associada aos estados: a1) $k = 15, 74, T_d = 0$; a2) $k = 14, 59, T_d = 0, 225$; a3) $k = 14, 19, T_d = 0, 38$; a4) $k = 13, 35, T_d = 0, 735$; a5) $k = 12, 12, T_d = 1$; b2) $k = 15, 57, T_d = 0, 245$; b3) $k = 15, 42, T_d = 0, 645$; b4) $k = 15, 26, T_d = 0, 865$; b5) $k = 14, 69, T_d = 1$	123
4.17	a) Gráfico de $k \times T_d \times \langle T(i, j) ^2 \rangle$ da região III. b) Densidade de probabilidade $ \psi ^2$ associada aos estados: a1) $k = 19, 13, T_d = 0$; a2) $k = 18, 51, T_d = 0, 195$; a3) $k = 17, 82, T_d = 0, 53$; a4) $k = 17, 2, T_d = 0, 74$; a5) $k = 15, 52, T_d = 1$; b2) $k = 18, 57, T_d = 0, 185$; b3) $k = 18, 05, T_d = 0, 55$; b4) $k = 17, 55, T_d = 0, 85$; b5) $k = 16, 45, T_d = 1$	124
4.18	a) Gráfico de $k \times T_d \times \langle T(i, j) ^2 \rangle$ da região V. b) Densidade de probabilidade $ \psi ^2$ associada aos estados: a1) $k = 22, 49, T_d = 0$; a2) $k = 21, 71, T_d = 0, 24$; a3) $k = 21, 38, T_d = 0, 42$; a4) $k = 20, 44, T_d = 0, 89$; a5) $k = 19, 72, T_d = 1$; b2) $k = 21, 87, T_d = 0, 24$; b3) $k = 21, 38, T_d = 0, 66$; b4) $k = 20, 9, T_d = 0, 92$; b5) $k = 20, 33, T_d = 1$	125

- 4.19 a) Gráfico de $k \times T_d \times \langle |T(i, j)|^2 \rangle$ da região IV. b) Densidade de probabilidade $|\psi|^2$ associada aos estados: **a1)** $k = 20, 66, T_d = 0$; **a2)** $k = 19, 91, T_d = 0, 19$; **a3)** $k = 19, 5, T_d = 0, 41$; **a4)** $k = 18, 28, T_d = 0, 91$; **a5)** $k = 17, 46, T_d = 1$; **b2)** $k = 20, 09, T_d = 0, 21$; **b3)** $k = 19, 69, T_d = 0, 42$; **b4)** $k = 18, 56, T_d = 0, 91$; **b5)** $k = 17, 88, T_d = 1$ 126
- 4.20 Diagrama com a morfologia da função de onda associada aos estados do triângulo e retângulo nos extremos $T_d = 0$ e $T_d = 1$ para o caso $(22, 5^\circ, 67, 5^\circ, 90^\circ)$. 128
- 4.21 a) Gráfico de $k \times T_d \times \langle |T(i, j)|^2 \rangle$ para $k \in [30, 40]$. As regiões V a VIII são ampliadas a direita para identificar a natureza dos pontos de convergência. C representa uma região de cruzamento. b) Densidade de probabilidade $|\psi|^2$ associada aos estados; **VI) a1)** $k = 32, 34, T_d = 0, 5$; **a2)** $k = 32, 1, T_d = 0, 69$; **b1)** $k = 32, 5, T_d = 0, 53$; **b2)** $k = 32, 3, T_d = 0, 7$. **VII) a1)** $k = 34, 08, T_d = 0, 3$; **a2)** $k = 33, 79, T_d = 0, 45$; **b1)** $k = 34, 13, T_d = 0, 3$; **b2)** $k = 33, 85, T_d = 0, 45$. **VIII) a1)** $k = 36, 06, T_d = 0, 53$; **a2)** $k = 35, 5, T_d = 0, 59$; **b1)** $k = 36, 09, T_d = 0, 53$; **b2)** $k = 35, 98, T_d = 0, 59$. **IX) a1)** $k = 37, 86, T_d = 0, 027$; **a2)** $k = 37, 78, T_d = 0, 05$; **b1)** $k = 37, 93, T_d = 0, 027$; **b2)** $k = 37, 84, T_d = 0, 05$ 129
- 4.22 Função de escada espectral obtida numericamente via MCP e analiticamente via Weyl. O ajuste consiste na remoção de uma das energias duplicadas que são soluções dos triângulos superior \overline{acda} e inferior \overline{abca} quando a parede \overline{ac} é totalmente impermeável ($T_d = 0$). 130
- 4.23 Densidade de probabilidade $P(s)$ dos primeiros 1200 níveis de energia para valores intermediários de transmissão. Para a transmissão $T_d = 0$, $P(s)$ é calculada para os primeiros 492 níveis. Os histogramas são montados numericamente via MCP e as curvas se referem a distribuição de Brody para o sistema com $T_d = 0$ e a distribuição de Berry-Robnik para transmissões intermediárias. 131

5.1	<p>O Método do Contorno de Paredes assume que para a “região livre” $V \in \mathbb{R}^N$. A função de Green é dada por G_0, onde apropriadas condições de contorno são impostas para as bordas \mathcal{C}_V de V. Se \mathcal{C}_V for infinito, então $V = \mathbb{R}^N$ e G_0 é a função de Green para todo o espaço livre, situação usualmente considerada no MCP. Ao descrever estruturas arbitrárias fechadas (por exemplo, \mathcal{C}_1), abertas conectadas (por exemplo, \mathcal{C}_2), e abertas desconectadas (por exemplo, \mathcal{C}_3) estruturas de paredes finas — que podem satisfazer condições de contorno distintas — como potenciais de parede δ, o MCP é capaz de obter espalhamento externo e/ou estados internos em termos de uma abordagem de espalhamento baseada em uma equação do tipo Lippmann-Schwinger.</p>	136
5.2	<p>(a) O guia de onda retangular semi-infinito em 2D constituindo o domínio V. (b) A linha reta \mathcal{C}, quando considerada junto com as partes das paredes de V, pode formar bilhares distintos, como um trapézio, um retângulo (se $\theta = \pi/2$), e um triângulo retângulo se L_x estiver corretamente definido (em detalhes no canto superior direito).</p>	144
5.3	<p>O quadrado do módulo de A, equação (5.32), como função de λ_l/L_x (com λ_l o comprimento de onda incidente ao longo de x) para quatro valores distintos da transmissão de probabilidade P_t através de \mathcal{C}. Aqui $l = 1$ e $L_x = 1$. Os picos representam os estados quase-ligados associados à existência de um lado permeável da estrutura retangular, quando a amplitude da onda possui considerável aumento. A inserção em (a) ilustra que para $P_t > 0$, A não desaparece completamente para qualquer valor de λ_l/L_x se $P_t > 0$. A inserção em (b) exemplifica uma tendência, as ressonâncias tendem a desaparecer para λ_l/L_x sendo poucas unidades (em (b) não são mais observados picos para $\lambda_l/L_x > 2,7$).</p>	150
5.4	<p>Geometria geral da guia de onda. As dimensões $L_x + l_x$ e L_y definem a base a altura da guia, respectivamente. Ajustando a posição l_x e o ângulo de inclinação θ da parede L, são obtidos diferentes bilhares.</p>	151

- 5.5 a) guia de onda formando o bilhar quadrado de lado $L_x = L = 1$, com $l_x = 0$ e $\theta = 90^\circ$. b), c), d), f) e g) são funções de onda associadas as energias $k^{(MCP)}$. $k^{(A)}$ são autovalores analíticos via equação (2.65). A Fig. e) representa uma energia fora da ressonância. 153
- 5.6 a) guia de onda formando o bilhar triangular $(45^\circ, 45^\circ, 90^\circ)$ com $l_x = \sqrt{2}$, obtido com $L_x = 0$, e $\theta = 45^\circ$. Para estes parâmetros $L_y = \sqrt{2}$. b), c), d) e f) autofunções associadas as energias $k^{(MCP)}$. $k^{(A)}$ são autovalores analíticos via equação (3.2) com $l_1 = l_x = \sqrt{2}$ e $l_2 = L_y = \sqrt{2}$. A Fig. e) representa uma energia fora da ressonância. 154
- 5.7 a) guia de onda formando o bilhar triangular $(30^\circ, 60^\circ, 90^\circ)$ com $l_x = 1$, obtido com $L_x = 0$, e $\theta = 30^\circ$. Para estes parâmetros $L_y = \tan[30^\circ]$. b), c), e), f) e g) são autofunções associadas as energias $k^{(MCP)}$. $k^{(A)}$ são autovalores analíticos via equação (2.69). A Fig. e) representa uma energia fora da ressonância. . . . 155
- 5.8 a) guia de onda formando o trapézio, sendo a junção das geometrias do quadrado e do triângulo $(45^\circ, 45^\circ, 90^\circ)$ com $l_x = 1$, obtido com $L_x = 1$, e $\theta = 45^\circ$. Para estes parâmetros $L_y = 1$. b), c), d), e) e f) são autofunções associadas as energias $k^{(MCP)}$. A Fig. g) representa uma energia fora da ressonância. 156

Lista de Símbolos

Capítulos 2, 3 e 4

$\vec{r}(s)$	Vetor posição da onda espalhada em um ponto s da barreira.
\vec{r}	Vetor posição da onda espalhada no domínio espacial do bilhar.
γ	Permeabilidade da barreira.
Γ	Geometria da barreira.
α	Condições de contorno.
δ	Delta de Dirac.
ψ	Função de onda espalhada.
H	Hamiltoniano.
E	Energia.
k	Número de onda.
λ	Comprimento de onda.
V	Potencial espalhador.
G_0	Função de Green da partícula livre.
φ	Onda incidente.
t	Tangente a superfície Γ .
n	Normal a superfície Γ .
\mathcal{T}	Coefficiente de transmissão.
\mathcal{R}	Coefficiente de reflexão.
T	Matriz de espalhamento.
N	Dimensão da matriz de espalhamento T .
J_n	Função de Bessel de ordem n .
N_n	Função de Neumann de ordem n .
Δ_j	Comprimento de um segmento da discretização da barreira.
$M_{i,j}$	Integral sobre os elementos da função de Green.
Ψ	Forma matricial da função de onda.
Φ	Forma matricial da onda incidente.
\mathbb{T}	Matriz de espalhamento T discretizada.
\mathbb{I}	Matriz identidade.
P	Perímetro do bilhar.
A	Área do bilhar.
l_p	Dimensão das paredes do bilhar.
μ	Razão entre as dimensões Δ_j e λ .
θ	Direção do vetor de onda \vec{k} .
(x, y)	Plano cartesiano.
$m \times n$	Números quânticos.

n_k	Número de segmentos de energia de comprimento d_k .
k_i	Número de onda inicial.
k_f	Número de onda final.
l_1, l_2, l_3	Dimensão das paredes do bilhar triangular.
a,b,c...	Vértices do bilhar retangular.
$ \overline{ab} , \overline{bc} , \dots$	Dimensão das paredes do bilhar retangular.
β	Ângulo $\tan^{-1}(l_2/l_1)$ e $\tan^{-1}(\overline{bc} / \overline{ab})$.
α	Ângulo $\tan^{-1}(l_1/l_2)$ e $\tan^{-1}(\overline{ab} / \overline{bc})$.
T_d	Coefficiente de transmissão na diagonal do bilhar.
T_p	Coefficiente de transmissão no contorno externo do bilhar.
n_d	Ajuste da dimensão da matriz de espalhamento na parede digonal.
A, B, C...	Identificação das famílias de autoestados.
a1, a2, b1, b2...	Identificação dos autoestados das famílias A, B...
I, II,...	Regiões de ampliação no espaço de fase $k \times \beta$.
$N(E)$	Número médio de estados quânticos.
K	Natureza topológica do bilhar.

Capítulo 5¹ e Apêndice B

\mathcal{L}	Operador de Helmholtz.
Ω	Região limitada de \mathcal{R}^{N-1} .
ξ e η	Coordenadas espaciais.
d	Grau de separabilidade de ξ e η .
$\hat{\mathcal{O}}$	Equação diferencial linear de segunda ordem.
n	Automodos.
\mathcal{F}	Função auxiliar que carrega a dependência ξ em (5.9).
u_n e v_n	Soluções da equação associada a (5.10).
k_n	Número de onda na direção x .
G	Função de Green.
l e j	Números quânticos.
(x, y)	Plano cartesiano.
L_x e l_x	Dimensão da base da guia de onda.
L_y	Dimensão da altura da guia de onda.
φ e ϕ	Onda incidente.
\mathcal{C}	Parede discretizada.
θ	Ângulo que define a forma do bilhar.
t	Parametrização da parede \mathcal{C} .
N_E	Número de estados evanescentes.
N_ϕ	Soma para k_n real.

¹No capítulo 5 é feita uma breve revisão do MCP usando os mesmos símbolos descritos no capítulo 2.

Apêndice A

s	Valor médio entre níveis de energia vizinhos.
$P^{(P)}$	Densidade de probabilidade de Poisson.
$P^{(GOE)}$	Densidade de probabilidade de Wigner.
$P^{(B)}$	Densidade de probabilidade de Brody.
λ	Parâmetro de Brody.
$P^{(BR)}$	Densidade de probabilidade de Berry-Robnik.
ρ_1 e ρ_2	Parâmetros de Berry-Robnik.

Sumário

1	Introdução	23
2	Desenvolvimento teórico do MCP	33
2.1	Escolha do potencial espalhador	34
2.2	Desenvolvimento analítico	35
2.3	Aspecto analítico em bilhares	43
2.4	Solução interna e mecanismo de filtro	45
2.5	Tratamento numérico	46
2.5.1	Mecanismo de filtro do MCP para o bilhar triangular ($44^\circ, 46^\circ, 90^\circ$)	50
2.5.2	Analítico vs MCP: Bilhar quadrado e triangular reto	51
3	Bilhar triangular reto	56
3.1	Análise de famílias para $\beta \in [44^\circ, 46^\circ]$	57
3.1.1	Soluções $\psi(x, y)$ para $k \in [1, 20]$	58
3.1.2	Soluções $\psi(x, y)$ para $k \in [100, 102]$	61
3.1.3	Órbitas periódicas em estados cicatrizados	74
3.1.4	Estatística dos níveis de energia	77
3.2	Análise de famílias para $\beta \in [29^\circ, 31^\circ]$	82
3.2.1	Soluções $\psi(x, y)$ para $k \in [1, 20]$	82
3.2.2	Soluções $\psi(x, y)$ para $k \in [100, 102]$	85
3.2.3	Órbitas periódicas em estados cicatrizados	93
3.2.4	Estatística dos níveis de energia	95

3.3	Conclusões parciais	98
4	Bilhar retangular com diagonal permeável	101
4.1	Análise de famílias para $\beta = 30^\circ$	105
4.1.1	Espectro de famílias $k \times T_d$	106
4.1.2	Função de onda $\psi(x, y)$	107
4.1.3	Estatística dos níveis de energia	117
4.2	Análise de famílias para $\beta = 22,5^\circ$	118
4.2.1	Espectro de famílias $k \times T_d$	120
4.2.2	Função de onda $\psi(x, y)$	121
4.2.3	Estatística dos níveis de energia	128
4.3	Conclusões parciais	132
5	Explorando as distintas funções de Green para o Método do Contorno de Paredes: Guias de onda e bilhar permeável	135
5.1	Uma breve revisão do MCP: A escolha da função de Green	137
5.1.1	A escolha do domínio espacial V	139
5.2	A função de Green para guias de ondas semi-infinitas	141
5.2.1	A guia de onda retangular semi-infinita	143
5.3	Aplicações para o domínio V como guia de ondas semi-infinito retangular . . .	144
5.3.1	O bilhar retangular ($\theta = \pi/2$)	145
5.3.2	Resultados numéricos para \mathcal{C} 's distintos	151
5.4	Conclusões parciais	157
6	Conclusão	159
A	Bilhares quânticos de dinâmica regular e não-regular	162
B	A função de Green para a caixa retangular	164
	Referências	166

Capítulo 1

Introdução

Bilhares e objetivos

O crescimento exponencial que a pesquisa e o desenvolvimento de novas técnicas em manufatura quântica tem experimentado nas últimas décadas alavancou o uso intenso de meso e nanoestruturas em aplicações tecnológicas. Isso é evidenciado pela fabricação cada vez mais comum de versões miniaturizadas de dispositivos encontrados em nosso dia-a-dia [2, 4]. Como exemplo, podemos citar o estudo acerca de nanocircuitos cuja funcionalidade atua como controladores digitais para o movimento de uma perna de robô autônomo em escala milimétrica, e um nanocircuito analógico para a amplificação de sinais em um minúsculo sensor ou receptor optoeletrônico [5]. Dispositivos optoeletrônicos contribuíram enormemente para o progresso tecnológico nos últimos 50-60 anos [6]. Hoje, eles também desempenham um papel fundamental na nanofotônica, que é estimulada pelas limitações inerentes aos circuitos eletrônicos e pela demanda por comunicação mais rápida. Em particular, o campo da fotônica de nanofios surgiu incluindo a busca por fontes de luz com ajustes em nanoescala [6]. Em nanolasers, por exemplo, uma nova concepção foi proposta em que a intensidade do laser pode ser ajustada mediante controle da geometria dos *nanoclusters* (pontos quânticos de silício) para obter diferentes comprimentos de onda do laser. Tal concepção oferece aplicações promissoras em dispositivos optoeletrônicos avançados [7].

Seguindo essa linha nanotecnológica, há também aplicações em nanomáquinas (fabricação de sistemas micro e nanoeletromecânicos) [8, 9], em nanoprocessadores utilizados em com-

putadores quânticos [10–12], ou mesmo na construção de pequenos objetos naturais como nanocavidades fotônicas operando dentro de células biológicas individuais [13], cujo método é atribuído a uma cavidade de cristal fotônico com uma nanosonda celular avançada, ativada naturalmente, e configurada para fornecer numerosas ações para detecção e controle intracelular como, por exemplo, a detecção em tempo real de proteínas, DNA, mRNA ou miRNA, detecção fotoacústica no nível de uma única célula, aprisionamento óptico de campo próximo de biomoléculas e nanolasers completamente imersos por células individuais.

A engenharia de tais estruturas elaboradas é geralmente baseada na montagem ou modificação de algumas estruturas mais simples, onde fios em escala nanométrica, guias de ondas, cavidades e ressonadores, implementados por pontos quânticos [14–23] ou nanocavidades [24–27], desempenham um papel central como blocos de construção primários em estruturas mais complexas. Porém, por mais que o comportamento destes sistemas sejam bem compreendidos, com sua descrição teórica seguindo no mesmo ritmo as novas implementações experimentais, variações causadas em suas estruturas, às vezes até muito ínfimas, podem envolver grandes modificações em suas soluções [4]. Tais soluções representam os estados quânticos gerados por estas estruturas. Dessa forma, na construção de diferentes contornos e na modificação estrutural destes, os estados ali presentes passam por alterações na sua morfologia.

Nosso objetivo no presente trabalho será analisar estruturas baseadas em contornos simples que seriam modelos para essas aplicações e entender os estados eletrônicos ali gerados. A partir de análises teóricas mediante soluções por técnicas de espalhamento, vamos modelar sistemas a partir de casos mais simples que podem ser usados em casos mais complexos, em um esquema ascendente de construção (*bottom-up*).

Neste cenário, daremos ênfase ao estudo de estruturas cujo sistema pode ser construído e modificado baseando-se na modelagem de contornos abertos ou fechados, denominado *bilhares* [2, 28]. Bilhares são modelos matemáticos onde uma ou mais partículas se movem em uma região delimitada, colidindo com sua fronteira e/ou com outras partículas [29]. Considere, por exemplo, o caso de apenas uma partícula pontual em movimento uniforme no interior de um contorno $\Gamma \in \mathcal{R}^2$, cuja fronteira $\partial\Gamma$ é a união de um número finito de curvas regulares onde a partícula colide elasticamente, isto é, os ângulos de incidência e reflexão de sua trajetória são

iguais na fronteira. Quando se descreve o comportamento dinâmico dessa partícula, dá-se o nome de *Problema do bilhar* para o contorno Γ . Ao sistema dinâmico, gerado por esta situação, dá-se o nome de *Bilhar* [30]. A determinação da dinâmica do bilhar associa-se a forma da sua fronteira (ou geometria) [31, 32], que também define suas simetrias e, a partir destas, as constantes de movimento [33, 34].

A dinâmica associada a um bilhar pode ser considerada (i) regular (ou integrável) ou (ii) caótica (não-integrável). Um exemplo do caso (i) são bilhares compostos por um único grupo de simetria como, por exemplo, geometrias na forma de um quadrado, retângulo ou círculo [35, 36]. Para bilhares cuja dinâmica é descrita como uma distribuição caótica dos níveis de energia, podemos citar para o caso (ii) os bilhares Sinai e estádio de Bonimovich [35–39]. No entanto, nem todos os sistemas possuem dinâmica totalmente regular ou totalmente caótica. Estudos indicam que alguns sistemas bidimensionais caóticos passam por uma transição do estado regular para o caótico [40, 41]. Seu espaço de fase é misturado no sentido de que algumas órbitas giram regularmente em torno de toros bidimensionais enquanto outras exploram a superfície de energia tridimensional ergodicamente. Por exemplo, enquanto a distribuição de níveis no espalhamento de nêutrons e prótons por núcleos atômicos seguem uma dinâmica caótica [42, 43], testes estatísticos indicam caráter transicional entre os regimes regular e caótico como, por exemplo, na determinação da dinâmica para baixas energias associada a núcleos variando de ^{24}Na para o ^{244}Am , onde os resultados indicam regularidade em estados semelhantes a rotação em núcleos pares e pares, e algumas evidências de que estados de paridade natural ímpar não são completamente caóticos [44]. Outros exemplos podem ser citados como a análise das propriedades de flutuação das ressonâncias nucleares sob baixas energias [45], átomos de hidrogênio submetidos a campos magnéticos fortes [46], modelos de movimento nuclear em moléculas simples [47], entre outros.

No análogo clássico podemos entender a diferença entre um bilhar com dinâmica regular e caótica analisando, por exemplo, as condições iniciais de uma determinada partícula confinada. Em bilhares com dinâmica regular, mesmo que se provoque pequenas alterações na posição inicial da partícula, esta não sofrerá grandes desvios em sua posterior trajetória. Já para um bilhar com dinâmica irregular ou caótica, pequenas alterações nas condições iniciais da partícula podem provocar grandes variações em sua trajetória com o passar do tempo [29].

A dinâmica caótica no bilhar é caracterizada por um expoente de Lyapunov positivo, o qual mede como as trajetórias inicialmente próximas se separam exponencialmente rápido. Para um bilhar bidimensional, por exemplo, os expoentes de Lyapunov são quatro números que variam de 1 a 4, que medem o quão “caótico” o bilhar é, em termos de taxas exponenciais médias de expansão (e contração) do espaço de fase ao longo de certas direções características [48].

No problema do bilhar quântico, a busca de informações acerca do estado de uma partícula confinada em um certo bilhar com dinâmica regular e/ou irregular se faz necessário através das leis da mecânica quântica. Na teoria quântica, o estado de uma partícula em um determinado sistema é especificado por uma função de onda, cujo módulo ao quadrado desta função é interpretado como uma densidade de probabilidade [49, 50], ou seja, a distribuição espacial de uma partícula quântica é obtida por uma dada probabilidade de ser encontrada em uma determinada região do espaço.

Para a solução de problemas de bilhares, procuramos as soluções estacionárias e independentes do tempo da equação de Schrödinger, que é equivalente ao estudo do problema de determinação dos autovalores e dos autovetores da equação de Helmholtz no interior do domínio do bilhar e com certas condições de contorno [51–53]. No entanto, a determinação das soluções de um certo sistema quântico nem sempre é possível por vias analíticas, em especial para sistemas em que a geometria apresenta dinâmica caótica dos níveis de energia [54]. Na realidade, apenas uma pequena gama de estruturas admitem soluções analíticas como, por exemplo, o bilhar retangular [55], o triangular equilátero [38, 56, 57], o bilhar triangular reto ($45^\circ, 45^\circ, 90^\circ$) e ($30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$) [52, 56, 57], entre outros. Logo, para estes últimos, a função de onda associada aos autoestados pode ser medida conhecendo-se os valores das energias de ressonância através de equações exatas de autovalores. Por outro lado, a maioria dos sistemas quânticos necessitam de modelagens matemáticas mais complexas mediante métodos numéricos, para então determinar a função de onda mais apropriada para um dado autovalor de energia. Alguns destes métodos para o cálculo de problemas de fronteira já foram implementados na literatura, podemos citar o mais importantes: *boundary integral method (BIM)* [58]; *expansion method* [59]; teoria de perturbação [60]; *boundary element method (BEM)* [61]; *scaling method* [62].

Para o presente trabalho, iremos adotar como ferramenta para o cálculo numérico o Mé-

todo do Contorno de Paredes (MCP) [63]. Proposto na década de 90, o MCP é particularmente distinto na forma como trata as condições de contorno, que podem ser Dirichlet, Neumann, mistos ou Robin, como também para contornos permeáveis [64]. No MCP, as fronteiras espaciais conectadas ou desconectadas, abertas ou fechadas do sistema são vistas como limites de paredes nítidas (por exemplo, as paredes representadas nas figuras 1.1a, 1.1b, 1.1c e 1.1d). Com base no MCP podemos identificar, por exemplo, conjunto de autoestados decorrentes de mudanças contínuas à parâmetros geométricos associados ao sistema [63, 65].

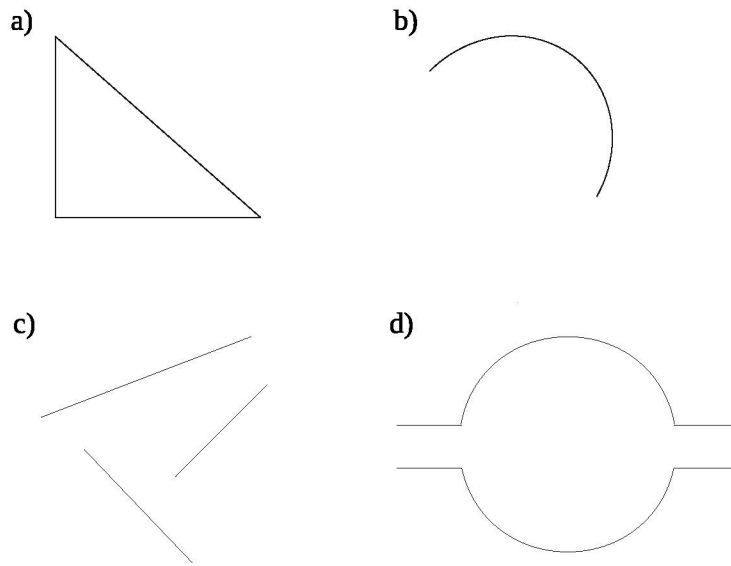


Figura 1.1: Exemplos de possíveis formatos da barreira espalhadora: a) bilhar triangular (curva fechada); b) curva aberta; c) curva desconexa; d) ressonador aberto.

Para obtermos os autoestados relativos a um bilhar qualquer, necessitamos da matriz T , a qual “constrói” o estado espalhado após interagir com a fronteira. T é um operador escalar que é função da energia E considerada (ou equivalente número de onda, k^2) e da geometria do bilhar. Um fato importante é que os valores exatos de energia para o cálculo da função de onda podem ser identificados diretamente a partir de T . Em outras palavras, podemos investigar relações entre o parâmetro geométrico relevante a alguma estrutura ou sistema e o espaço de energia sem a necessidade de calcular explicitamente a função de onda [65, 66]. Um método numérico simples e eficiente para obter T e as funções de onda será descrito na Seq. 2.5.

Alguns trabalhos já foram realizados tendo como ferramenta a utilização do MCP. No

estudo levantado na referência [1], foi proposto a incorporação de um filme de máscara de metal (alumínio) no layout de um sistema que fosse capaz de aperfeiçoar o aprisionamento de luz em dispositivos fotovoltaicos orgânicos. O dispositivo fabricado consiste numa geometria do tipo sanduíche, onde a máscara é adicionada entre o eletrodo transparente e a camada ativa. Um aspecto eficaz na captura da luz dentro do dispositivo para melhorar a captação de luz é escolher adequadamente os valores de d e assim obter um máximo de luz possível na camada de polímero ativo e, uma vez lá, minimizar a fuga de fótons da região. Para essa escolha, foi abordado o problema de espalhamento bidimensional do MCP associado a uma onda plana que se propaga ao longo da direção $+z$ incidente na estrutura dos orifícios (Fig. 1.2a), e, em seguida, formando um padrão de estado estável dentro da cavidade. A Fig. 1.2c mostra a densidade das distribuições $|\Psi(x, z)|^2$ de campos simulados na região (em torno de um orifício de máscara) indicados na Fig. 1.2b, para uma onda plana incidente com $\lambda = d = 500$ nm.

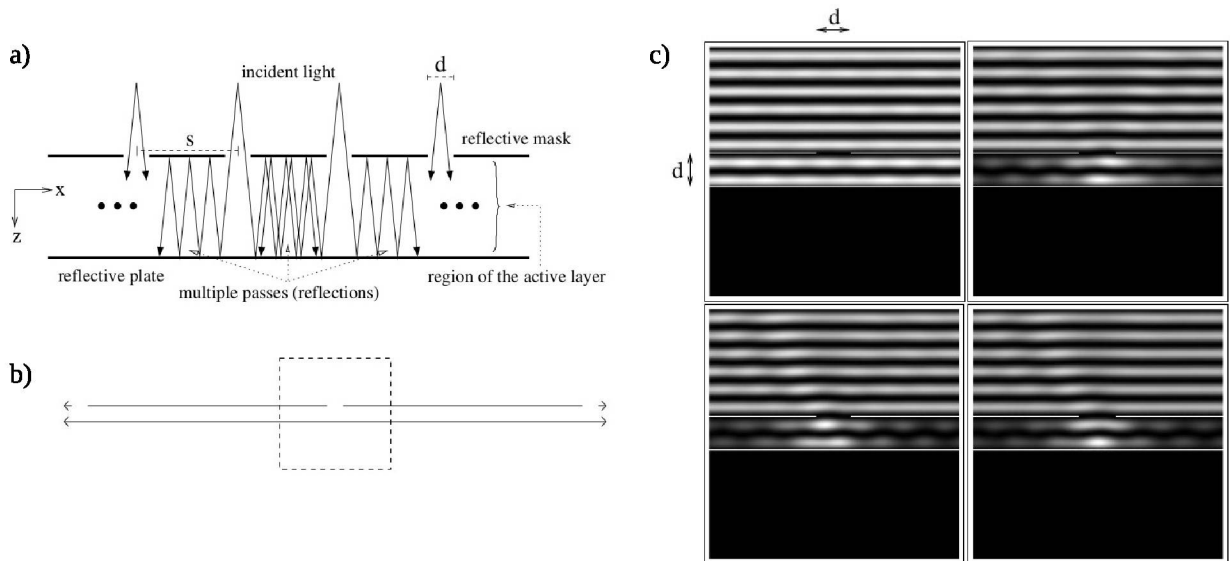


Figura 1.2: a) Representação esquemática do comportamento da luz na seção do plano $x - z$ do dispositivo. b) Estrutura geométrica do orifício de largura d . c) Densidade das distribuições de campo simuladas $|\Psi(x, z)|^2$. Fonte: [1].

No trabalho desenvolvido na referência [2], é mostrado a versatilidade do MCP para estudar as propriedades de transmissão de dispositivos modelo. É considerado um bilhar aberto na forma de um acoplador direcional que consiste em dois canais de entrada, uma região de

interação e dois canais de saída, como mostrado na Fig. 1.3a. Essa estrutura possui os elementos básicos de vários dispositivos práticos, como interruptores e portas lógicas. A partir da dependência de aspectos geométricos da estrutura, foi analisado o desempenho da chave de energia mediante a captura das principais características do espectro de transmissão mediante os elementos da matriz T de espalhamento. As figuras 1.3b-e mostram alguns gráficos

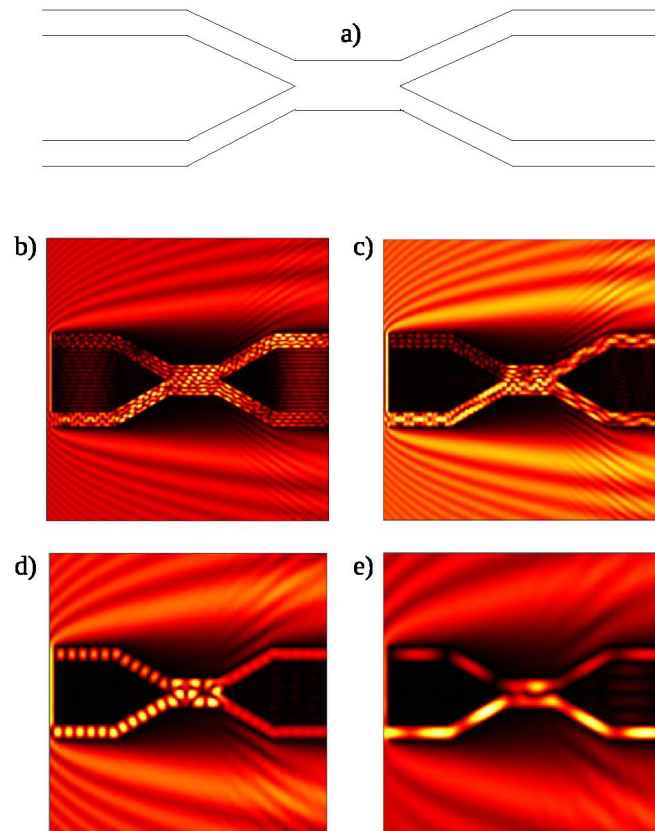


Figura 1.3: a) Representação esquemática do acoplador direcional estudado, composto por dois canais de entrada, uma região de acoplamento e dois canais de saída. b-e) densidade da função de onda $|\Psi|^2$. Fonte: [2].

de densidade da função de onda $|\Psi|^2$ da estrutura do acoplador. Os resultados indicam que o MCP identifica claramente as ressonâncias de transmissão e produz uma medida precisa da divisão dos modos ressonantes pelos canais de saída, de tal forma que os primeiros modos de transmissão de baixa energia podem ser comutados para canais de saída distintos, com o desempenho de comutação dependendo de parâmetros geométricos do dispositivo. Tal controle destes parâmetros é fundamental para atingir diversas funções de manipulação de energia

como, por exemplo, operações de circuitos lógicos. Dentre as aplicações citadas acima, o MCP tem sido empregado também em muitas abordagens distintas, como para a investigação de ondas de matéria [67–69], processos ópticos [66, 70, 71] e na descrição de propriedades nanoestruturadas [2, 65, 72].

Nosso objetivo aqui é dar continuidade aos avanços no estudo de problemas de fronteira no âmbito teórico, modelando sistemas cujo princípio se aplica a bilhares quânticos de geometrias poligonais simples. Analisando o comportamento quântico das energias de ressonância, bem como as funções de onda associadas a estas energias, faremos uma ampla varredura no aspecto que leva em conta as variações geométricas e de permeabilidade destes polígonos, somado a influência destas variações diante da morfologia dos autoestados.

No capítulo 2, vamos apresentar o desenvolvimento teórico e numérico do MCP. A seguir, iremos aplicar o método numérico para confrontar com os resultados analíticos já existentes na literatura. Com isso, pretendemos dar uma visão de confiabilidade em relação a aplicabilidade do método.

No capítulo 3, iremos dar início as discussões a respeito das soluções do bilhar triangular reto como mostrado na Fig. 1.4. Este bilhar, por possuir uma pequena gama de geometrias que oferecem soluções analíticas, necessita de uma abordagem numérica que admite soluções por técnicas de espalhamento. Utilizando o MCP, mostraremos a dependência da matriz T com o ângulo β e a energia E do sistema. Em posse destas informações, buscamos a dinâmica dos autoestados decorrente da variação dos parâmetros geométricos do bilhar, bem como a morfologia da função de onda, estados degenerados, repulsão de níveis e etc.

Sabemos que o triângulo reto possui duas configurações angulares que o classifica como um polígono regular, que são os casos $(45^\circ, 45^\circ, 90^\circ)$ e $(30^\circ, 60^\circ, 90^\circ)$ [56]. Através da variação dos ângulos internos mediante β , vamos obter informações do comportamento das soluções quânticas na região de transição entre um bilhar regular e irregular. O estudo é feito tanto pelas ferramentas mais tradicionais, como a estatística de níveis, como também observando as características espaciais das autofunções a partir da sua morfologia. A determinação das autoenergias é feita utilizando a matriz T , uma vez que esta carrega informações das energias, assim como das geometrias, que são variáveis neste problema.

No capítulo 4, as mesmas técnicas de espalhamento descritas acima serão utilizadas para

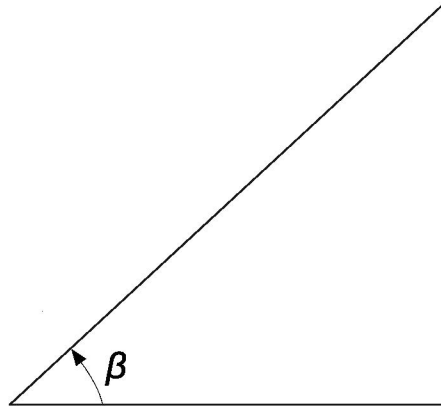


Figura 1.4: Geometria geral do triângulo reto com dimensões definidas pelo ângulo β

descrever as soluções quânticas do bilhar retangular composto por um segmento de reta conectando dois vértices, como descrito na Fig. 1.5. Vamos obter as propriedades da matriz T em

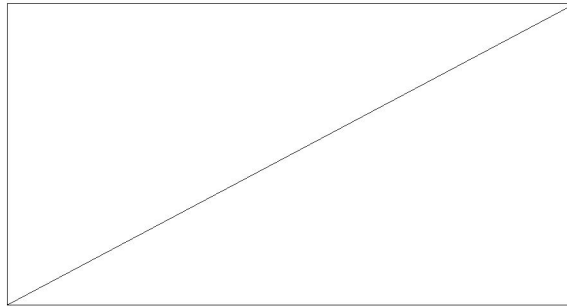


Figura 1.5: Geometria retangular com um segmento de reta caracterizando a diagonal do sistema.

função do espaço de parâmetros de energia e permeabilidade quando mantemos as paredes do contorno externo com permeabilidade próxima de zero, enquanto a diagonal apresenta-se sob permeabilidade variável. A partir da construção da matriz de espalhamento, calculamos os autoestados associados para identificar a morfologia associada a função de onda. A diagonal irá definir, junto com a atribuição do comprimento da base, as dimensões do retângulo. Para o nosso estudo de caso vamos considerar duas geometrias, a primeira descreve o retângulo com diagonal que define dois triângulos ($30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$) conectados pela mesma hipotenusa, e a segunda, teremos dois triângulos na mesma disposição mas descritos pela configuração angular ($22,5^\circ, 67,5^\circ, 90^\circ$).

Os dois trabalhos listados acima exibem em síntese o mesmo objetivo, que é fornecer elementos que nos levem a identificar como a função de onda se comporta diante de pequenas perturbações no sistema, sejam elas através de modificações nos parâmetros geométricos do bilhar triangular ou por variações nos parâmetros de permeabilidade na diagonal do bilhar retangular. Também em ambos os casos, as soluções são avaliadas em regiões que compreendem bilhares com dinâmica regular e irregular. No bilhar triangular, a função de onda será obtida para geometrias com $\beta \in [44^\circ, 46^\circ]$ e $\beta \in [29^\circ, 31^\circ]$. Para o retângulo, a diagonal será constituída de uma barreira de potencial contida dentro de limites de permeabilidade de tal forma que, para uma parede totalmente impermeável, as soluções descrevem a dinâmica regular e irregular associada ao bilhar triangular $(30^\circ, 60^\circ, 90^\circ)$ e $(22, 5^\circ, 67, 5^\circ, 90^\circ)$ [73], respectivamente, enquanto no limite superior, para uma parede totalmente permeável, as soluções descrevem a dinâmica regular do retângulo. Além disso, devido a relativa escassez de dados na literatura que mostram a função de onda de sistemas caóticos, esperamos encontrar em tais sistemas aspectos que concedam um bom grau de originalidade em nossos resultados, possibilitando assim a produção de artigos científicos.

Ao final dos capítulos 3 e 4, faremos uma abordagem quantitativa para determinar a dinâmica associada ao bilhar triangular sob diferentes geometrias, assim como para o bilhar retangular com diferentes valores de permeabilidade. As distribuições que serão usadas para esta finalidade encontram-se listadas no Apêndice A.

Por fim, vamos dedicar o capítulo 5 para considerar alguns obstáculos que surgem na aplicabilidade do MCP. Abordamos uma maneira alternativa de explorar funções de Green distintas mediante escolhas de potenciais de barreira. Com isso, aumentamos a versatilidade do MCP ampliando a busca por soluções analíticas, como também diminuindo a exigência computacional ao simular sistemas sob altas energias como, por exemplo, sistemas formados por guias de ondas. Dessa forma, com a escolha de um potencial apropriado, vamos determinar protocolos que facilitem a obtenção de funções de Green, e a partir destas, simplificar analítica e numericamente a implementação do MCP.

Capítulo 2

Desenvolvimento teórico do MCP

Métodos de espalhamento para a solução da equação de Schrödinger aplicados em geometrias abertas ou fechadas são obtidos de muitas formas. Tanto curvas abertas como fechadas podem ser vistas como barreiras de energia potencial. Em curvas abertas, a partícula enxerga a barreira e nela é espalhada e, em algumas situações, também pode ser aprisionada (Fig. 2.1). Em curvas fechadas, a partícula além de ser aprisionada na parte interna, também pode ser espalhada na parte externa. Bilhares considerados como contornos fechados podem apresentar duas soluções distintas, isto é, solução interna e solução externa. Nos métodos de espalhamento mais tradicionais, as soluções são encontradas separadamente, para cada região em particular. Então, para obter uma solução completa, se faz necessário obter soluções para as regiões interna e externa do bilhar.

O MCP traz uma maneira alternativa de se obter soluções de espalhamento para paredes arbitrárias, oferecendo a possibilidade de encontrar a solução da função de onda, a partir de cada número de onda k , para qualquer ponto no domínio espacial do bilhar, ou seja, não havendo necessidade de uma equação integral “interna” e uma equação integral “externa”. Neste capítulo iremos discutir a teoria desenvolvida e os métodos numéricos para descrever o MCP. Tanto o desenvolvimento teórico quanto o numérico são baseados nas referências [74] e [75].

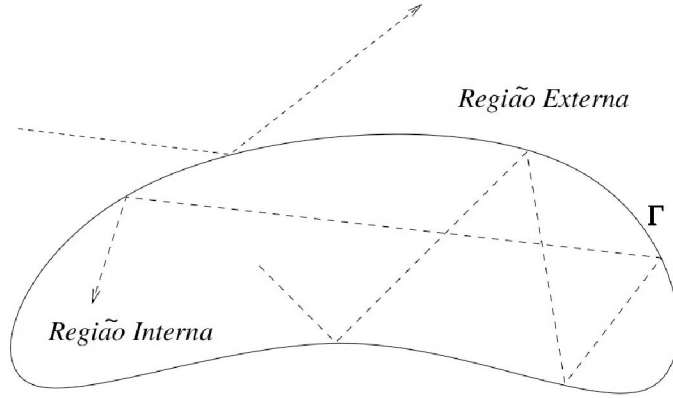


Figura 2.1: Bilhar com regiões interna e externa de contorno Γ . As linhas tracejadas indicam a dinâmica de uma partícula sob o efeito de espalhamento.

2.1 Escolha do potencial espalhador

É necessário ter um método que forneça (i) as soluções corretas em cada região da fronteira do sistema e que também (ii) disponha de soluções bem determinadas quando um determinado comportamento assintótico for imposto a partir dos limites da fronteira. As propriedades (i) e (ii) são intrínsecas à teoria de espalhamento sendo que, na teoria de espalhamento independente do tempo ($t \rightarrow \infty$), o comportamento assintótico ($r \rightarrow \infty$) está incorporado na função de Green livre, enquanto a dispersão ocorre fora de um potencial.

Para resolver um problema de fronteira por teoria de espalhamento, é necessário obter um potencial espalhador que reproduza as condições de fronteiras devidas ao sistema em estudo. No método de espalhamento por paredes, a função de onda da partícula interage com o potencial somente sobre os pontos que pertencem ao contorno Γ da barreira espalhadora. Para o restante do espaço, a função de onda descreve o movimento de uma partícula livre.

Então, vamos considerar um potencial do tipo “ δ -parede”

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

onde a integral é calculada sobre a superfície Γ . O ponto s é um ponto localizado sobre a barreira. Os coeficientes $\gamma(s)$ e $\alpha(s)$ são termos independentes. O primeiro descreve a permeabilidade e o segundo a condição de contorno de Γ .

Tomando o limite $\gamma(s) \rightarrow \infty$ em (2.1) sobre a função de onda $\psi(\vec{r})$ em um ponto s de Γ

temos

$$\alpha(s)\psi(\vec{r}(s))|_{\Gamma} + (1 - \alpha(s))\partial_{\vec{n}(s)}\psi(\vec{r}(s))|_{\Gamma} = 0. \quad (2.2)$$

A igualdade acima descreve um efeito de parede rígida ou impenetrável. Para valores de $\gamma(s)$ finitos, o espalhador terá efeito de parede permeável. Tomando $\alpha(s) = 1$ em (2.2) temos

$$\psi(\vec{r}(s))|_{\Gamma} = 0, \quad (2.3)$$

que é a condição de contorno de Dirichlet. Dada a integral sobre δ e a ação de V somente em Γ , tal potencial pode ser utilizado para representar o problema de fronteira em um cálculo de espalhamento por uma geometria qualquer descrita por Γ , com suas condições de contorno determinadas por α e γ .

2.2 Desenvolvimento analítico

Partimos do pressuposto de que nosso Hamiltoniano possa ser escrito como

$$H(\vec{r}) = H_0(\vec{r}) + V(\vec{r}), \quad (2.4)$$

onde $H_0 = (-\hbar^2/2m)\nabla^2$ é o hamiltoniano que representa o operador de energia cinética da partícula livre. Considere a equação de Schrödinger para um sistema d -dimensional independente do tempo,

$$H(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) \quad (2.5)$$

Substituindo (2.4) em (2.5) fazendo $E = (\hbar^2/2m)k^2$, $V(\vec{r}) = (\hbar^2/2m)U(\vec{r})$ e reescrevendo para $U(\vec{r})$, obtemos

$$(\nabla^2 + k^2)\psi(\vec{r}) = U(\vec{r})\psi(\vec{r}). \quad (2.6)$$

A equação (2.6) representa a equação diferencial de espalhamento para um potencial arbitrário $U(\vec{r})$. Vamos resolvê-la transformando a equação diferencial em uma equação integral. Este método é conhecido como método da função de Green. Admitimos então que

para (2.6) existe uma função $G_0(\vec{r})$ tal que

$$(\nabla^2 + k^2)G_0(\vec{r}; k) = \delta(\vec{r}). \quad (2.7)$$

Qualquer função $\psi(\vec{r})$, de uma onda plana incidente $\varphi(\vec{r})$, que satisfaça

$$\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) + \int d\vec{r}' G_0(\vec{r}, \vec{r}'; k) U(\vec{r}') \psi(\vec{r}'), \quad (2.8)$$

com $(\nabla^2 + k^2)\varphi(\vec{r}) = 0$ e G_0 sendo a função de Green da partícula livre, obedece a (2.6). A equação (2.8) é chamada de equação de Lippmann-Schwinger [50] e representa a forma geral da função de onda. A partir desta, mediante a escolha de um determinado potencial U , que se constroem diferentes métodos para a determinação das soluções dos problemas de fronteira.

Vamos introduzir agora o potencial da equação (2.1) com $\alpha(s) = 1$. Com esta atribuição, garantimos que a partícula esteja sujeita à condição de fronteira de Dirichlet,

$$V(\vec{r}) = \int_{\Gamma} ds \gamma(s) \delta(\vec{r} - \vec{r}(s)), \quad (2.9)$$

onde a integral é calculada sobre Γ , com esta sendo uma superfície conexa ou desconexa. $\vec{r}(s)$ é o vetor posição do ponto s sobre Γ (Fig. 2.2) e $\gamma(s)$ é a intensidade com que o potencial atua sobre a partícula em cada ponto s da barreira. Claramente, o potencial $V(\vec{r})$ se anula para qualquer \vec{r} que não pertence a Γ , $\vec{r} \neq \vec{r}(s)$.

Inserindo a equação (2.9) em (2.8) e fazendo $\hbar^2/2m = 1$ vamos ter

$$\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) + \int d\vec{r}' G_0(\vec{r}, \vec{r}'; k) \left[\int_{\Gamma} ds \gamma(s) \delta(\vec{r}' - \vec{r}(s)) \right] \psi(\vec{r}'). \quad (2.10)$$

Usando a propriedade de filtragem da Delta de Dirac na integral de volume sobre \vec{r}' temos

$$\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) + \int ds' \gamma(s') G_0(\vec{r}, \vec{r}(s'); k) \psi(\vec{r}(s')). \quad (2.11)$$

Para esclarecer o significado físico de γ na equação (2.9), consideramos o caso bidimensional com Γ sendo uma parede arbitrária como mostra a Fig. 2.2. Também, para simplificar,

decompomos a onda incidente escrevendo-a da seguinte forma

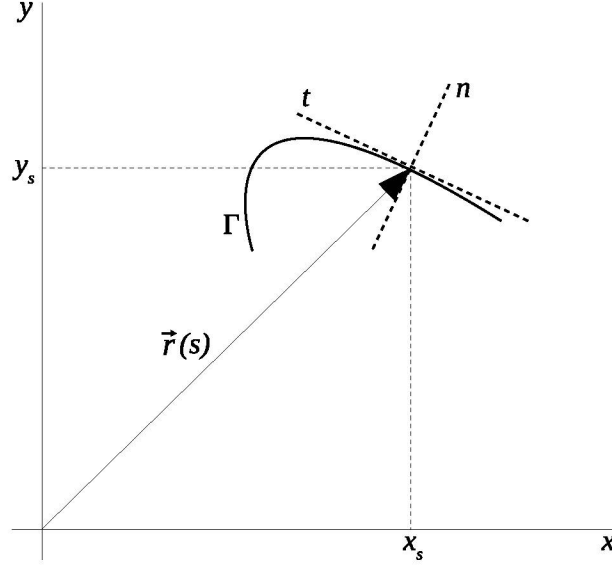


Figura 2.2: Sistema de coordenadas $t - n$ “localmente separável” no ponto s em Γ .

$$\varphi(\vec{r}) = \int d^2k c(\vec{k}) \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}), \quad (2.12)$$

onde $\varphi(\vec{r}) = (2\pi)^{-1} \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$.

Para um ponto particular s em Γ , definimos um sistema de coordenadas $t - n$ onde os eixos t e n são a tangente e a normal à Γ , respectivamente. Para $s = (x_s, y_s)$, $\varphi(\vec{r}) = (2\pi)^{-1} \exp[i(k_x x_s + k_y y_s)] = (2\pi)^{-1} \exp[i(k_t t_s + k_n n_s)]$, com k_t e k_n sendo as componentes de \vec{k} no sistema $t - n$. Podemos considerar o nosso potencial em s como separável, sendo δ uma função unidimensional $\gamma_s \delta(n - n_s)$ ao longo de n , e zero ao longo de t . Portanto, o termo $\exp[ik_t t_s]$ da onda plana incidente $\varphi_{\vec{k}}$ não interage com o potencial. No entanto, o termo $\exp[ik_n n_s]$ interage com o potencial δ dividindo-se em dois ao longo da direção n .

No ponto s , uma parte é transmitida através de Γ com transmissão $\mathcal{T} = 4k^2/(4k^2 + \gamma(s)^2)$ e a outra é refletida com reflexão $\mathcal{R} = \gamma(s)^2/(4k^2 + \gamma(s)^2)$. A obtenção detalhada dos coeficientes \mathcal{T} e \mathcal{R} pode ser encontrada na seção IIIB da referência [63]. $|\mathcal{T}(k, \gamma(s))|^2$ nos fornece a probabilidade da onda plana (de número de onda k), perpendicular a Γ em s , ser transmitida através de s . No limite $\gamma \rightarrow \infty$, a probabilidade de transmissão nos mostra que

$|\mathcal{T}(k, \infty)|^2 = 0$, e dessa forma $\psi(\vec{r})$ se anula sobre a barreira, satisfazendo então (2.9). Para o caso em que $\gamma \rightarrow 0$ temos $|\mathcal{T}(k, 0)|^2 = 1$, probabilidade máxima de transmissão.

A princípio, no capítulo 3 em que descrevemos as soluções do bilhar triangular, iremos admitir γ constante sobre a barreira. No capítulo 4 tomaremos a permeabilidade variável na diagonal do bilhar retangular. Mas para a dedução aqui realizada, vamos considerar somente $\gamma = \text{const}$. Essa escolha não afeta o entendimento do método, tendo em vista que o caso em que γ varia apresenta complicações adicionais que podem ser evitadas. Observando (2.11), podemos escrever $\varphi(\vec{r})$ como

$$\varphi(\vec{r}(s_b)) = \int_{\Gamma} ds_a T_{\gamma}^{-1}(s_b, s_a) \psi(\vec{r}(s_a)), \quad (2.13)$$

onde, por definição,

$$T_{\gamma}^{-1}(s_b, s_a) \equiv \delta(s_b - s_a) - \gamma G_0(\vec{r}(s_b), \vec{r}(s_a); k), \quad (2.14)$$

a qual satisfaz (2.11). A expressão (2.13) representa uma onda incidente φ que interage com um ponto s_b sobre a barreira de potencial V . Então, a matriz T “propaga” esta interação no ponto s_b até s_a , também da barreira, na qual uma função de onda ψ é espalhada, ou seja, os elementos da matriz T representam a probabilidade de uma partícula incidir em s_b e ser espalhada em s_a . Assim, (2.13) oferece a possibilidade de obtermos a onda espalhada ψ sobre a barreira em função de elementos conhecidos como as quantidades T e φ .

Substituindo (2.14) em (2.13) temos

$$\varphi(\vec{r}(s_b)) = \int_{\Gamma} ds_a \delta(s_b - s_a) \psi(\vec{r}(s_a)) - \int_{\Gamma} ds_a \gamma G_0(\vec{r}(s_b), \vec{r}(s_a); k) \psi(\vec{r}(s_a)). \quad (2.15)$$

Aplicando a propriedade de filtragem da função δ para o primeiro termo do lado direito da expressão acima, e reescrevendo para ψ , teremos

$$\psi(\vec{r}(s_b)) = \varphi(\vec{r}(s_b)) + \gamma \int_{\Gamma} ds_a G_0(\vec{r}(s_b), \vec{r}(s_a); k) \psi(\vec{r}(s_a)). \quad (2.16)$$

A expressão (2.16) calcula ψ em um ponto s_b sobre a barreira espalhadora Γ . Sendo $G_0(\vec{r}(s_b),$

$\vec{r}(s_a)) = G_0(\vec{r}(s_a), \vec{r}(s_b))$ válida para qualquer condição de contorno [76], então pela definição de $T_\gamma^{-1}(s_b, s_a)$ vemos que esta é simétrica na troca $s_b \leftrightarrow s_a$. Um detalhe interessante sobre a expressão (2.16) é que, como já mencionado, teremos uma transmissão máxima caso consideremos γ igual a zero, pois o segundo termo se anula e assim $\psi(\vec{r}(s_b)) = \varphi(\vec{r}(s_b))$.

Podemos escrever T_γ por meio das seguintes relações

$$\delta(s_b - s_a) = \int_\Gamma ds_c T_\gamma(s_b, s_c) T_\gamma^{-1}(s_c, s_a) = \int_\Gamma ds_c T_\gamma^{-1}(s_b, s_c) T_\gamma(s_c, s_a). \quad (2.17)$$

A troca de T_γ por T_γ^{-1} é possível devido a natureza simétrica de G_0 . A partir das relações acima podemos desenvolver uma expressão para $\psi(\vec{r})$ que seja função de $T_\gamma(s_b, s_a)$. Então, vamos aplicar $T_\gamma(s_c, s_b)$ nos dois lados da equação (2.13) e integrar em ds_b da seguinte forma

$$\int ds_b T_\gamma(s_c, s_b) \varphi(\vec{r}(s_b)) = \int ds_b \int ds_a T_\gamma(s_c, s_b) T_\gamma^{-1}(s_b, s_a) \psi(\vec{r}(s_a)). \quad (2.18)$$

Usando (2.17) na última equação temos (tomando cuidado com a troca dos índices a, b e c)

$$\int ds_b T_\gamma(s_c, s_b) \varphi(\vec{r}(s_b)) = \int ds_a \delta(s_c - s_a) \psi(\vec{r}(s_a)). \quad (2.19)$$

Resolvendo a integral do lado direito usando novamente a propriedade de filtragem, segue que

$$\psi(\vec{r}(s_c)) = \int ds_b T_\gamma(s_c, s_b) \varphi(\vec{r}(s_b)). \quad (2.20)$$

Substituindo a equação acima no integrando de (2.16), finalmente temos

$$\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) + \gamma \int_\Gamma \int_\Gamma ds_b ds_a G_0(\vec{r}, \vec{r}(s_b); k) T_\gamma(s_b, s_a) \varphi(\vec{r}(s_a)). \quad (2.21)$$

A equação (2.21) calcula, em um ponto qualquer do espaço \vec{r} , a função de onda $\psi(\vec{r})$ de uma partícula que interage com um bilhar de permeabilidade finita e constante γ e com a forma definida por Γ . Essa característica evidencia uma grande vantagem do MCP em relação a outros métodos de espalhamento, pois através deste método, obtemos as soluções dos autoestados na região interna e externa de um bilhar fechado com apenas um cálculo, enquanto em outros métodos, as soluções são obtidas separadamente para cada região que

se está analisando. A Fig. (2.3) mostra esquematicamente um dos passos do processo de espalhamento pelo MCP, com s_a e s_b fixos.

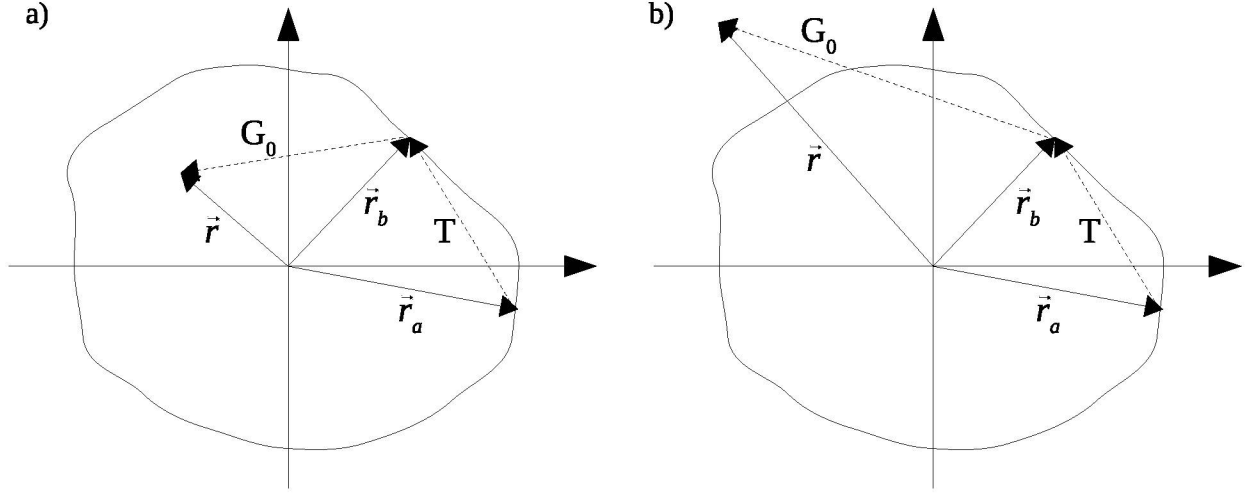


Figura 2.3: Processo de espalhamento na região a) interna e b) externa ao bilhar. A soma de todas as contribuições deste tipo levam à onda espalhada observada no ponto \vec{r} .

Ainda nos resta buscar uma solução completa de $\psi(\vec{r})$. Para isso, vamos encontrar uma forma prática de resolver T_γ . Usando a definição de $T_\gamma^{-1}(s_b, s_a)$ em (2.17), temos

$$\begin{aligned} \delta(s_b - s_a) &= \int_{\Gamma} ds_c T_\gamma(s_b, s_c) [\delta(s_c - s_a) - \gamma G_0(\vec{r}(s_c), \vec{r}(s_a); k)] \\ &= \int_{\Gamma} ds_c T_\gamma(s_b, s_c) \delta(s_c - s_a) - \int_{\Gamma} ds_c T_\gamma(s_b, s_c) \gamma G_0(\vec{r}(s_c), \vec{r}(s_a); k). \end{aligned} \quad (2.22)$$

Usando a propriedade de filtragem da função delta no primeiro termo da expressão acima e isolando $T_\gamma(s_b, s_a)$ temos

$$T_\gamma(s_b, s_a) = \delta(s_b - s_a) + \int_{\Gamma} ds_c T_\gamma(s_b, s_c) \gamma G_0(\vec{r}(s_c), \vec{r}(s_a); k). \quad (2.23)$$

Podemos resolver a expressão acima usando o método de *Séries de Neumann* [77]. Então $T_\gamma(s_b, s_a)$ é calculada em função de uma série de integrais de G_0

$$T_\gamma(s_b, s_a) = \delta(s_b - s_a) + \sum_{j=1}^{\infty} T_\gamma^{(j)}(s_b, s_a), \quad (2.24)$$

onde

$$T_\gamma^{(j)}(s_b, s_a) = \gamma^j \int ds_1 \dots ds_{j-1} G_0(\vec{r}(s_b), \vec{r}(s_{j-1}); k) G_0(\vec{r}(s_{j-1}), \vec{r}(s_{j-2}); k) \dots \\ \times \dots G_0(\vec{r}(s_2), \vec{r}(s_1); k) G_0(\vec{r}(s_1), \vec{r}(s_a); k). \quad (2.25)$$

A expressão (2.21) calcula a função de onda espalhada para uma parede arbitrária de permeabilidade finita γ . Todavia, podemos obter uma solução de ψ levando em consideração uma parede de permeabilidade infinita, $\gamma \rightarrow \infty$. Primeiramente, vamos analisar a relação desse limite na primeira igualdade de delta na equação (2.17) usando a definição de T_γ^{-1} de (2.14), então

$$\delta(s_b - s_a) = \int_\Gamma ds_c T_\gamma(s_b, s_c) [\delta(s_c - s_a) - \gamma G_0(\vec{r}(s_c), \vec{r}(s_a); k)]. \quad (2.26)$$

Calculando a integral da função Delta no primeiro termo

$$\delta(s_b - s_a) = T_\gamma(s_b, s_a) - \int_\Gamma ds_c \gamma T_\gamma(s_b, s_c) G_0(\vec{r}(s_c), \vec{r}(s_a); k) \\ = \frac{1}{-\gamma} [-\gamma T_\gamma(s_b, s_a)] + \int_\Gamma ds_c [-\gamma T_\gamma(s_b, s_c)] G_0(\vec{r}(s_c), \vec{r}(s_a); k), \quad (2.27)$$

e tomando o limite $\gamma \rightarrow \infty$, teremos

$$\delta(s_b - s_a) = \lim_{\gamma \rightarrow \infty} \left[\frac{1}{-\gamma} (-\gamma T_\gamma(s_b, s_a)) \right] + \int_\Gamma ds_c \lim_{\gamma \rightarrow \infty} [(-\gamma T_\gamma(s_b, s_c))] G_0(\vec{r}(s_c), \vec{r}(s_a); k). \quad (2.28)$$

Na equação acima, o primeiro termo que corresponde a $\gamma T_\gamma(s_b, s_a)$ ($s_b \neq s_a$) não pode divergir no limite $\gamma \rightarrow \infty$, pois ao multiplicarmos (2.20) por γ , isto é,

$$\gamma \psi(\vec{r}(s_b)) = \int_\Gamma ds_a [\gamma T_\gamma(s_b, s_c)] \varphi(\vec{r}(s_a); k), \quad (2.29)$$

o termo $\gamma T_\gamma(s_b, s_c)$ para $\gamma \rightarrow \infty$ deve ser finito para que seja possível calcular a solução de (2.16). Por isso, vamos definir $T(s_b, s_a) \equiv \lim_{\gamma \rightarrow \infty} \gamma T_\gamma(s_b, s_a)$ e (2.28) se reduz à

$$\delta(s_b - s_a) = \int_\Gamma ds_c T(s_b, s_c) G_0(\vec{r}(s_c), \vec{r}(s_a); k). \quad (2.30)$$

Para encontrar a expressão de $\psi(\vec{r})$ para quando $\gamma \rightarrow \infty$, tomamos esse limite em (2.21), logo

$$\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) + \int_{\Gamma} \int_{\Gamma} ds_b ds_a G_0(\vec{r}, \vec{r}(s_b); k) \lim_{\gamma \rightarrow \infty} [\gamma T_{\gamma}(s_b, s_a)] \varphi(\vec{r}(s_a)). \quad (2.31)$$

Lembrando que G_0 e φ não dependem de γ . Usando a definição de $T(s_b, s_a)$ teremos

$$\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) - \varphi^T(\vec{r}),$$

$$\varphi^T(\vec{r}) = \int_{\Gamma} \int_{\Gamma} ds_b ds_a G_0(\vec{r}, \vec{r}(s_b); k) T_{\gamma}(s_b, s_a) \varphi(\vec{r}(s_a)). \quad (2.32)$$

A equação (2.32) nos fornece a solução da função de onda ψ em todo o espaço após ser espalhada por uma barreira impermeável.

Podemos deduzir da equação (2.32) que a mesma satisfaz as condições de contorno de Dirichlet. Fazendo $\vec{r} = \vec{r}(s)$ temos

$$\psi(\vec{r}(s)) = \varphi(\vec{r}(s)) - \int_{\Gamma} \int_{\Gamma} ds_b ds_a G_0(\vec{r}(s), \vec{r}(s_b); k) T_{\gamma}(s_b, s_a) \varphi(\vec{r}(s_a)). \quad (2.33)$$

A integral do segundo termo pode ser reescrita utilizando a relação da função delta descrita em (2.30), logo

$$\psi(\vec{r}(s)) = \varphi(\vec{r}(s)) - \int_{\Gamma} ds_a \delta(s - s_a) \varphi(\vec{r}(s_a)), \quad (2.34)$$

e resolvendo a integral

$$\psi(\vec{r}(s)) = \varphi(\vec{r}(s)) - \varphi(\vec{r}(s)) = 0. \quad (2.35)$$

A partir dos resultados acima, vemos que o fator chave no MCP é a introdução da matriz T , que para as condições de contorno de Dirichlet é obtida a partir da equação integral (2.30). Esta última revela um aspecto muito interessante do método. Formalmente podemos escrever (2.30) como $I_{\Gamma} = TG_0 = G_0T$, onde I_{Γ} e G_0 são restrições dos operadores de identidade e da função de Green livre na fronteira Γ . Logo, $T = G_0^{-1}$ é o operador associado a matriz T definida somente em Γ . Portanto, fisicamente podemos interpretar a solução $\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) - \varphi^{(T)}(\vec{r})$ considerando o princípio de Huygens. $\varphi^{(T)}(\vec{r})$ em qualquer ponto \vec{r} se acumula a partir das “fontes pontuais” ao longo da “frente de onda” Γ . Uma fonte pontual inicialmente em s_b se propaga livremente — mediante G_0 — em direção ao ponto final \vec{r} (ver

Fig. 2.3). Logo, $\varphi^{(T)}(\vec{r})$ resulta de todas essas contribuições. Por sua vez, cada fonte pontual em s_b provém da onda incidente φ , que foi espalhada por todo o contorno. Para um certo s_a , a matriz T propaga $\varphi(\vec{r}(s_a))$ até o ponto s_b [75].

Outro aspecto importante do método é a singularidade de $T(s_b, s_a; k)$ na diagonal principal $s_b = s_a$. Esse fato é uma consequência direta da definição da matriz T , dado por (2.30), que por conveniência vamos reescrevê-la da seguinte forma, $\int_{\Gamma} ds G_0(\vec{r}(s_b), \vec{r}(s)) T(s, s_a) = \delta(s_b - s_a)$. Primeiro, notemos que a integral diverge somente quando $s_b = s_a$. Também, essa é a única situação pela qual os argumentos de G_0 e T podem simultaneamente coincidir como uma variável de integração s calculada sobre Γ [75].

A resolução analítica de T pode ter um alto custo matemático dependendo da forma do bilhar que estamos analisando. No entanto, na seção 2.4, iremos desenvolver um algoritmo eficiente na busca por soluções em qualquer barreira espalhadora.

2.3 Aspecto analítico em bilhares

Nesta seção iremos mostrar como o MCP atua em bilhares quânticos caracterizados por uma curva fechada Γ com condições de contorno de Dirichlet. O método é capaz de obter soluções de espalhamento na parte externa ao bilhar e os autoestados na parte interna usando apenas uma expressão. Em outras palavras, para qualquer energia, a expressão (2.32) calcula os autoestados corretos de espalhamento na parte externa. Para a parte interna, (2.32) fornece os autoestados exatos desde que a onda incidente φ tenha a autoenergia correta do problema e que algumas condições de contorno sejam satisfeitas, caso contrário a função de onda ψ resultante é nula.

Vamos considerar um bilhar qualquer com contorno Γ e com a origem sempre na sua região interna (2.4). Dessa forma, um ponto s em Γ pode ser parametrizado por $(\vec{r}(\theta_s), \theta_s)$ no qual $0 \leq \theta_s < 2\pi$.

Abaixo seguem algumas expressões que serão utilizadas nas nossas análises.

(i) A função de Green livre em duas dimensões por ser escrita como

$$G_0(\vec{r}, \vec{r}_0; k) = (4i)^{-1} H_0^{(+)}(k|\vec{r} - \vec{r}_0|), \quad (2.36)$$

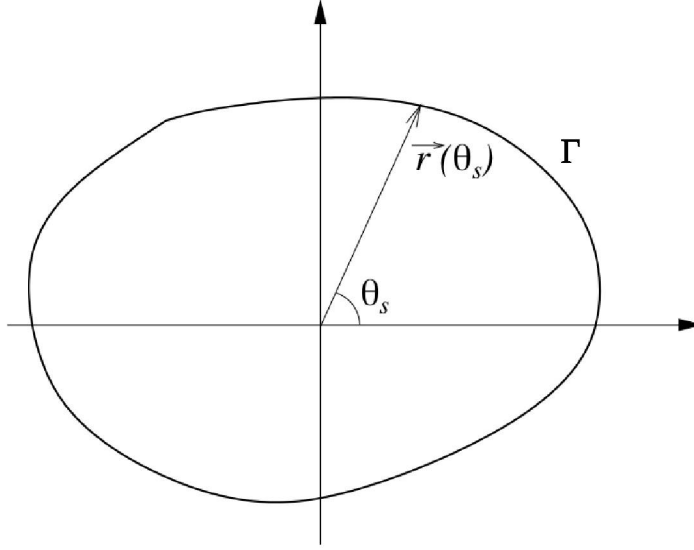


Figura 2.4: Curva formando um bilhar Γ convexo. Os pontos sobre Γ são parametrizados por θ_s .

onde $H_n(\pm)(z) = J_n(z) \pm iN_n(z)$ com J_n e N_n sendo as funções de Bessel e Neumann de ordem n . Vale lembrar que $N_n(z)$ possui divergência logarítmica para $z \rightarrow 0$ [75].

(ii) Se $|\vec{r}_0| < |\vec{r}|$ vamos ter [75]

$$H_0^{(+)}(k|\vec{r} - \vec{r}_0|) = \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \phi_n(\vec{r}_0; k) h_n^{(+)}(\vec{r}; k), \quad (2.37)$$

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

(iii) Considere que $\vec{r}_b(\theta_b)$ é um vetor posição de um certo ponto s_b em Γ . Se s_b não for um canto (vértice), existe sempre um sistema de coordenadas no qual, para qualquer $\vec{r}_c(\theta_c)$ em Γ , $\vec{r}_b(\theta_b) \leq \vec{r}_c(\theta_c)$. De fato, devemos apenas considerar o ponto s_b como sendo a normal à superfície e então colocar a origem do sistema sobre algum ponto do seu prolongamento. Por outro lado, se s_b for um vértice, a relação acima pode ser violada, pois existem pontos s_c que sempre estão mais próximos da origem que s_b . Então, para a relação descrita por (2.30), podemos assumir que $\vec{r}_b(\theta_b) \leq \vec{r}_c(\theta_c)$. Usando $H_0^{(+)}$ em (ii), multiplicando ambos os lados por $\phi_l(\vec{r}_a)$ e integrando sobre θ_a , encontramos

$$\phi_l(\vec{r}_b; k) = \sum_n \left(\frac{1}{4i} \int_{\Gamma} \int_{\Gamma} d\theta_a d\theta_c h_n^{(+)}(\vec{r}_c; k) T(\theta_c, \theta_a) \phi_l(\vec{r}_a; k) \right) \phi_n(\vec{r}_b; k). \quad (2.38)$$

Sendo a expressão acima válida para todo l , logo [75]

$$\left(\frac{1}{4i} \int_{\Gamma} \int_{\Gamma} d\theta_a d\theta_c h_n^{(+)}(\vec{r}_c; k) T(\theta_c, \theta_a) \phi_l(\vec{r}_a; k) \right) = \delta_{nl}. \quad (2.39)$$

(iv) Qualquer função bem comportada definida em todo o espaço \mathbb{R}^2 pode ser expandida em termos do conjunto $\phi_n(k)$ definido em (ii). Como φ obedece à equação de Schrödinger para a partícula livre, podemos escrever $\varphi(\vec{r}; k) = \sum_n c_n \phi_n(\vec{r}; k)$. Vamos dividir φ em uma soma de duas partes

$$\varphi(\vec{r}; k) = \sum_{n=p} c_n \phi_n(\vec{r}; k) + \sum_{n=q} c_n \phi_n(\vec{r}; k). \quad (2.40)$$

O primeiro termo representa o número máximo dos termos da série original que, quando somados, anulam-se identicamente sobre todos os pontos de Γ . Por consequência, o segundo termo não pode ser zero sobre toda a barreira, tendo em vista que obtemos a solução trivial $\varphi(\vec{r}; k) = 0$. Se nenhuma subsérie se anula em Γ , então o conjunto $\{p\}$ é vazio [75].

2.4 Solução interna e mecanismo de filtro

Vamos procurar na região interna ao bilhar a solução da função de onda $\psi(\vec{r})$ para cada $\vec{r} = (r, \theta)$. Consideremos então que, para um dado \vec{r} , temos um sistema de coordenadas tal que $r \leq r_b(\theta_b)$ para um ponto s_b pertencente a Γ . Usando (2.37) em (2.36),

$$G_0^{(+)}(\vec{r}, \vec{r}_b; k) = (4i)^{-1} \sum_{n=-\infty}^{n=+\infty} \phi_n(\vec{r}; k) h_n^{(+)}(\vec{r}_b; k). \quad (2.41)$$

e substituindo este resultado e a equação (2.40) em (2.32), temos

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= \sum_l c_l \phi_l(\vec{r}; k) - \sum_n c_n \phi_n(\vec{r}; k) \left(\frac{1}{4i} \int_{\Gamma} \int_{\Gamma} d\theta_b d\theta_a h_n^{(+)}(\vec{r}_b; k) T(\theta_b, \theta_a; k) \right) \times \\ &\quad \times \left(\sum_{l=p} c_l \phi_l(\vec{r}_a; k) + \sum_{l=q} c_l \phi_l(\vec{r}_a; k) \right). \end{aligned} \quad (2.42)$$

Caso $E = k^2$ não corresponda a nenhuma das autoenergias do bilhar, então o termo com o conjunto p deve ser nulo. Caso contrário, este mesmo termo resolve a equação de Schrödinger

e satisfaz corretamente as condições de contorno. Dessa forma E é um autovalor.

Fazendo $\sum_{l=p} c_l \phi_l(\vec{r}_a; k) = 0$ em (2.42) e usando (2.39), teremos

$$\psi(\vec{r}) = \sum_l c_l \phi_l(\vec{r}) - \sum_{l=q} c_l \phi_l(\vec{r}). \quad (2.43)$$

Não há autoestados internos quando E é diferente das autoenergias do bilhar, pois como $p = 0$, o conjunto q engloba toda a expansão de $\varphi(\vec{r})$ e por isso $\psi(\vec{r})$ é nulo para qualquer ponto da região interna da barreira.

Se E é um autovalor do bilhar, φ pode, ou não, ser separado. Caso essa separação não possa ser feita, novamente o conjunto p é vazio e a função de onda se anula. Considerando que a separação possa ser feita, então a equação (2.42) toma a seguinte forma

$$\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) - \sum_{l=q} c_l \phi_l(\vec{r}) = \sum_{l=p} c_l \phi_l(\vec{r}). \quad (2.44)$$

Onde obviamente temos uma solução para o problema interno.

Vemos que a integral de $\varphi^T(\vec{r})$ atua como um filtro, “removendo” qualquer parte da onda incidente que se anula no contorno de Γ . Então basta atribuir a forma correta de $\varphi(\vec{r}; k)$ e sua energia para encontrarmos os autoestados corretos do sistema.

2.5 Tratamento numérico

O cálculo analítico da matriz T nem sempre é possível quando levamos em conta o formato do contorno que estamos analisando. Esse problema pode ser resolvido quando derivamos um método numérico que calcule a matriz T sobre qualquer barreira, seja ela regular ou irregular. O objetivo do MCP é calcular T sobre uma barreira espalhadora Γ para logo em seguida ser inserida na expressão (2.21). Assim, obtemos a função de onda em todo o espaço definido por \vec{r} .

A Fig. 2.5 mostra um bilhar irregular de contorno Γ com parede permeável (γ finito) e perímetro dividido em N segmentos de igual comprimento, $[\Gamma_j]_{j=1,2,3,\dots,N}$. A integral de volume é calculada sobre cada elemento j em (2.21) da seguinte forma

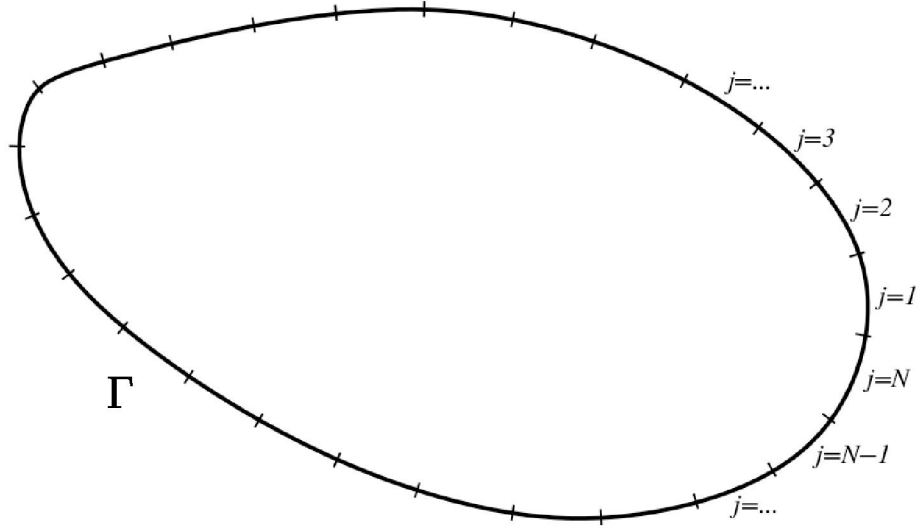


Figura 2.5: Discretização da curva Γ . N define a dimensão $T(i, j) = [T_{ij}]_{N \times N}$.

$$\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) + \gamma \sum_{j=1}^N \int_{\Gamma_j} ds G_0(\vec{r}, \vec{r}(s)) \psi(\vec{r}(s); k). \quad (2.45)$$

Podemos reescrever a equação acima fazendo $\vec{r}(s) = \vec{r}(s_j) = \vec{r}_j$ e $\vec{r} = \vec{r}_i$,

$$\psi(\vec{r}_i) = \varphi(\vec{r}_i) + \gamma \sum_{j=1}^N \int_{\Gamma_j} ds G_0(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \psi(\vec{r}_j). \quad (2.46)$$

$$\psi(\vec{r}_i) = \varphi(\vec{r}_i) + \gamma \sum_{j=1}^N M_{ij} \psi(\vec{r}_j). \quad (2.47)$$

Com

$$M_{ij} = \int_{\Gamma_j} ds G_0(\vec{r}_i, \vec{r}_j). \quad (2.48)$$

Se $\Psi = (\psi(\vec{r}_1), \dots, \psi(\vec{r}_N))$ e $\Phi = (\varphi(\vec{r}_1), \dots, \varphi(\vec{r}_N))$, podemos reescrever a equação (2.47) sob a forma matricial, logo

$$\Psi = \Phi + \gamma \mathbb{M} \Psi. \quad (2.49)$$

Reescrevendo novamente a expressão acima para Ψ e multiplicando por γ em ambos os lados, teremos

$$\gamma \Psi = \mathbb{T} \Phi, \quad (2.50)$$

Onde definimos $\mathbb{T} = \gamma[\mathbb{I} - \gamma\mathbb{M}]^{-1}$. Esta última expressão nos fornece a forma discretizada da matriz T . Vamos agora tomar o i -ésimo elemento da matriz coluna Ψ em (2.50) usando a matriz discretizada \mathbb{T} , logo

$$\gamma\Psi_i = \gamma \sum_{j=1}^N [(\mathbb{I} - \gamma\mathbb{M})^{-1}]_{ij} \Phi_j. \quad (2.51)$$

Lembrando que $\Psi_i = \psi(\vec{r}_i)$ e $\Phi_j = \varphi(\vec{r}_j)$. Com isso, $\gamma\psi(\vec{r}(s_j)) = \gamma\psi(\vec{r}_j) = \gamma\Psi_j$. Substituindo $\gamma\Psi_j = (\mathbb{T}\Phi)_j$ em (2.46), teremos

$$\psi(\vec{r}) = \varphi(\vec{r}) + \sum_{j=1}^N \int_{\Gamma_j} ds G_0(\vec{r}, \vec{r}_j) (\mathbb{T}\Phi)_j. \quad (2.52)$$

Aproximando o resultado da integral na equação acima por seu valor no ponto médio do segmento Γ_j e definindo Δ_j como seu volume, é obtida a forma discretizada da equação (2.21)

$$\psi(\vec{r}) \approx \varphi(\vec{r}) + \sum_{j=1}^N G_0(\vec{r}, \vec{r}_j) \Delta_j (\mathbb{T}\Phi)_j. \quad (2.53)$$

Esta é a aproximação numérica da função de onda espalhada $\psi(\vec{r})$ em todo o espaço. A matriz \mathbb{M} em (2.48) é calculada similarmente a ψ , logo

$$M_{ij} \approx G_0(\vec{r}_i, \vec{r}_j) \Delta_j. \quad (2.54)$$

A função de Green para uma partícula livre é proporcional a função de Neumann [77, 78] que no caso $r = 0$ ($r = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$), não é definida. Sendo assim, no problema de espalhamento em duas dimensões, a aproximação em (2.54) terá problemas quando $i = j$. Portanto, é necessário calcular explicitamente a integral em (2.48) para os elementos da diagonal de \mathbb{M} .

Para uma barreira com parede infinita ($\gamma \rightarrow \infty$) descrito pela equação (2.32), temos que

$$\lim_{\gamma \rightarrow \infty} T_\gamma = \mathbb{T} = \lim_{\gamma \rightarrow \infty} \gamma[\mathbb{I} - \gamma\mathbb{M}]^{-1} \rightarrow \mathbb{M}^{-1}. \quad (2.55)$$

Com a definição acima, a expressão (2.53) se torna

$$\psi(\vec{r}) \approx \varphi(\vec{r}) - \sum_{j=1}^N G_0(\vec{r}, \vec{r}_j) \Delta_j (\mathbb{M}^{-1} \Phi)_j. \quad (2.56)$$

A equação (2.53) calcula a autofunção $\psi(\vec{r})$ de uma partícula espalhada por uma barreira impenetrável.

A referência [63] mostra duas possibilidades para obter \mathbb{M} , uma delas é calculando a integral de (2.48), e a outra é fazendo uma aproximação de valor médio em (2.54). Esse método numérico garante boas aproximações junto a bons resultados, resultando também em um cálculo mais trivial e satisfatória rapidez computacional.

Alguns cuidados devem ser tomados na escolha de N para a execução do método. Em princípio, sabemos que quanto maior for o seu valor atribuído, maior será a aproximação da solução exata de $\psi(\vec{r})$. No entanto, valores elevados de N resulta em matrizes maiores no cálculo numérico. Por isso, devemos tomar cuidado quanto ao tamanho da matriz que vamos calcular levando em conta um valor de N que seja suficientemente grande para que tenhamos bons resultados sem elevar consideravelmente o custo computacional. O método traz bons resultados com boa performance computacional para (vamos suprimir o subscrito j do parâmetro Δ_j para facilitar a notação) [75]

$$\frac{\Delta}{\lambda} < 10^{-1}, \quad (2.57)$$

onde Δ é a razão do perímetro P da barreira pelo número de segmentos N , $\Delta = P/N$, e $\lambda = 2\pi/k$ sendo o comprimento de onda da onda incidente. Com isso, λ deve ser maior que Δ para que o pacote de onda “veja” o espalhador como uma barreira. Dessa forma, não há “vazão” da função de onda através da fronteira.

Para aplicar eficientemente o método, dividimos cada barreira dimensionalmente definida por $l_p = l_1, l_2, \dots, l_P$ do contorno Γ em $N^{(l_p)}$ segmentos de comprimento

$$\Delta^{(l_p)} = \frac{l_p}{N^{(l_p)}}. \quad (2.58)$$

Assim denotamos por $T(i, j)$ a matriz de espalhamento discretizada calculada nos pontos

médios dos segmentos Δ_i e Δ_j . Vamos definir μ como a razão

$$\mu = \frac{\Delta}{\lambda} \quad (2.59)$$

A escolha de μ é de suma importância tendo em vista que Δ deve ser suficientemente menor que o comprimento de onda λ incidente no bilhar. Devido a proporcionalidade inversa entre o comprimento de onda e o número de onda ($k \sim 1/\lambda$), podemos obter uma expressão que mantenha a dimensão da matriz proporcional a energia. Para isso combinamos as equações (2.58) e (2.59) e reescrevemos $N^{(l)}$ como

$$N^{(l_p)} = \frac{l_p k}{2\pi\mu} \quad (2.60)$$

sendo $\lambda = 2\pi/k$ e

$$N = \sum_{p=1}^P N^{(l_p)}. \quad (2.61)$$

Portanto, a expressão (2.60) assegura que N será tanto maior quanto maior for a energia, mantendo a razão Δ/λ constante e garantindo a mesma precisão nos cálculos.

2.5.1 Mecanismo de filtro do MCP para o bilhar triangular

(44°, 46°, 90°)

A Fig. 2.6 mostra o primeiro resultado numérico que desenvolvemos. Nela mostramos os autovalores de energia k^2 e a densidade de probabilidade $|\psi|^2$ para um triângulo cujas paredes possuem $\gamma = \infty$. Na Fig. 2.6a temos o cálculo da média sobre os elementos (i, j) da matriz de espalhamento $\langle |T(i, j)|^2 \rangle$ em função do espectro de energia $k^2 \in [400, 900]$ do bilhar triangular (44°, 46°, 90°). Cada pico representa um autoenergia do sistema, ou seja, os elementos da matriz T possuem valores acentuados, indicando uma alta probabilidade daquela energia representar um autovalor correto do sistema.

A Fig. 2.6b mostra como podemos obter os ângulos de ressonância θ . Nela é exibida a média sobre os elementos (x, y) da função de onda espalhada $\langle |\psi(x, y)|^2 \rangle$ no interior do bilhar para cada ângulo $\theta \in [0, 360)$. Os picos adicionais vistos no gráfico 2.6b se referem a “me-

mória” da função onda do caso regular ($45^\circ, 45^\circ, 90^\circ$), em que este último, devido a presença de linhas de simetria, possui ângulos θ ressonantes adicionais que excitam o sistema. Logo, para o caso aqui discutido, e nos que serão abordados posteriormente, o θ será atribuído considerando o maior pico de $\langle |\psi(x, y)|^2 \rangle$. O vetor \vec{k} de $\varphi(\vec{r})$ é decomposto em duas coordenadas definidas por $k_x = k \cos \theta$ e $k_y = k \sin \theta$ em que $\vec{r} = (x, y)$. No método, θ define a direção da onda incidente e, por consequência, também a simetria do sistema.

Com a escolha dos estados corretos através dos picos de energia da Fig. 2.6a, associados com a escolha do ângulo θ da Fig. 2.6b, resulta, por exemplo, em dois autoestados que são vistos em (1) e (2) na Fig. 2.6c (na representação da função de onda, as cristas e vales são mostradas por regiões claras e escuras, respectivamente). Logo, quando a energia ou o ângulo θ não representam parâmetros de ressonância, a densidade de probabilidade da função de onda no interior do bilhar é nula, como visto nos estados (3) e (4).

2.5.2 Analítico vs MCP: Bilhar quadrado e triangular reto

Nesta seção, iremos abordar casos já conhecidos para mostrar que nossos procedimentos numéricos estão em concordância com a literatura. Inicialmente vamos obter as autoenergias e autoestados associados do bilhar quadrado e, em seguida, do bilhar triangular ($30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$). Ambos possuem solução analítica e servirão como comparativos com nosso método numérico.

Os parâmetros numéricos são adotados por determinação através do comprimento dos lados do bilhar l_p , bem como o valor do número de onda k e a relação μ entre o comprimento da onda incidente λ com o comprimento Δ de cada barreira. Para ambas as geometrias, usaremos o mesmo $\mu = 0,05$ e permeabilidade $\gamma \rightarrow \infty$ em todas as paredes. No quadrado definimos o comprimento das paredes com $L = 1$ para o intervalo de energia $\Delta k = 16$. No triângulo ($30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$) adotamos $l_1 = 1$ para o comprimento da base e, por cálculo trigonométrico, as demais paredes possuem dimensões $l_2 = 1/\sqrt{3}$ e $l_3 = \sqrt{4/3}$.

A Fig. 2.7a exhibe os quinze primeiros estados do bilhar quadrado obtidos pelo MCP. Os autoestados associados as energias de ressonância identificados nos picos da matriz de espalhamento são calculados e mostrados na Fig. 2.7b-MCP.

A função de onda ψ_A que descreve analiticamente a dinâmica de uma partícula confinada

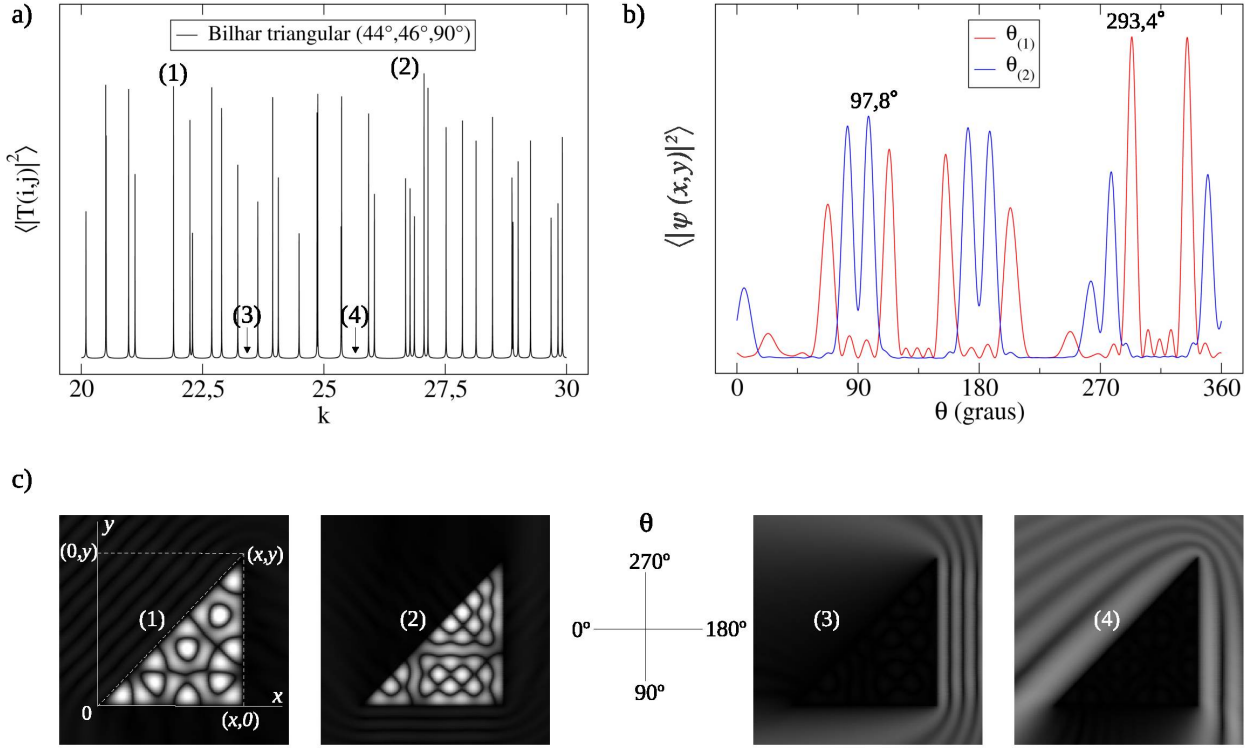


Figura 2.6: a) Gráfico de $k \times \langle |T(i,j)|^2 \rangle$ para a faixa do espectro $k \in [20, 30]$ do bilhar triangular com $\gamma = \infty$. b) Valor médio da densidade de probabilidade da função de onda $\langle |\psi(x,y)|^2 \rangle$ para as autoenergias (1) e (2), sendo θ o ângulo de incidência e $\theta_{(1)}$ e $\theta_{(2)}$ os de ressonância. c) Função de onda $|\psi(x,y)|^2$ associado aos estados com $k_{(1)} = 21,902$, $k_{(2)} = 27,064$, $k_{(3)} = 23,43$ e $k_{(4)} = 25,65$ ($\theta_{(3)} = 180^\circ$ e $\theta_{(4)} = 270^\circ$). Na representação da função de onda, as cristas e vales são mostradas por regiões claras e escuras, respectivamente.

a um poço retangular no plano (x, y) é [79]

$$\psi_{m,n}^{(A)}(x, y) = B \text{sen} \left(\frac{m\pi}{l_1} x \right) \text{sen} \left(\frac{n\pi}{l_2} y \right), \quad (2.62)$$

com m e n sendo números quânticos inteiros e positivos, $l_1 = l_2 = L$ definindo um poço quadrado e B a amplitude de oscilação. Podemos determinar B normalizando (2.62) para que a probabilidade de encontrar esta partícula em qualquer região no interior do bilhar seja igual a 1 [80], ou seja

$$\int_{L=0}^{L=1} \int_{L=0}^{L=1} \psi^* \psi dx dy = 1. \quad (2.63)$$

Resolvendo as integrais acima temos que $B = \sqrt{2/L}$ [38]. Substituindo a função de onda dada por (2.62) na equação de Schrödinger independente do tempo, com $\hbar^2/2m = 1$,

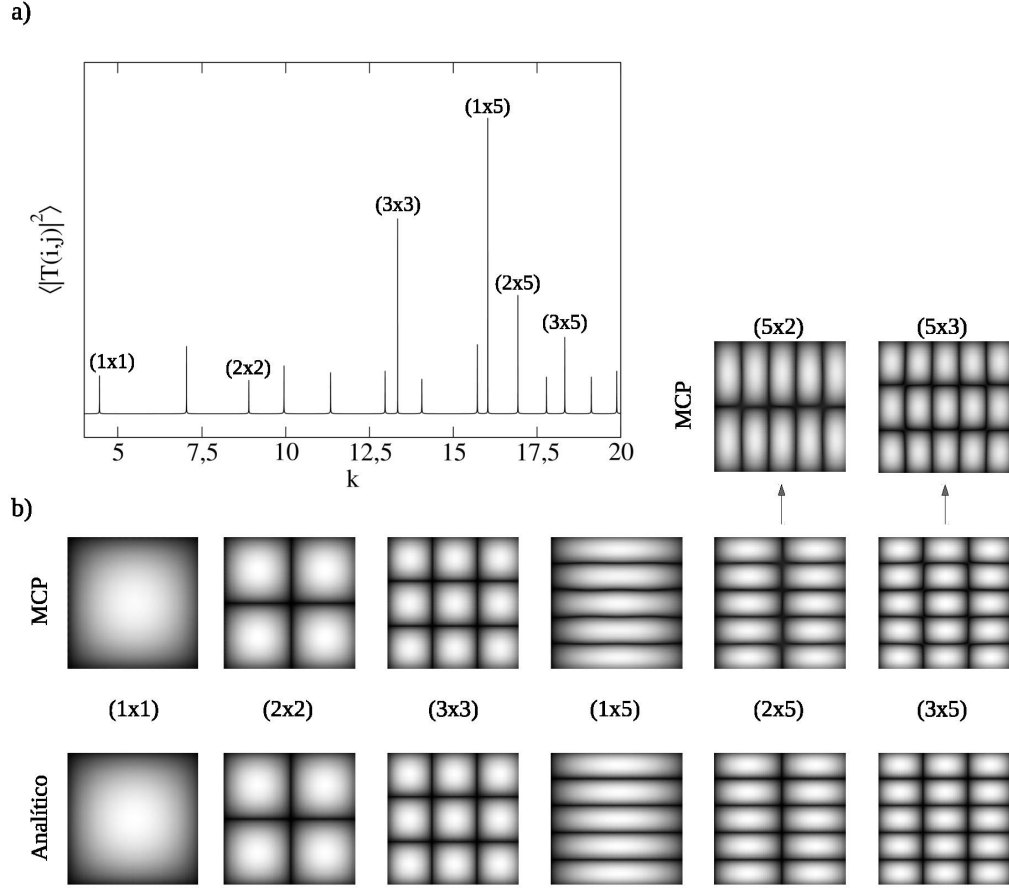


Figura 2.7: a) Gráfico de $k \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$ para os primeiros 15 autoestados associados ao bilhar quadrado de lado unitário obtidos numericamente via MCP. b) Densidade de probabilidade da função de onda do caso analítico via (2.62) e do caso numérico via MCP com: $k_{1,1}^{(MCP)} = 4, 45$; $k_{2,2}^{(MCP)} = 8, 89$; $k_{3,3}^{(MCP)} = 13, 34$; $k_{1,5}^{(MCP)} = 16, 03$; $k_{2,5}^{(MCP)} = 16, 92$; $k_{3,5}^{(MCP)} = 18, 32$. As setas indicam duas degenerescências (2×5) e (5×2) , (3×5) e (5×3) .

$V(x, y) = 0$ (partícula livre) e $E = k^2$ [81–83],

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, y) + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \psi(x, y) = k^2 \psi(x, y), \quad (2.64)$$

encontramos o espectro analítico de autovalores [84, 85],

$$k_{m,n}^{(A)} = \pi \sqrt{m^2 + n^2}. \quad (2.65)$$

De acordo com a equação (2.65) os autovalores exatos de energia para o bilhar quadrado são $k_{1,1}^{(A)} = \pi \sqrt{1^2 + 1^2} = 4, 44$, $k_{2,2}^{(A)} = 8, 88$, $k_{3,3}^{(A)} = 13, 32$, $k_{1,5}^{(A)} = 16, 01$, $k_{2,5}^{(A)} = 16, 91$, $k_{3,5}^{(A)} =$

18, 31. A partir dos autovalores de energia obtidos pelo MCP descritos na legenda da Fig. 2.7, bem como a densidade de probabilidade da função de onda associados a estas energias, vemos que o nosso método se mostra eficaz com um margem de erro de aproximadamente 0,14%. As degenerescências do bilhar quadrado podem ser identificadas com escolha atribuição correta do ângulo de ressonância θ , como visto na Fig. 2.7 nos autoestados (5×2) e (5×3) . No método analítico, podemos determinar $\theta^{(A)}$ como função dos números quânticos m e n através do módulo do vetor de onda no espaço (x, y) a partir da equação (2.65), ou seja

$$k_{(A)}^2 = k_{x(A)}^2 + k_{y(A)}^2. \quad (2.66)$$

Com $k_x^{(A)} = k^{(A)} \cos [\theta^{(A)}] = m\pi^2$ e $k_y^{(A)} = k^{(A)} \sin [\theta^{(A)}] = n\pi^2$. Usando a propriedade trigonométrica da tangente, logo

$$\theta^{(A)} = \tan^{-1} \left(\frac{n}{m} \right). \quad (2.67)$$

As soluções do bilhar triangular $(30^\circ, 60^\circ, 90^\circ)$ são obtidas analiticamente pela seguinte equação da função de onda com $l_1 = 1$ e $l_2 = 1/\sqrt{3}$ [86, 87] (podemos atribuir valor unitário à amplitude da função de onda sem produzir maiores danos ao objetivo desta seção),

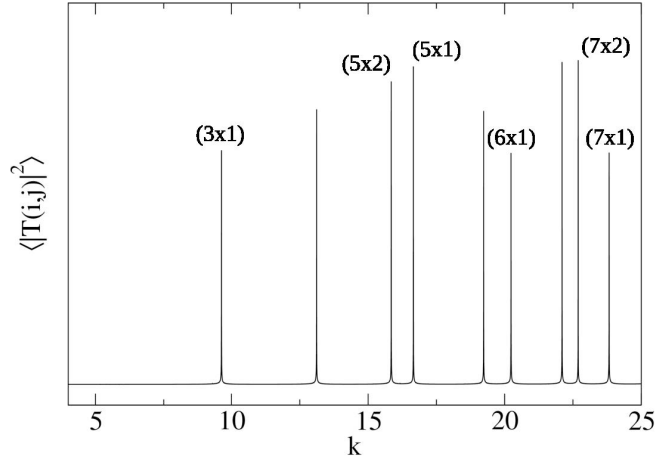
$$\begin{aligned} \psi_{m,n}^{(A)}(x, y) = & -\sin(m\pi x) \sin \left[\frac{(m-2n)\pi}{\sqrt{3}} y \right] - \sin(n\pi x) \sin \left[\frac{(2m-n)\pi}{\sqrt{3}} y \right] + \\ & + \sin[(m-n)\pi x] \sin \left[\frac{(m+n)\pi}{\sqrt{3}} y \right]. \end{aligned} \quad (2.68)$$

Substituindo na equação de Schrödinger independente do tempo, obtemos a expressão que calcula os autovalores de energia do triângulo [73, 88–90]

$$k_{m,n}^{(A)} = \frac{2\sqrt{3}}{3} \pi \sqrt{m^2 + n^2 - mn}. \quad (2.69)$$

De acordo com a expressão acima, os autovalores para o triângulo são $k_{3,1}^{(A)} = 9,59$, $k_{5,2}^{(A)} = 15,81$, $k_{5,1}^{(A)} = 16,62$, $k_{6,1}^{(A)} = 20,19$, $k_{7,2}^{(A)} = 22,65$, $k_{7,1}^{(A)} = 23,78$. A legenda da Fig. 2.8, na qual temos os autovalores obtidos via MCP, mostram boa correspondência entre os resultados analíticos e numéricos, em especial, se levarmos em consideração a morfologia da

a)



b)

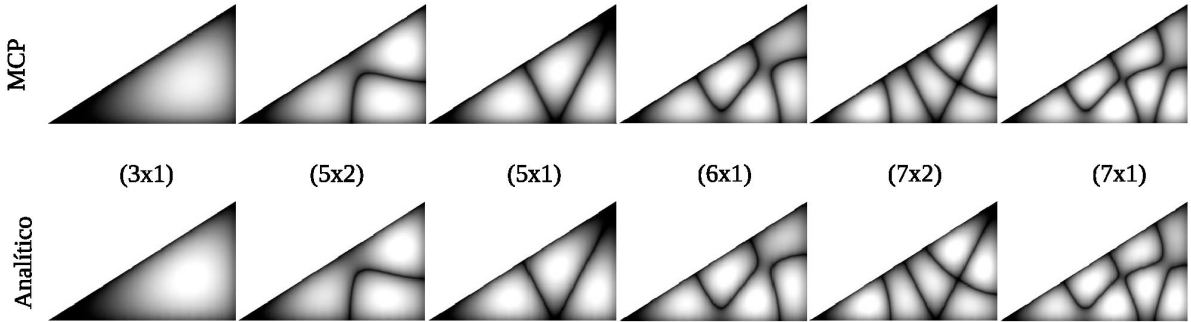


Figura 2.8: a) Gráfico de $k \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$ para os primeiros nove autoestados associados ao bilhar triangular ($30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$) calculados numericamente via MCP. b) Densidade de probabilidade da função de onda do caso analítico via (2.68) e do caso numérico pelo MCP com: $k_{3,1}^{(MCP)} = 9, 63$; $k_{5,2}^{(MCP)} = 15, 84$; $k_{5,1}^{(MCP)} = 16, 65$; $k_{6,1}^{(MCP)} = 20, 23$; $k_{7,2}^{(MCP)} = 22, 68$; $k_{7,1}^{(MCP)} = 23, 82$.

função de onda da Fig. 2.8b.

A razão $\mu = \Delta/\lambda$ confere ao MCP o controle da precisão numérica das energias de ressonância, isto é, atribuindo μ cada vez menor e conseqüentemente tornando o comprimento da onda incidente λ cada vez menor que o comprimento Δ da barreira, temos um aumento na acurácia dos resultados, porém, somado a um aumento da exigência computacional. No entanto, de acordo com o conjunto de autoestados mostrados nas figuras 2.7b e 2.8b, a atribuição de parâmetros que adotamos oferece um custo computacional aceitável e suficientemente segura para análise do que pretendemos buscar neste trabalho. Sendo assim, iremos adotar $\mu = 0,05$ para todas as regiões do espectro a serem estudadas.

Capítulo 3

Bilhar triangular reto

No presente capítulo iremos estudar as propriedades quânticas do bilhar triangular. Consideraremos variações da sua geometria nas regiões de transição regular-irregular. Alguns trabalhos já foram realizados levando em conta a geometria triangular como, por exemplo no cálculo de soluções da equação de Schrödinger para uma partícula em um triângulo equilátero [88], no estudo numérico sobre as propriedades ergódicas do triângulo com ângulos irracionais de π [91,92], o estudo do espectro de energia e da função de onda com padrão nodal no triângulo reto [52], o uso do método de expansão para calcular numericamente os níveis de energia e suas correspondentes funções de onda para o caso de um bilhar triangular [59], entre outros. No entanto, até onde sabemos, não há na literatura análises sistemáticas que considerem a condição de não-integrabilidade do triângulo retângulo. Por isso, nosso objetivo será deslocar os ângulos internos deste sistema para analisar as suas soluções no caso irregular.

Aqui iremos considerar um triângulo retângulo com permeabilidade infinita por todo o contorno, com ângulos internos α e β e lados $l_1 = L/dl$, $l_2 = Ldl$ e $l_3 = \sqrt{l_1^2 + l_2^2}$, como mostrado na Fig. 3.1. As suas dimensões são $L = \sqrt{2}$, $dl = (\tan\beta)^{-1/2}$ e $l_3 = L[\tan\beta + \tan\beta^{-1}]^{1/2}$. Os dois catetos l_1 e l_2 são escritos como função de L e dl para que a área do bilhar se mantenha constante durante a variação dos ângulos internos. Sendo $(45^\circ, 45^\circ, 90^\circ)$ e $(30^\circ, 60^\circ, 90^\circ)$ as geometrias regulares do triângulo, nas duas seções seguintes a abordagem será feita modificando os ângulos internos de cada sistema imponente variações próximas as regiões de regularidade tal que $\beta \in [44^\circ, 46^\circ]$ e $\beta \in [29^\circ, 31^\circ]$. Em ambas as

situações, as regiões do espectro a serem estudadas serão feitas primeiramente para energias mais baixas, $k \in [1, 20]$, e em seguida para uma região mais alta $k \in [100, 102]$ ¹.

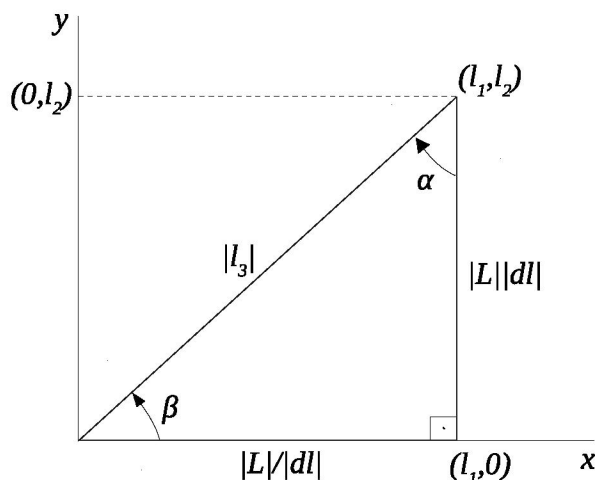


Figura 3.1: Bilhar triangular reto no plano (x, y) com lados $l_1 = |L|/|dl|$, $l_2 = |L||dl|$ e l_3 e ângulos internos $\alpha + \beta = \pi/2$.

Como discutido na Seç. 2.5, a matriz N (ver (2.61)) possui dependência com a geometria do bilhar (l_1 , l_2 e l_3), com o μ e com o número de onda k . Como μ é constante para qualquer região do espaço de fase $k \times \beta$, e a variação dimensional das paredes é suficientemente pequena (resultando em N 's muito próximos), plotamos na Fig. 3.2 a dependência linear de N com o número de onda k apenas para $\beta = 45, 0^\circ$ e $\beta = 30, 0^\circ$. Logo, para a região mais baixa do espectro ($k \in [1, 20]$), a dimensão associada a matriz $T(i, j) = [T_{ij}]_{N \times N}$ é calculada com $N \in [61, 307]$ para $\beta \in [44^\circ, 46^\circ]$ e $N \in [65, 324]$ para $\beta \in [29^\circ, 31^\circ]$, enquanto que para a faixa mais alta de espectro ($k \in [100, 102]$), $N \in [1537, 1567]$ para $\beta \in [44^\circ, 46^\circ]$ e $N \in [1619, 1651]$ para $\beta \in [29^\circ, 31^\circ]$.

3.1 Análise de famílias para $\beta \in [44^\circ, 46^\circ]$

Nesta seção, vamos obter as soluções do bilhar triangular na região de transição $\beta \in [44^\circ, 46^\circ]$. Uma abordagem numérica por meio do MCP será feita tendo como finalidade a busca pelas propriedades da matriz de espalhamento $T(i, j)$, assim como as informações da densidade

¹Definimos como “baixas energias” ou “altas energias” regiões do espectro em que temos um considerável aumento na sensibilidade da matriz T a variações de k e β .

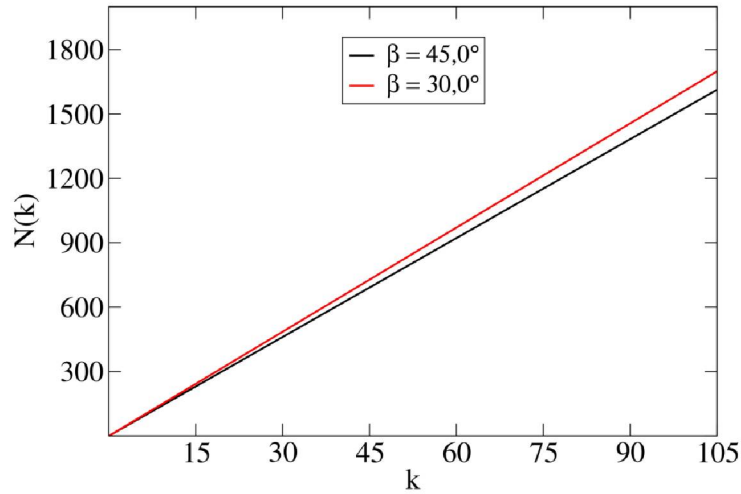


Figura 3.2: Representação gráfica da equação (2.61) mostrando a dependência linear da dimensão da matriz T do triângulo mediante relação de $N \times k$ para $\beta = 45,0^\circ$ e $\beta = 30,0^\circ$ com $\mu = 0,05$.

da probabilidade da função de onda $|\psi(x, y)|^2$ associada aos autoestados. A variação da geometria neste caso mantém $l_1 \in [1, 44, 1, 39]$ e $l_2 \in [1, 39, 1, 44]$.

3.1.1 Soluções $\psi(x, y)$ para $k \in [1, 20]$

A Fig. 3.3a exibe a média sobre os elementos (i, j) da matriz T como função de k e β . As regiões mais claras, formando curvas, representam famílias. As famílias são compostas por conjuntos de autoestados gerados por um pico na matriz de espalhamento no espaço $k \times \beta$. Na Fig. 3.3b, cada autoestado é identificado por uma densidade de probabilidade, a qual pode ser medida através do cálculo da função de onda $|\psi|^2$ com k e β associados. Na representação da função de onda, as cristas e vales são mostradas por regiões claras e escuras, respectivamente.

Começamos com espaço de parâmetros para baixas energias com $k \in [1, 20]$. A linha média horizontal representa o bilhar triangular $(45^\circ, 45^\circ, 90^\circ)$. A Fig. 3.3a mostra que as famílias distribuem-se de maneira paralela ao eixo das geometrias, isto é, sob uma estreita faixa de energia e sem repulsão aparente. Este aspecto pode ser visto com mais detalhes ao lado direito da Fig. 3.3a. A ausência de sensibilidade aparente da matriz T com a variação de β pode ser justificado pelo fato de que, em regiões baixas do espectro, temos um

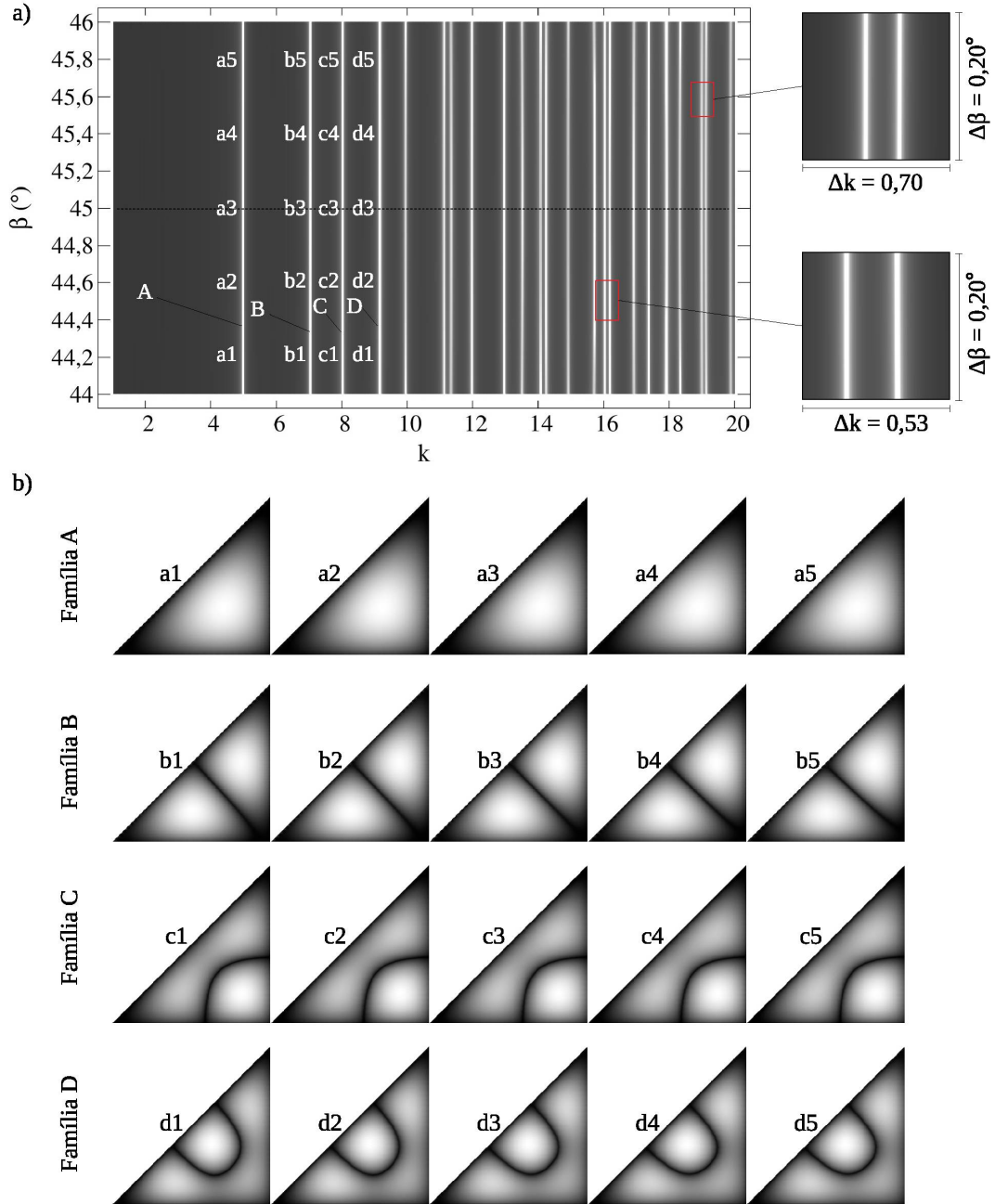


Figura 3.3: a) Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle |T_k(i,j)|^2 \rangle$. b) Densidade de probabilidade associada aos autoestados com $k_A = 4,99$, $k_B = 7,03$, $k_C = 8,03$ e $k_D = 9,17$. A geometria adotada é a mesma para cada família, ou seja, $\beta_1 = 44,2^\circ$, $\beta_2 = 44,4^\circ$, $\beta_3 = 45,0^\circ$, $\beta_4 = 45,4^\circ$ e $\beta_5 = 45,8^\circ$.

comprimento de onda grande de função de onda espalhada, e levando em conta que a variação angular do sistema é suficientemente pequena, a função de onda dos autoestados apresenta morfologia constante na variação dos ângulos internos. A Fig. 3.3b mostra quatro conjuntos

de autoestados de k e β associados. Na família A, temos o primeiro estado do triângulo reto cuja função de onda, para qualquer autoestado desta família, possui apenas um máximo na região central do bilhar. Conforme calculamos a função de onda para energias maiores, como em B, C e D, o número de máximos e mínimos aumenta, o que está de acordo com a teoria quântica. As energias de ressonância $E^{(A)}$, $E^{(B)}$, $E^{(C)}$ e $E^{(D)}$ (ou equivalente k) possuem mesmo módulo em cada família A, B, C e D, respectivamente.

Com o aumento no espectro de energia, há um favorecimento às famílias em descrever dinâmicas de interação, em consequência da diminuição do comprimento da onda incidente. Em outras palavras, quanto maior a energia, maior a sensibilidade da matriz de espalhamento à variações de geometria. A Fig. 3.4 descreve esse aspecto para duas faixas distintas do espectro para um mesmo intervalo $\Delta k = 5$, com $k \in [40, 45]$ em 3.4a e $k \in [70, 75]$ em 3.4b. Com o acréscimo da energia, os autoestados adotam um comportamento de interação

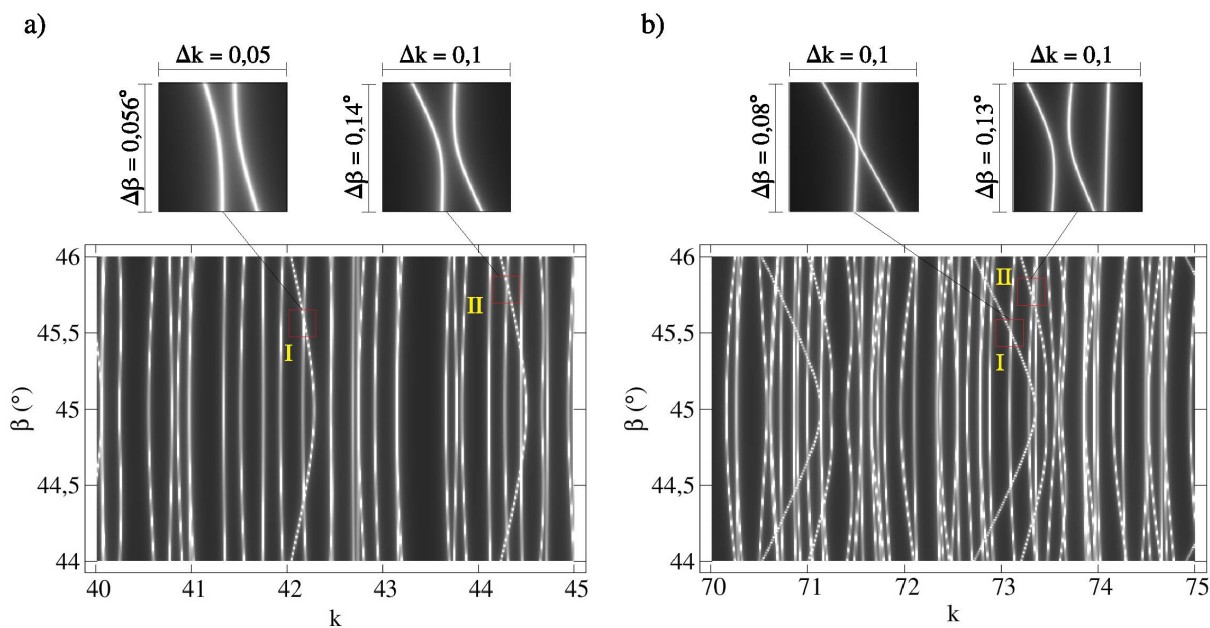


Figura 3.4: Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$. As áreas limitadas por I e II exibem regiões do espaço com interação entre famílias.

e, dependendo da configuração geométrica do bilhar, se cruzam gerando estados degenerados. No entanto, na maioria dos casos em que a disposição angular define um sistema irregular, os autoestados convergem e se repelem.

A seguir, iremos buscar as propriedades da matriz T para sistemas quânticos sob altas

energias. Em posse destas energias, vamos calcular a densidade de probabilidade da função de onda para observar sua morfologia mediante alterações na dinâmica das famílias.

3.1.2 Soluções $\psi(x, y)$ para $k \in [100, 102]$

Vejam agora a distribuição das autoenergias do bilhar triangular sob a mesma variação geométrica de β mas para $k \in [100, 102]$, como ilustrado na Fig. 3.5.

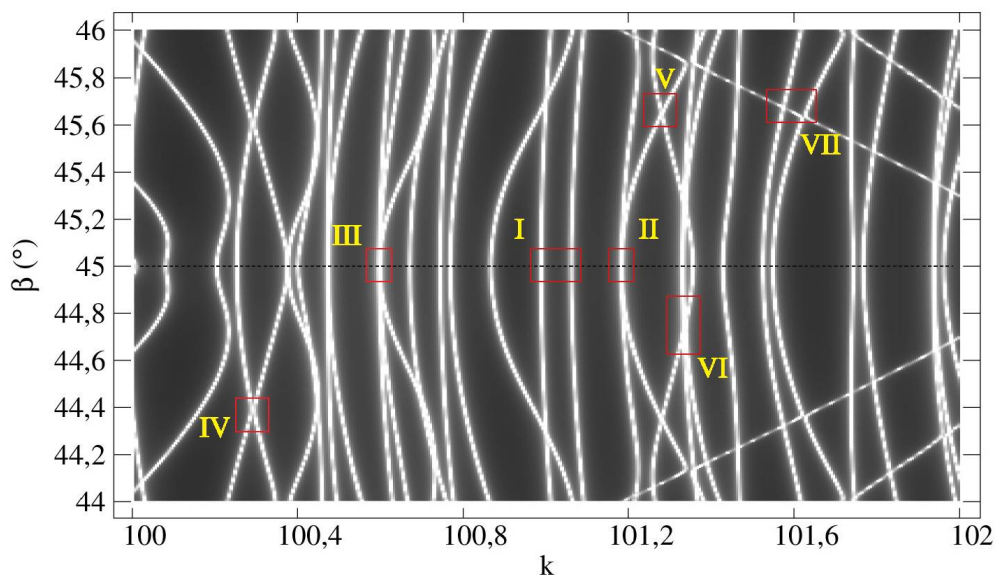


Figura 3.5: Gráfico de densidade $\langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$ em função do espaço de parâmetros $k \times \beta$. A linha pontilhada horizontal forma o bilhar triangular ($45^\circ, 45^\circ, 90^\circ$). As regiões definidas por I a VII serão ampliadas para dar mais detalhes a discussão sobre a função de onda.

A partir de energias mais altas, a dinâmica das famílias passa a ter maior sensibilidade a variação dos ângulos internos. Esse fato é consequência do pequeno comprimento de onda que incide no sistema. Logo, há um aumento na suscetibilidade da matriz T em apresentar deflexões acentuadas na dinâmica com a variação da geometria. Na linha horizontal, a qual descreve o bilhar ($45^\circ, 45^\circ, 90^\circ$), as famílias se aproximam gerando estados degenerados [56, 93]. Quando quebramos a simetria do sistema com a variação dos ângulos internos, essas degenerescências são dissociadas e os autoestados evoluem de forma independente. No espaço de parâmetros cujo β caracteriza uma geometria irregular, as famílias ao convergirem se repelem a fim de evitar um cruzamento e consequentemente a ocorrência de degenerescências [52, 73]. A Fig. 3.6 mostra um corte bidimensional na qual é plotada o espectro de autovalores

de energia para dois ângulos igualmente espaçados a partir da linha central que define $\beta = 45,0^\circ$, isto é, para $\beta = 45,0^\circ \pm 0,6^\circ$. Devido a essa simetria, as autoenergias que excitam o conjunto de bilhares $\beta \in [44, 45]$ possuem mesmo módulo daquelas que excitam $\beta \in (45, 46]$. O resultado dessa simetria também influencia na morfologia da função de onda de tal forma que um autoestado calculado sobre um valor de k e $\beta = 45^\circ + \Delta\beta$ (acima da linha de simetria), difere de outro com k e $\beta = 45^\circ - \Delta\beta$ (abaixo da linha de simetria) apenas mediante a troca $l_1 \leftrightarrow l_2$.

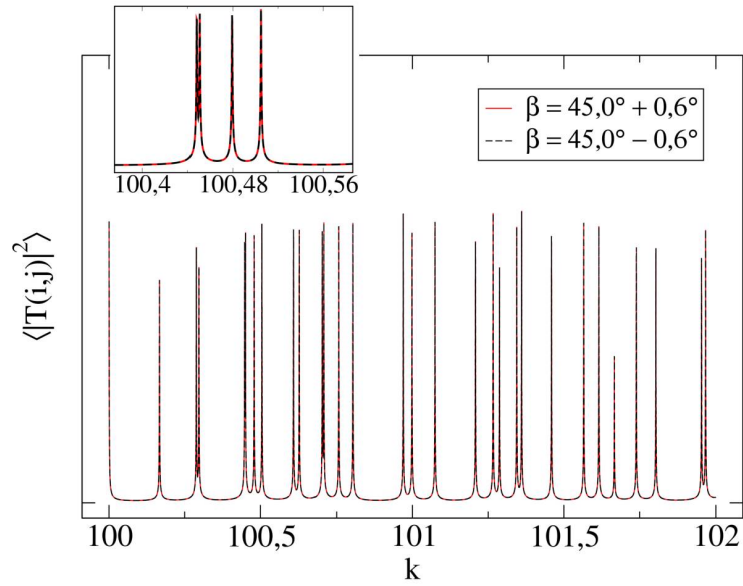


Figura 3.6: Gráfico $k \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$ que mostra a simetria presente nas linhas que descrevem os níveis de energia do bilhar $\beta = 45,0^\circ \pm 0,6^\circ$.

Para uma investigação mais detalhada da Fig. 3.5, selecionamos algumas regiões do espaço de fase para observar as repulsões de níveis e a densidade de probabilidade da função de onda para k e β associados. Primeiramente iremos discutir as soluções do triângulo cuja geometria varia na região de transição regular-irregular (I, II e III). Nos demais limites (IV, V, VI, VII), analisamos as soluções para bilhares com geometria irregular.

A primeira região de transição aqui estudada é a região I mostrada na Fig. 3.7a, cujo espaço de fase é composto por duas famílias descritas por geometrias que variam da dinâmica regular a irregular. A partir de uma análise primeiramente mais geral da Fig. 3.5, vemos que as famílias geram estados degenerados apenas quando a geometria define o bilhar regular $(45^\circ, 45^\circ, 90^\circ)$ [52]. No entanto, a região I aqui mencionada não resulta em degenerescências.

Dois são os motivos pelos quais nos levam a crer nessa afirmação. O primeiro diz respeito a posição no espaço de fase de ambas na linha de simetria em que $\beta = 45,0^\circ$, na qual é evidente que não há pontos de cruzamento, isto é, pontos em que as energias dos autoestados se sobrepõe sobre uma mesma geometria. O segundo motivo se refere a função de onda. A morfologia associada aos autoestados tanto em A quanto em B mostra que a densidade de probabilidade se mantém invariante mediante variações da geometria. Esta invariância é

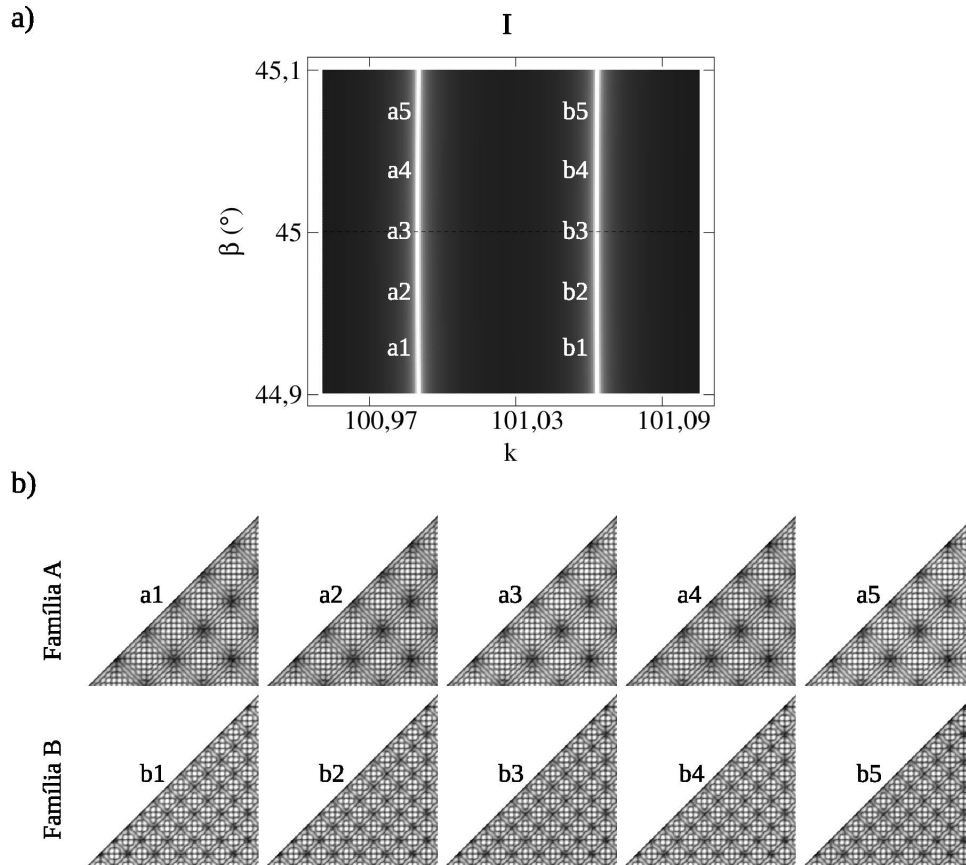


Figura 3.7: a) Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$ da região I. b) Densidade de probabilidade da função de onda $|\psi|^2$ associada aos estados: **a1)** $k = 100,99$, $\beta = 44,92^\circ$; **a2)** $k = 100,989$, $\beta = 44,96^\circ$; **a3)** $k = 100,989$, $\beta = 45,0^\circ$; **a4)** $k = 100,989$, $\beta = 45,04^\circ$; **a5)** $k = 100,99$, $\beta = 45,08^\circ$; **b1)** $k = 101,063$, $\beta = 44,92^\circ$; **b2)** $k = 100,063$, $\beta = 44,96^\circ$; **b3)** $k = 100,063$, $\beta = 45,0^\circ$; **b4)** $k = 101,063$, $\beta = 45,04^\circ$; **b5)** $k = 101,063$, $\beta = 45,08^\circ$.

resultado da evolução retilínea de ambas as famílias, ou em outras palavras, os autoestados desenvolvem-se sobre uma estreita faixa de energia em relação à variação dos ângulos internos do bilhar.

Mencionamos no entanto anteriormente que, para baixas energias, os autoestados são

gerados em famílias que evoluem paralelamente ao eixo que define a geometria do sistema, e que isso é resultado do conjunto de energias com baixo comprimento de onda que excitam o bilhar. Embora esse comportamento dos autoestados seja uma regra para baixas energias, para altas energias tais comportamentos em linha reta também podem ocorrer. Desse modo, novamente através da Fig. 3.5 é possível observar que no geral as famílias possuem tendência de evolução retílinea, porém, nem sempre paralela ao eixo de β , e que um desvio acentuado nesta tendência ocorrerá mediante interação com famílias vizinhas.

Veremos a seguir que a função de onda mostra uma nítida tendência em alterar a sua morfologia quando os seus autoestados são construídos em regiões onde T apresenta alta sensibilidade. Logo, em qualquer região do espaço de fase, seja ela nas faixas baixas ou altas do espectro, o tipo de interação, seja por cruzamento ou repulsão, pode ser seguramente identificado pela ampliação visual das zonas de convergência ou, em alguns casos, pela morfologia da função de onda associada aos autoestados.

A Fig. 3.8 mostra com detalhes a região II, na qual mostra a interação de duas famílias que se sobrepõe em $\beta = 45^\circ$. O bilhar $(45^\circ, 45^\circ, 90^\circ)$ possui dinâmica regular cuja distribuição dos níveis de energia obedece a uma probabilidade de Poisson [52]. Os autoestados ab estão localizados sob a mesma coordenada $k = 101, 185$ e $\beta = 45, 0^\circ$, porém ambas as funções de onda são calculadas para diferentes ângulos de ressonância θ . O primeiro, $\theta = 289^\circ$, excita a família A, enquanto o segundo, $\theta = 171^\circ$, excita B. Aqui vemos um caso de superposição de autoestados, ou seja, dois autoestados conectados pela mesma energia e geometria.

Sendo II um intervalo de transição entre um bilhar regular e irregular, é possível notar pequenas flutuações na uniformidade da função de onda com a variação dos ângulos internos. Nos autoestados da família A, por exemplo, as setas indicam um conjunto de mínimos que se deslocam ao longo da parede l_3 . Quando calculada sobre o bilhar $(45^\circ, 45^\circ, 90^\circ)$, representada pelo autoestado $ab^{(A)}$, este conjunto de nós aparenta localizar-se sobre a mediana de l_3 . Tais variações na morfologia mostram comportamento semelhante na família B, onde notamos a função de onda ajustando-se na paredes laterais l_1 e l_2 enquanto $\beta \neq 45^\circ$, como mostrado também nos gráficos sob o ponto de vista tridimensional de b1 e b4. Quando o autoestado é gerado sobre o bilhar $\beta = 45^\circ$, representado por $ab^{(B)}$, a distribuição espacial da função de onda é perfeitamente simétrica e uniformemente distribuída.

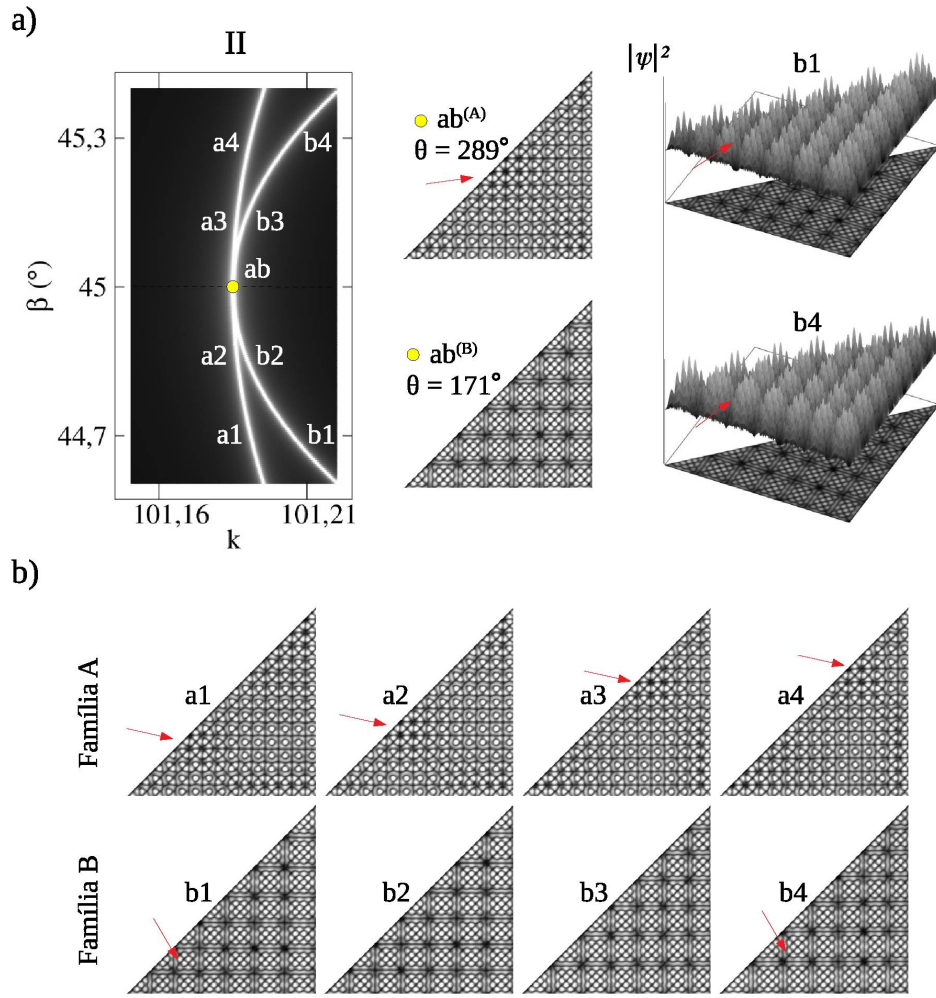


Figura 3.8: a) Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle |T_k(i,j)|^2 \rangle$ da região II. Ao lado é plotado os autoestados **b1** e **b4** sob o ponto de vista tridimensional. b) Densidade de probabilidade da função de onda $|\psi|^2$ associada aos estados: **a1)** $k = 101,191$, $\beta = 44,7^\circ$; **a2)** $k = 101,186$, $\beta = 44,84^\circ$; **a3)** $k = 101,188$, $\beta = 45,20^\circ$; **a4)** $k = 101,191$, $\beta = 45,30^\circ$; **b1)** $k = 101,205$, $\beta = 44,70^\circ$; **b2)** $k = 101,190$, $\beta = 44,84^\circ$; **b3)** $k = 101,194$, $\beta = 45,20^\circ$; **b4)** $k = 101,205$, $\beta = 45,30^\circ$; **ab)** $k = 101,185$, $\beta = 45,00^\circ$. As setas indicam alterações na função de onda na transição de um autoestado para outro.

Outra região de transição regular-irregular é mostrado em detalhes por III na Fig. 3.9, a qual descreve a evolução de três famílias que convergem em direção a linha de simetria descrita pelo bilhar $(45^\circ, 45^\circ, 90^\circ)$ até gerar uma degenerescência nos autoestados $abc^{(A)}$, $abc^{(B)}$ e $abc^{(C)}$. Cada um destes compartilham a mesma coordenada de k e β , diferindo apenas no valor do ângulo de ressonância θ que define a simetria na qual cada autoestado é construído. Pelo aspecto dos autoestados referentes as duas famílias A e B da Fig. 3.9b,

vemos que as suas morfologias pouco se alteram com a variação da geometria, este fato

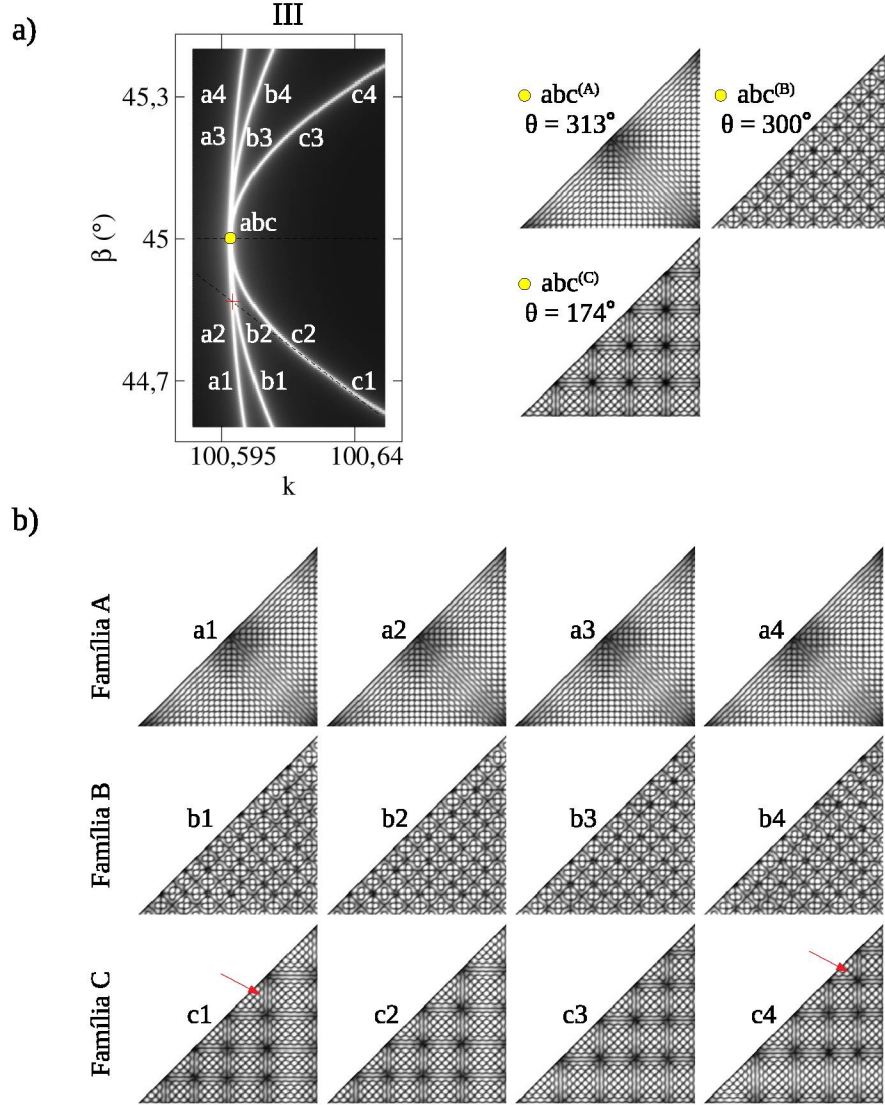


Figura 3.9: a) Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$ da região III. b) Densidade de probabilidade da função de onda $|\psi|^2$ associada aos estados: **a1)** $k = 100,601, \beta = 44,64^\circ$; **a2)** $k = 100,599, \beta = 44,80^\circ$; **a3)** $k = 100,599, \beta = 45,20^\circ$; **a4)** $k = 100,601, \beta = 45,35^\circ$; **b1)** $k = 100,609, \beta = 44,65^\circ$; **b2)** $k = 100,601, \beta = 44,80^\circ$; **b3)** $k = 100,601, \beta = 45,20^\circ$; **b4)** $k = 100,609, \beta = 45,35^\circ$; **c1)** $k = 100,634, \beta = 44,70^\circ$; **c2)** $k = 100,614, \beta = 44,80^\circ$; **c3)** $k = 100,614, \beta = 45,20^\circ$; **c4)** $k = 100,34, \beta = 45,30^\circ$; **abc)** $k = 100,598, \beta = 45,00^\circ$. As setas indicam alterações na função de onda na transição de um autoestado para outro.

pode ser encarado ao levarmos em conta a dinâmica dos autoestados que evoluem sob baixa sensibilidade as variações T . Por exemplo, a família A, a qual possui menor sensibilidade, tanto para os autoestados a1 e a2 calculados antes da simetria e a3 e a4 calculados após a simetria, a função de onda mantém a distribuição espacial constante. Na família B, no

entanto, é possível observar pequenas modificações na estrutura da função de onda. A família C, cuja dinâmica apresenta maior sensibilidade a T , desenvolve-se com visível deflexão no espaço de fase (inclusive para evitar um cruzamento abaixo da linha de geometria $\beta = 45^\circ$, identificado por “+”), e por isso as autofunções exibem visíveis variações na sua distribuição de densidade. As setas indicadas na Fig. 3.9b — Família C — mostram tais variações em $c1$ e $c2$ na parede lateral l_2 , antes da simetria, e na parede inferior l_1 dos autoestados $c3$ e $c4$, após a simetria.

O deslocamento angular atribuído a este sistema em que $\beta \in [44^\circ, 46^\circ]$ condiciona as famílias a um padrão de igualdade entre a distribuição das autoenergias obtidas abaixo e acima de $\beta = 45,0^\circ$ (ver Fig. 3.6). Assim observamos pelos autoestados da família C que a morfologia da função de onda associada a $c1$ e $c2$ construída no espaço de parâmetros em que $\beta < 45,0^\circ$ difere da morfologia de $c3$ e $c4$ mediante a troca das paredes $l_1 \leftrightarrow l_2$.

A partir de agora, vamos analisar o comportamento das soluções do triângulo para ângulos fora da geometria regular. A Fig. 3.10a mostra em detalhes a região delimitada por IV na qual identificamos o primeiro caso de repulsão de níveis. Na Fig. 3.10b, são plotados os autoestados $a1$ a $a4$ localizados na curva definida por A, e os autoestados $b1$ a $b4$ localizados na curva que define B. De acordo com a morfologia da função de onda relativa aos autoestados da Fig. 3.10b, é possível observar uma nítida indentidade entre os autoestados $a1$ e $a2$ com os autoestados $b3$ e $b4$. Assim como essa mesma semelhança também é observada entre os autoestados $b1$ e $b2$ com $a3$ e $a4$. Estes “saltos” da função de onda entre famílias são entendidos como uma consequência direta das fortes variações dos parâmetros de energia e geometria que ocorrem em regiões de convergência (aproximação entre autoestados de diferentes famílias). Logo, para que a morfologia matenha uma certa constância estrutural, a função de onda evita regiões mais fortemente afetadas pelas variações dos parâmetros k e β , mantendo uma tendência de evolução que resulta em inversões da morfologia nos autoestados interativos.

Apenas para incremento de informações, exemplificamos pelo gráfico da Fig. 3.10c como identificamos as autoenergias de uma determinada família para em seguida calcular a função de onda. Nele é plotado um corte bidimensional para o ângulo $\beta = 45,37^\circ$ da Fig. 3.10a. Quando o valor do ângulo é combinado com as autoenergias destacadas no gráfico temos,

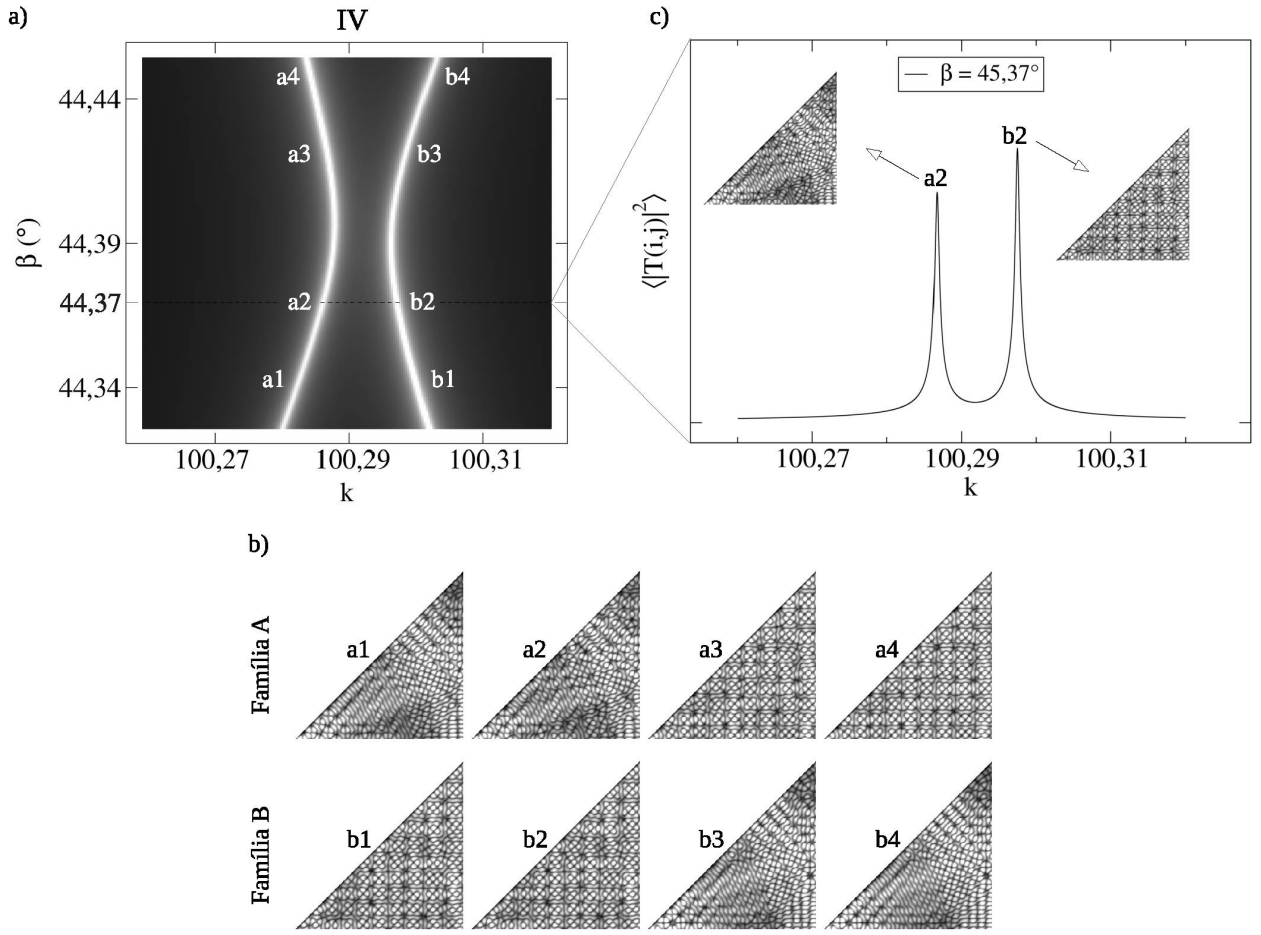


Figura 3.10: a) Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$ da região IV. b) Densidade de probabilidade da função de onda $|\psi|^2$ associada aos estados: **a1)** $k = 100,283$, $\beta = 44,34^\circ$; **a2)** $k = 100,2867$, $\beta = 44,37^\circ$; **a3)** $k = 100,2864$, $\beta = 44,43^\circ$; **a4)** $k = 100,2846$, $\beta = 44,45^\circ$; **b1)** $k = 100,3005$, $\beta = 44,34^\circ$; **b2)** $k = 100,297$, $\beta = 44,37^\circ$; **b3)** $k = 100,3$, $\beta = 44,43^\circ$; **b4)** $k = 100,3026$, $\beta = 44,45^\circ$. c) Gráfico de $k \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$. Os picos indicam autoenergias do sistema que, quando associados a $\beta = 45,37^\circ$, constroem os autoestados $a2$ e $b2$.

por exemplo, a construção dos autoestados $a2$ com $k = 100,286$ e $b2$ com $k = 100,297$, como ilustrado. Por conseguinte, cada pico da matriz de espalhamento que identificamos em função do número de onda caracteriza um autoestado associado àquela autoenergia e geometria correspondente.

A tendência observada em relação as propriedades da matriz T e estrutura da função de onda na região IV também é observada na região V mostrada na Fig. 3.11a. V, assim como IV, está localizada no espaço de fase no qual os ângulos internos definem bilhares com dinâmica caótica [52], e por isso as famílias a convergirem se repelem a fim de evitar cruzamentos.

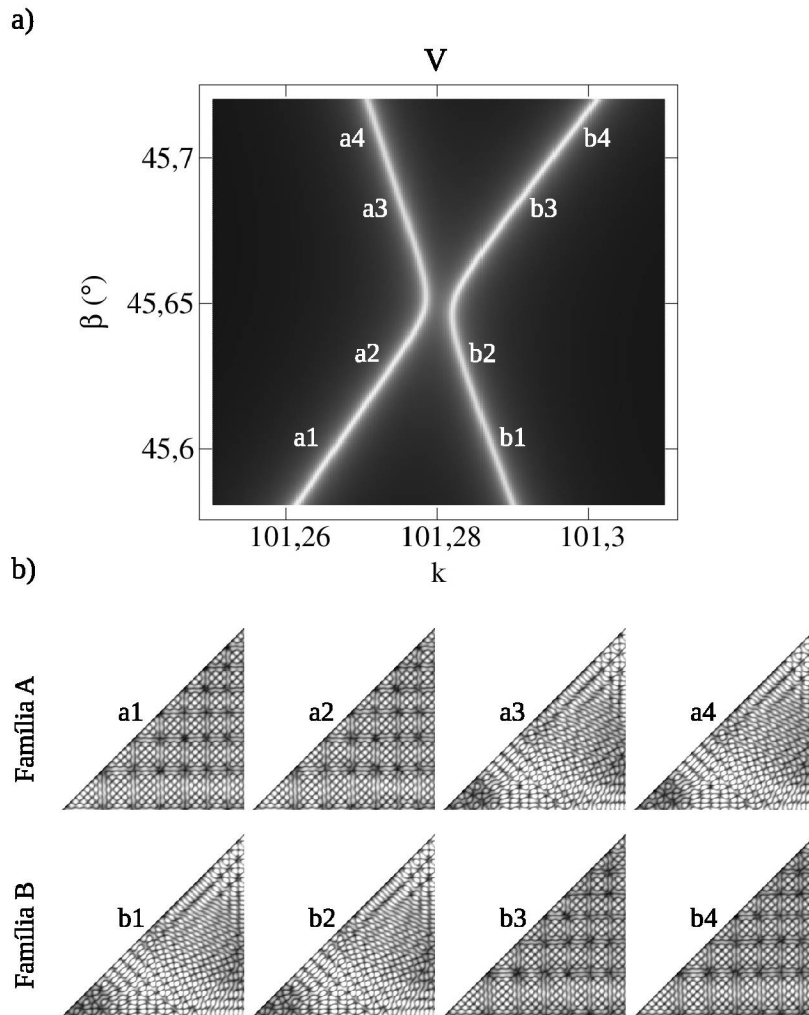


Figura 3.11: a) Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$ da região V. b) Densidade de probabilidade da função de onda $|\psi|^2$ associada aos estados: **a1)** $k = 101,266$, $\beta = 45,60^\circ$; **a2)** $k = 101,271$, $\beta = 45,62^\circ$; **a3)** $k = 101,275$, $\beta = 45,68^\circ$; **a4)** $k = 101,273$, $\beta = 45,70^\circ$; **b1)** $k = 101,287$, $\beta = 45,60^\circ$; **b2)** $k = 101,284$, $\beta = 45,62^\circ$; **b3)** $k = 101,289$, $\beta = 45,68^\circ$; **b4)** $k = 101,295$, $\beta = 45,70^\circ$.

De acordo com os autoestados mostrados na Fig. 3.11b, a função de onda associada a estes autoestados possui tendência de evolução que mantém a morfologia constante até se aproximar da região de interação. Após interagir com a família vizinha, os autoestados invertem a morfologia “tomando” a densidade de probabilidade que anteriormente era associada a outra família. Por isso é possível observar a semelhança entre os estados a1 e a2 com b3 e b4, assim como essa mesma semelhança também é visível entre b1 e b2 com a3 e a4. Como observado para a região IV, a função de onda novamente apresenta propensão a “evitar” regiões mais

fortemente afetadas pelos pontos de convergência, invertendo a morfologia entre as famílias quando há ocorrência de repulsão de níveis.

Essa tendência de repulsão também é condicionada a interações triplas, como descrito pelas famílias contidas na região delimitada por VI da Fig. 3.12. Nela temos três famílias que desenvolvem-se sobre uma mesma região de convergência, e nesta região novamente ocorre inversão da morfologia associada a função de onda. A semelhança é observada entre os autoestados a_1 e a_2 com c_3 e c_4 , entre b_1 e b_2 com a_3 e a_4 , e entre os autoestados c_1 e c_2 com b_3 e b_4 . O aspecto da interação pode ser deduzida a partir destas trocas de morfologia, isto é, de acordo com as linhas coloridas da Fig. 3.12a, a família B, localizada no centro, interage tanto com os autoestados de A quanto com os de C mediante as tendências $b_2 \rightarrow a_3$ e $c_2 \rightarrow b_3$, respectivamente, assim como os autoestados de A e C também possuem interação entre si mediante $a_2 \rightarrow c_3$.

Das duas últimas discussões acima sobre a inversão da função de onda diante de interações entre autoestados, a Fig. 3.13 é um bom exemplo deste cenário. Nela temos novamente uma interação tripla descrita por três famílias A, B e C. Há ocorrência de repulsão de níveis entre A e B, e esta última com a família C. Como antecipadamente esperávamos, a inversão ocorre entre as famílias A e B através dos autoestados com as tendências $a_2 \rightarrow b_2$ e $b_1 \rightarrow a_3$, e entre B e C através de $b_3 \rightarrow c_3$ e $c_2 \rightarrow b_4$. Ao contrário do que ocorre na interação tripla da Fig. 3.12, em VII não identificamos interação entre as famílias A e C exceto pelo aspecto da função de onda devido as trocas de morfologia, pois mesmo não havendo interação aparente, ambas possuem funções de onda semelhantes devido as tendências de evolução $a_1 \rightarrow a_2 \rightarrow b_2 \rightarrow b_3 \rightarrow c_3 \rightarrow c_4$.

Dois pontos que valem destaque para esse aspecto desenvolvido pelas famílias da Fig. 3.13 diz respeito a distribuição espacial de $|\psi|^2$. O primeiro ponto se refere a propensão da função de onda em concentrar-se em áreas específicas no interior do bilhar, como ocorre por exemplo nos autoestados a_1 , a_2 , b_2 , b_3 , c_3 e c_4 . O autoestado c_4 (também visto em três dimensões ao lado), por exemplo, descreve uma densidade de probabilidade que se acentua no vértice superior do triângulo que compreende ao ângulo $90^\circ - \beta$. Também, parte destes picos aloca-se adjacientemente a parede l_2 . A razão disso é resultado da dinâmica associada as famílias nas quais os autoestados são gerados. Neste caso em particular, os autoestados citados evoluem

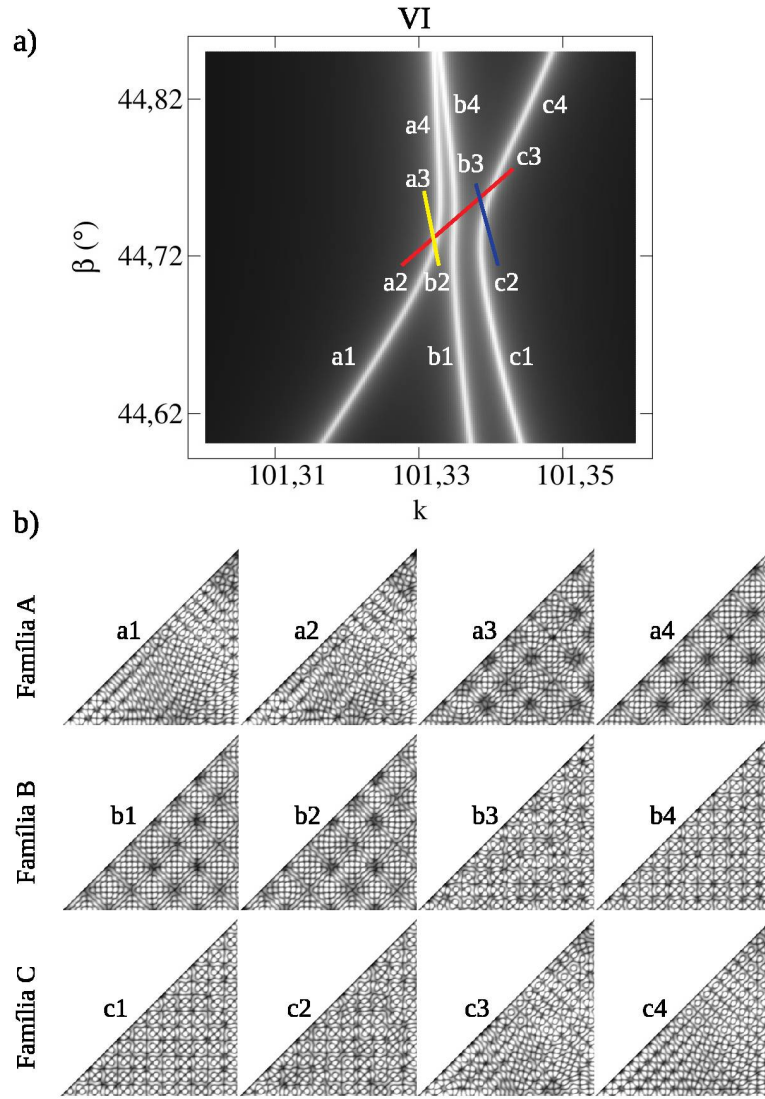


Figura 3.12: a) Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$ da região VI. b) Densidade de probabilidade da função de onda $|\psi|^2$ associada aos estados: **a1)** $k = 101, 323$, $\beta = 44, 65^\circ$; **a2)** $k = 101, 329$, $\beta = 44, 7^\circ$; **a3)** $k = 101, 333$, $\beta = 44, 75^\circ$; **a4)** $k = 101, 332$, $\beta = 44, 79^\circ$; **b1)** $k = 101, 336$, $\beta = 44, 65^\circ$; **b2)** $k = 101, 335$, $\beta = 44, 7^\circ$; **b3)** $k = 101, 334$, $\beta = 44, 77^\circ$; **b4)** $k = 101, 334$, $\beta = 44, 8^\circ$; **c1)** $k = 101, 341$, $\beta = 45, 65^\circ$; **c2)** $k = 101, 339$, $\beta = 45, 70^\circ$; **c3)** $k = 101, 341$, $\beta = 44, 77^\circ$; **c4)** $k = 101, 345$, $\beta = 44, 81^\circ$.

em uma pequena faixa de β e conseqüentemente apresentam morfologias que localizam a densidade da função de onda na região periférica do bilhar. Veremos posteriormente que o fato de uma família evoluir sob uma estreita variação de β em relação a energia não é via de regra para que a função de onda se concentre necessariamente na periferia do bilhar. Em alguns casos, a função de onda também exibe densidade que se distribui também de maneira localizada, porém, em regiões mais centralizadas.

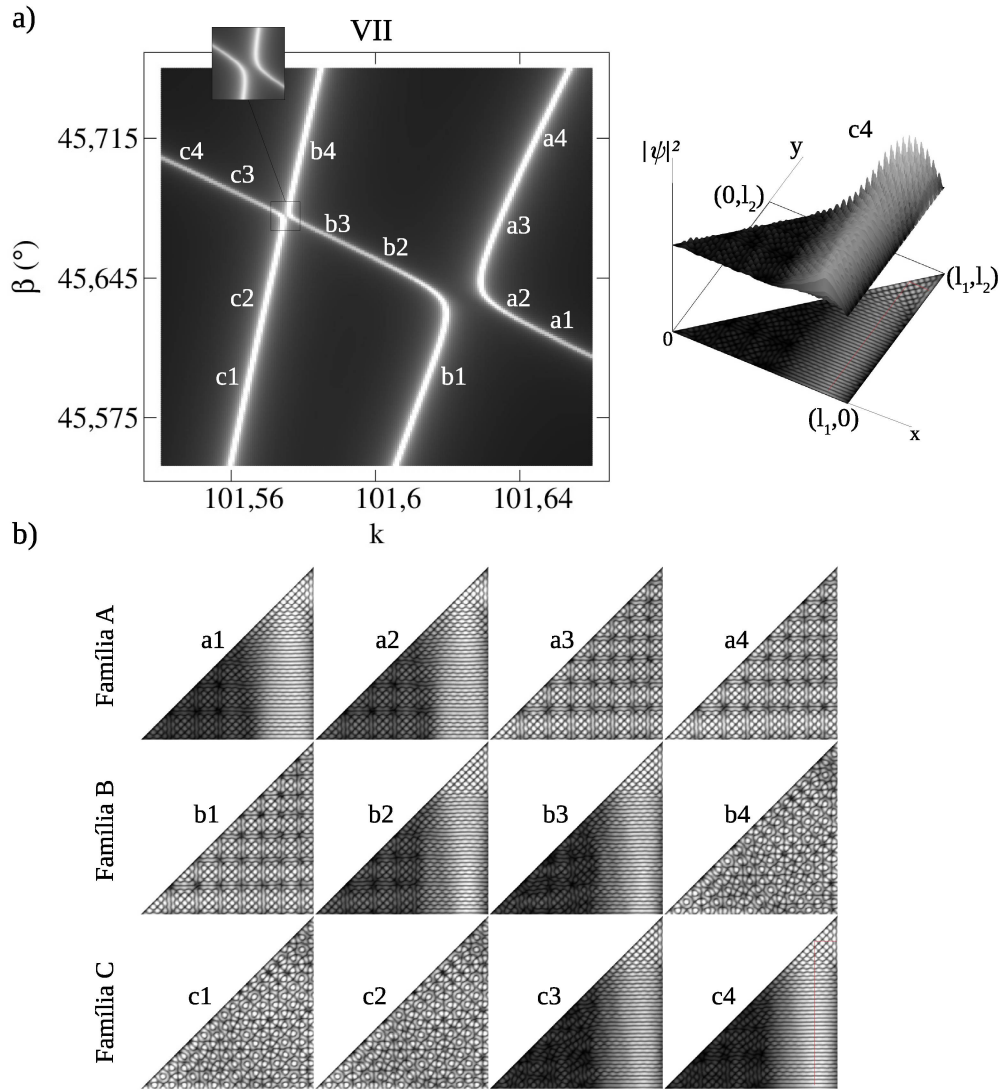


Figura 3.13: a) Gráfico $\langle |T_k(i, j)|^2 \rangle \times k \times \beta$ da região VII. Ao lado é plotado o autoestado c4 sob o ponto de vista tridimensional. A linha colorida indica qualitativamente a trajetória de uma partícula no seu bilhar análogo clássico. b) Densidade de probabilidade da função de onda $|\psi|^2$ associada aos estados: **a1)** $k = 101,655, \beta = 45,61^\circ$; **a2)** $k = 101,643, \beta = 45,62^\circ$; **a3)** $k = 101,636, \beta = 44,68^\circ$; **a4)** $k = 101,646, \beta = 45,72^\circ$; **b1)** $k = 101,612, \beta = 45,58^\circ$; **b2)** $k = 101,604, \beta = 45,765^\circ$; **b3)** $k = 101,587, \beta = 45,66^\circ$; **b4)** $k = 101,580, \beta = 45,71^\circ$; **c1)** $k = 101,563, \beta = 45,58^\circ$; **c2)** $k = 101,57, \beta = 45,63^\circ$; **c3)** $k = 101,563, \beta = 45,68^\circ$; **c4)** $k = 101,550, \beta = 45,69^\circ$.

O segundo ponto de destaque se refere a uma determinada partícula cuja dinâmica está confinada em uma órbita periódica e estruturalmente instável. A periodicidade mencionada é indicada pela linha colorida inserida no autoestado c4 o qual descreve qualitativamente como ocorre a interação dessa partícula com as três paredes. Os demais autoestados a1, a2, b2,

b3 e c3 também exibem esse mesmo padrão em particular, mas não iremos incluir a linha colorida para não poluir demasiadamente o gráfico. No análogo clássico, a partícula então interage perpendicularmente com as duas barreiras l_1 e l_2 , somado a uma interação também perpendicular na parede $l_3 = \sqrt{l_1^2 + l_2^2}$. Como estamos em uma região alta do espectro e conseqüentemente em uma região com baixo comprimento de onda, a menor alteração na angulação interna das paredes resultaria em uma ruptura dessa dinâmica.

A Fig. 3.14 ilustra, no caso clássico, como variações bruscas da geometria resultam na quebra da dinâmica associada a uma partícula confinada em uma trajetória periódica descrita por $\psi'(x, y)$. Enquanto a geometria mantém variações suficientemente pequenas, a partícula

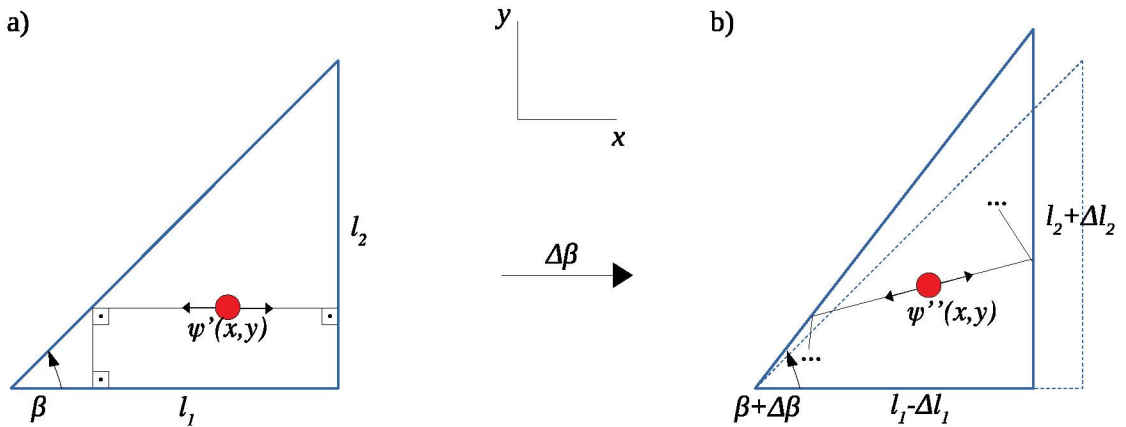


Figura 3.14: a) Ilustração de uma partícula com dinâmica descrita por $\psi'(x, y)$ confinada em uma órbita periódica para um determinado bilhar definido por β e l_1 e l_2 . b) Após variações significativas nas dimensões do bilhar mediante $\Delta\beta$ e Δl_1 e Δl_2 , a periodicidade é “quebrada” e a trajetória, agora aleatória, passa a ser descrita por $\psi''(x, y)$.

é capaz de manter a trajetória em uma órbita periódica. Mas quando impomos variações nas dimensões do sistema mediante um $\Delta\beta$ grande, e conseqüente variações Δl_1 e Δl_2 nas paredes, a partícula não sustenta mais tal periodicidade e ocorre a ruptura na dinâmica mediante $\psi''(x, y)$. Em nossos estudos a função de onda exibe esta mesma tendência com funções de onda dando “saltos” de família em família a fim de evitar mudanças bruscas no espaço $k \times \beta$, como é comum em regiões de convergência. Tal tendência é a característica que confere a partícula a condição de instabilidade, pois a existência de uma órbita periódica fica condicionada a ínfimas variações de geometria e energia. Esta última é justificada pelo fato de que uma mesma família não sustenta tais órbitas por longos intervalos de energia.

3.1.3 Órbitas periódicas em estados cicatrizados

O aspecto encontrado para a função de onda que descreve uma partícula em uma dinâmica periódica representa uma propriedade já identificada na literatura e é conhecida como *cicatrizes* [94]. As cicatrizes são autofunções de sistemas classicamente caóticos que atingem um pico acentuado ao longo de órbitas periódicas [95,96]. Um exemplo é mostrado na Fig. 3.15 (retirada da referência [3]), onde temos o bilhar estádio de Bonimovich, no qual a função de onda associada ao autoestado possui acentuada densidade nas proximidades de uma órbita periódica instável associado ao bilhar análogo clássico [3,97].

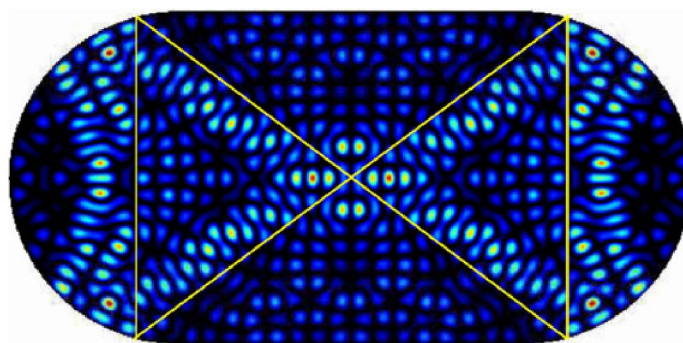


Figura 3.15: Densidade da função de onda $|\psi|^2$ do bilhar estádio de Bonimovich com energia correspondente $k^2 = 1395,7$. As linhas amarelas indicam a trajetória de uma partícula no seu bilhar análogo clássico. Figura retirada da referência [3].

Muitas das estruturas já investigadas demonstram que conjunto de autoestados se conectam com tais órbitas e, até onde se sabe, são mais frequentes sob altas energias [54]. Esta última afirmação é confirmada por nossos resultados anteriores para $k \in [1, 20]$ cujas famílias distribuem-se de maneira paralela e vertical no espaço de parâmetros $k \times \beta$. Dessa forma, para baixas energias e com variações angulares suficientemente pequenas, a morfologia da função de onda mantém-se uniformemente distribuída por todo o interior do contorno, que é resultado de uma dinâmica de autoestados que evolui numa estreita faixa de energia em relação a β .

O primeiro trabalho sobre essas órbitas foi proposto em 1987 por Eric J. Heller no seu artigo *Bound-State Eigenfunctions of Classically Chaotic Hamiltonian Scars of Periodic Orbits* [98]. Nele, mostra-se um efeito importante de órbitas periódicas instáveis de curto período nas autofunções dos sistemas classicamente caóticos.

Em nossos estudos, as cicatrizes surgem com frequência em autoestados que possuem uma dinâmica estreita em relação a variação dos ângulos internos do bilhar com a energia, como ilustrado na Fig. 3.16 (vamos adotar agora a denominação de “grupo” e não mais “família”, pois os autoestados são calculados em famílias diferentes). Neste espaço de parâmetros avaliamos a ocorrência de cicatrizes para um conjunto de ângulos $\beta \in [42^\circ, 45^\circ]$. No primeiro grupo A, os autoestados exibem funções de onda que acentuam a densidade de probabilidade ao longo de l_1 somado a um pico no vértice definido pelo ângulo β .

Devido ao maior intervalo de energia que estamos considerando, podemos identificar dois aspectos importantes na morfologia dos autoestados. O primeiro diz respeito a morfologia da função de onda que apresenta-se mais localmente distribuída, isto é, a distribuição espacial da função de onda em pequenos espaços no interior do bilhar é condicionada a inclinação da família na qual o autoestado é construído, de tal forma que quanto menor for o intervalo de β em relação a energia, maior será a concentração da função de onda em áreas espacialmente menores do bilhar. Vejamos, por exemplo, que o autoestado a1 possui função de onda mais localizada em relação ao seu outro autoestado a5 do mesmo grupo, pois este último é originado em uma família que evolui sob um maior intervalo de β em relação a k . O mesmo pode ser observado entre os autoestados b1 e b5 e entre c1 e c5. Tais afirmações podem ser reforçadas por análise quantitativa.

Vamos considerar um pequeno intervalo de número de onda em torno do autoestado a1 (indicado pelos pontos “•” na Fig. 3.16a, os demais pontos não serão inseridos para não poluir demasiadamente o gráfico), ou seja, $k_2^{(a1')} - k_1^{(a1')} = 101,175 - 101,133 = \Delta k^{(a1')} = 0,042$, com as suas geometrias correspondentes β , assim, $\beta_2^{(a1')} - \beta_1^{(a1')} = 43,995^\circ - 43,9575^\circ = \Delta\beta^{(a1')} = 0,0375$ (o sobrescrito ' é usado para diferenciar as coordenadas aqui inseridas das coordenadas próprias dos autoestados). Usando a relação trigonométrica da tangente para o triângulo retângulo, a inclinação aproximada da família em que o autoestado a1 é calculado é $\tan^{-1}(\Delta\beta^{(a1')}/\Delta k^{(a1')}) \approx 41,76^\circ$. Faremos o mesmo para o autoestado a5 usando a mesma técnica, logo, $k_2^{(a5')} - k_1^{(a5')} = 102,1 - 102,057 = \Delta k^{(a5')} = 0,043$ e $\beta_2^{(a5')} - \beta_1^{(a5')} = 44,8^\circ - 44,7525^\circ = \Delta\beta^{(a5')} = 0,0475$. Pelo cálculo da tangente inversa, a inclinação na qual a5 é calculado é $\tan^{-1}(\Delta\beta^{(a5')}/\Delta k^{(a5')}) \approx 47,84^\circ$. Repetimos a análise agora para os três autoestados b1, b3 e b5. Então temos, $k_2^{(b1')} - k_1^{(b1')} = 101,2695 - 101,2135 = \Delta k^{(b1')} =$

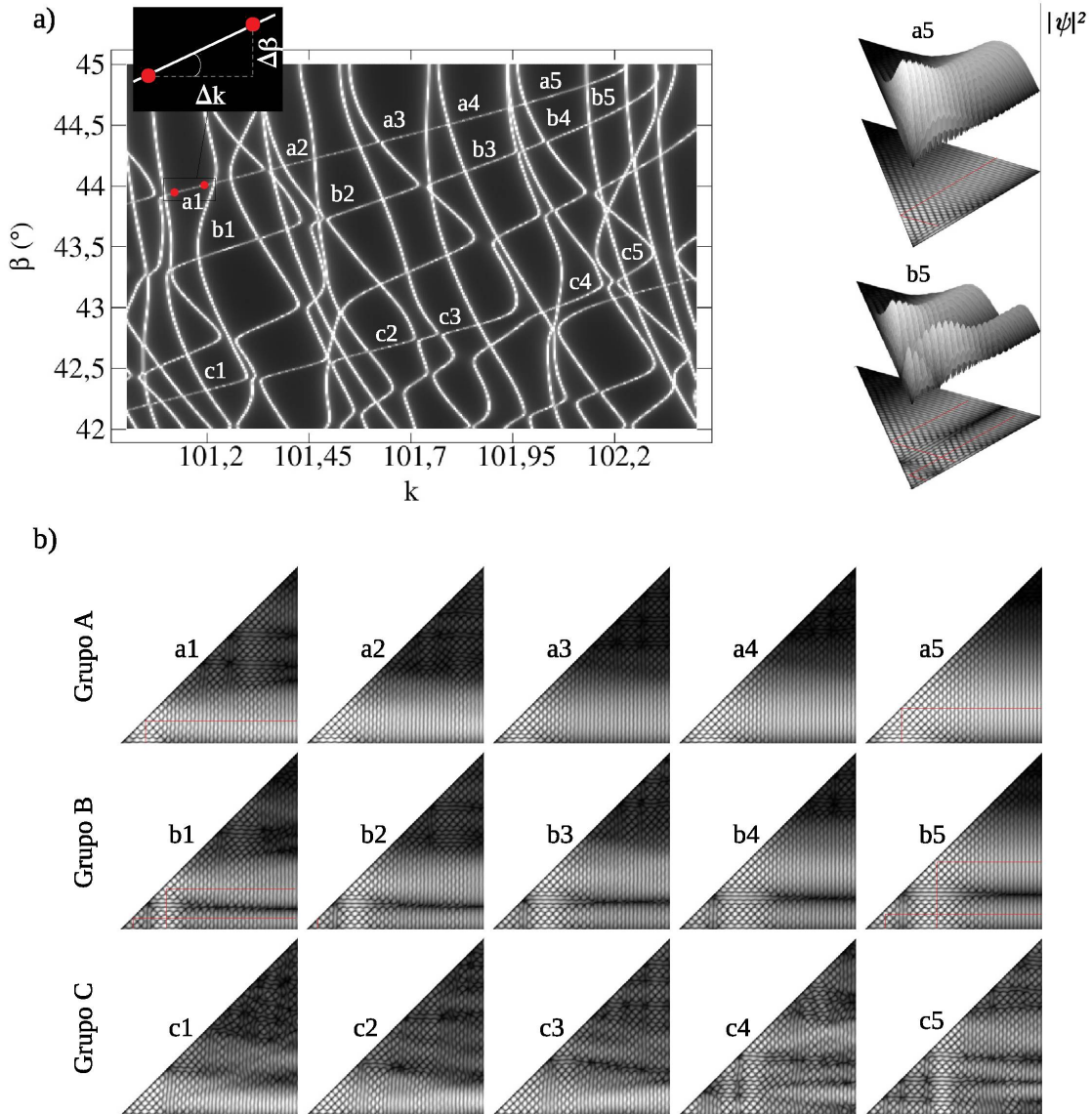


Figura 3.16: a) Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$. Ao lado é mostrado os autoestados a5 e b5 sob o ponto de vista tridimensional. As linhas coloridas indicam qualitativamente a trajetória de uma partícula no seu bilhar análogo clássico. b) Densidade de probabilidade da função de onda $|\psi|^2$ associada aos estados: **a1)** $k = 101,135$, $\beta = 43,96^\circ$; **a2)** $k = 101,44$, $\beta = 44,21^\circ$; **a3)** $k = 101,69$, $\beta = 44,2^\circ$; **a4)** $k = 101,86$, $\beta = 44,57^\circ$; **a5)** $k = 102,1$, $\beta = 44,8^\circ$; **b1)** $k = 101,235$, $\beta = 43,47^\circ$; **b2)** $k = 101,565$, $\beta = 44,82^\circ$; **b3)** $k = 101,905$, $\beta = 44,21^\circ$; **b4)** $k = 102,085$, $\beta = 44,44^\circ$; **b5)** $k = 102,185$, $\beta = 44,59^\circ$; **c1)** $k = 101,23$, $\beta = 42,35^\circ$; **c2)** $k = 101,645$, $\beta = 42,68^\circ$; **c3)** $k = 101,83$, $\beta = 42,83^\circ$; **c4)** $k = 102,14$, $\beta = 43,12^\circ$; **c5)** $k = 102,25$, $\beta = 43,31^\circ$.

0,056 e $\beta_2^{(b1')} - \beta_1^{(b1')} = 44,8^\circ - 44,7525^\circ = \Delta\beta^{(b1')} = 0,06$, logo, $\tan^{-1}(\Delta\beta^{(b1')}/\Delta k^{(b1')}) \approx 46,97^\circ$. Para b3 e b5, temos $\tan^{-1}(\Delta\beta^{(b3')}/\Delta k^{(b3')}) \approx 50,3^\circ$ e $\tan^{-1}(\Delta\beta^{(b5')}/\Delta k^{(b5')}) \approx 60,12^\circ$, respectivamente.

Pelos resultados acima, chegamos a conclusão de que o fato do autoestado a1 possuir morfologia mais localizada em relação a a5 é resultado da inclinação relativa entre as famílias de ambos, pois, $\tan^{-1}(\Delta\beta^{(a1')}/\Delta k^{(a1')}) < \tan^{-1}(\Delta\beta^{(a5')}/\Delta k^{(a5')})$. O mesmo vale para o grupo B, $\tan^{-1}(\Delta\beta^{(b1')}/\Delta k^{(b1')}) < \tan^{-1}(\Delta\beta^{(b3')}/\Delta k^{(b3')}) < \tan^{-1}(\Delta\beta^{(b5')}/\Delta k^{(b5')})$.

O segundo aspecto de importante nota se refere a quantidade de órbitas presentes em cada grupo. Por exemplo, no grupo A os autoestados possuem funções de onda que descrevem apenas uma órbita, enquanto no grupo B, os autoestados exibem morfologias descritas por duas órbitas. O mesmo padrão se repete para o grupo C onde as órbitas, apesar de menos evidentes, estão em maior número. Esta última observação é reforçada com a Fig. 3.17 onde avaliamos a existência de cicatrizes para $\beta \in [39^\circ, 42^\circ]$. Nesta região, pelos autoestados gerados no três grupos D, E e F, nota-se que as órbitas passam a ser indistinguíveis e a ocorrência de cicatrizes tende a desaparecer. Portanto, é concebível afirmar que uma determinada cicatriz exige certas condições específicas para existir. Uma das possíveis, e aqui observada, é que os autoestados necessariamente precisam ser construídos sob famílias que evoluem em estreitas faixas de geometria em relação a energia do sistema.

Em suma, de acordo com as discussões levantadas acima, podemos citar duas conclusões a respeito das cicatrizes existentes no bilhar triangular. A primeira: a distribuição da função de onda, ora mais localizada, ora menos, depende diretamente da inclinação da família na qual o autoestado é calculado. A segunda: a quantidade de órbitas presentes em um determinado autoestado não depende da inclinação da família na qual o autoestado é construído, mas sim, em qual grupo é construído (observe que $\tan^{-1}(\Delta\beta^{(b1')}/\Delta k^{(b1')}) < \tan^{-1}(\Delta\beta^{(a5')}/\Delta k^{(a5')})$, logo, b1 possui duas órbitas e a5 apenas uma).

3.1.4 Estatística dos níveis de energia

Nesta seção, vamos analisar a distribuição dos níveis de energia e obter a dinâmica para alguns β 's particulares. Antes de avaliarmos as distribuições (A.1) a (A.4) (Apêndice A) faremos a contagem de autoestados para que possamos comparar os dados analíticos e numéricos e então determinar a dinâmica mais apropriada ao sistema mediante cálculo da densidade de probabilidade $P(s)$.

Como sabemos, o bilhar triangular genérico não possui solução analítica. Por isso, compa-

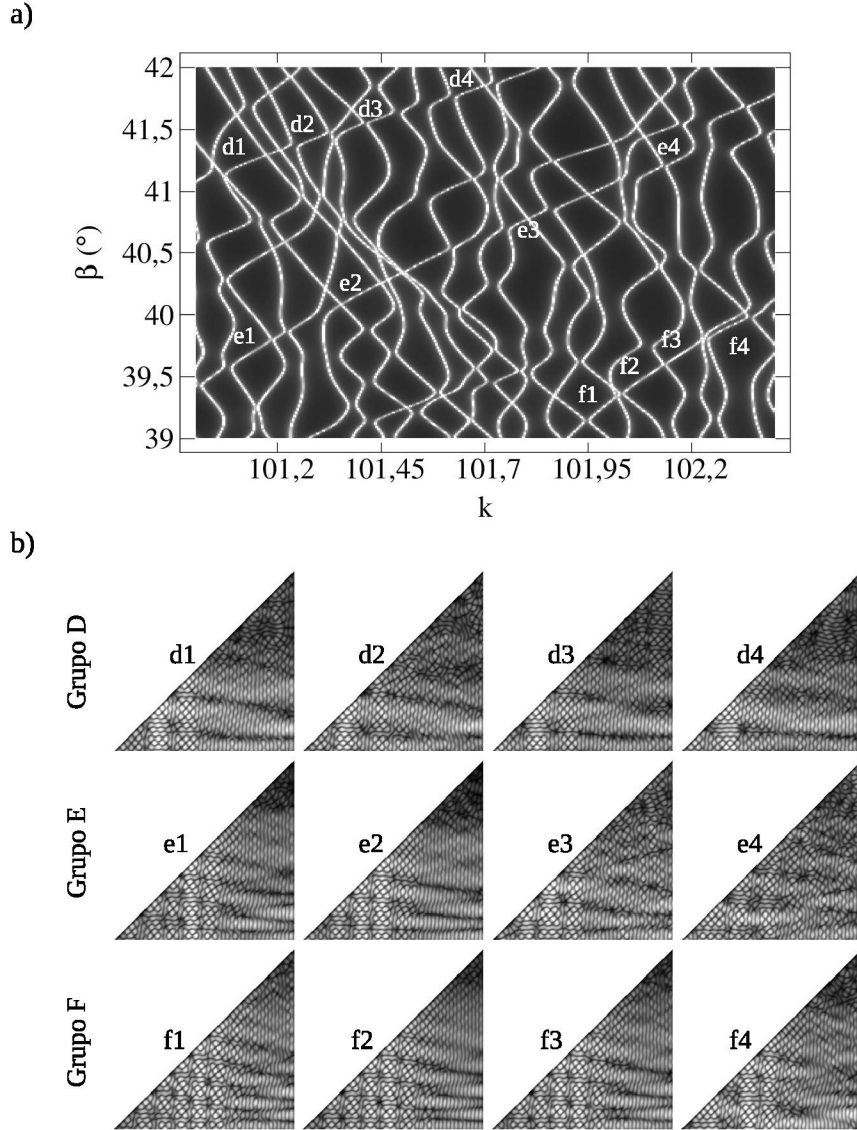


Figura 3.17: a) Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$. b) Densidade de probabilidade da função de onda $|\psi|^2$ associada aos estados: **d1)** $k = 101,122, \beta = 41,22^\circ$; **d2)** $k = 101,29, \beta = 41,43^\circ$; **d3)** $k = 101,451, \beta = 41,6^\circ$; **d4)** $k = 101,665, \beta = 41,81^\circ$; **e1)** $k = 101,122, \beta = 39,66^\circ$; **e2)** $k = 101,402, \beta = 40,177^\circ$; **e3)** $k = 101,78, \beta = 40,74^\circ$; **e4)** $k = 102,169, \beta = 41,25^\circ$; **f1)** $k = 101,99, \beta = 39,26^\circ$; **f2)** $k = 102,085, \beta = 39,49^\circ$; **f3)** $k = 102,176, \beta = 39,69^\circ$; **f4)** $k = 102,305, \beta = 39,93^\circ$.

ramos os autovalores obtidos pelo nosso método com a fórmula de Weyl [59,99], que fornece o número médio de estados quânticos com energia menor ou igual a E [100],

$$\langle N(E) \rangle = \frac{1}{4\pi} (AE - P\sqrt{E} + K), \quad (3.1)$$

onde A e P são a área e o perímetro do bilhar, respectivamente, e $E = k^2$. K é uma constante que carrega as informações sobre a natureza topológica do bilhar e, por simplicidade, vamos desconsiderá-la.

Fazendo $\tilde{E}_n = \langle N(E_n) \rangle$ em (3.1) (avaliamos a equação (3.1) para cada E_n para obter as novas energias \tilde{E}_n), “desdobramos” o espectro por meio de uma linearização do conjunto de energias para que o espaçamento médio destas seja uniforme e igual a 1 no intervalo do espectro considerado. A Fig. 3.18 mostra a função de escada espectral resultante de $\langle N(E) \rangle$ para os primeiros 1280 níveis de energia do bilhar triangular reto nas geometrias fora da linha regular. Nossos resultados mostram-se eficazes para ângulos que estão suficientemente distantes do triângulo regular ($45^\circ, 45^\circ, 90^\circ$). Tal aspecto se confirma ao comparar a função de escada para $\beta = 44,0^\circ$ e $\beta = 44,8^\circ$, por exemplo. Este último mostra divergência entre os dados teóricos obtidos pela equação de Weyl, com os dados numéricos calculados pelo MCP. A razão disso se deve ao fato de que o triângulo ($45^\circ, 45^\circ, 90^\circ$) possui estados degenerados, e estes quando muito próximos de $\beta = 45,0^\circ$ não se separam imediatamente diante de ligeiras variações da geometria.

Podemos entender a discussão acima da seguinte forma: os dois parâmetros dos quais nosso método dispõe para viabilizar a precisão das soluções são o $d_k = (k_f - k_i)/n_k$, que define o comprimento do segmento de energia calculado sobre um intervalo $k_f - k_i$ dividido em n_k segmentos de comprimento d_k , e a razão $\mu = \Delta/\lambda$, que define a relação entre o comprimento da onda λ incidente ao sistema e o comprimento do segmento Δ da barreira. A diminuição numérica destes dois parâmetros resulta no aumento da precisão dos cálculos. Contudo, ambos estão conectados inversamente a dimensão N da matriz T , em que quanto maior N , maior a exigência computacional. O primeiro parâmetro d_k tem a tarefa de dissociar os níveis de energia em qualquer região do espaço de fase, e o segundo, μ , controla a precisão numérica deslocando o espectro na tentativa de aproximar as energias de um valor ressonante mais próximo do exato.

Em alguns pontos nos quais ocorre a convergência entre famílias, os autoestados aproximam-se de tal forma que o espaçamento entre níveis vizinhos é menor que o d_k atribuído ao método, assim o programa conta apenas um autoestado ao invés de dois ou mais. Poderíamos sanar este problema imputando maior precisão ao valor numérico das energias por meio da deter-

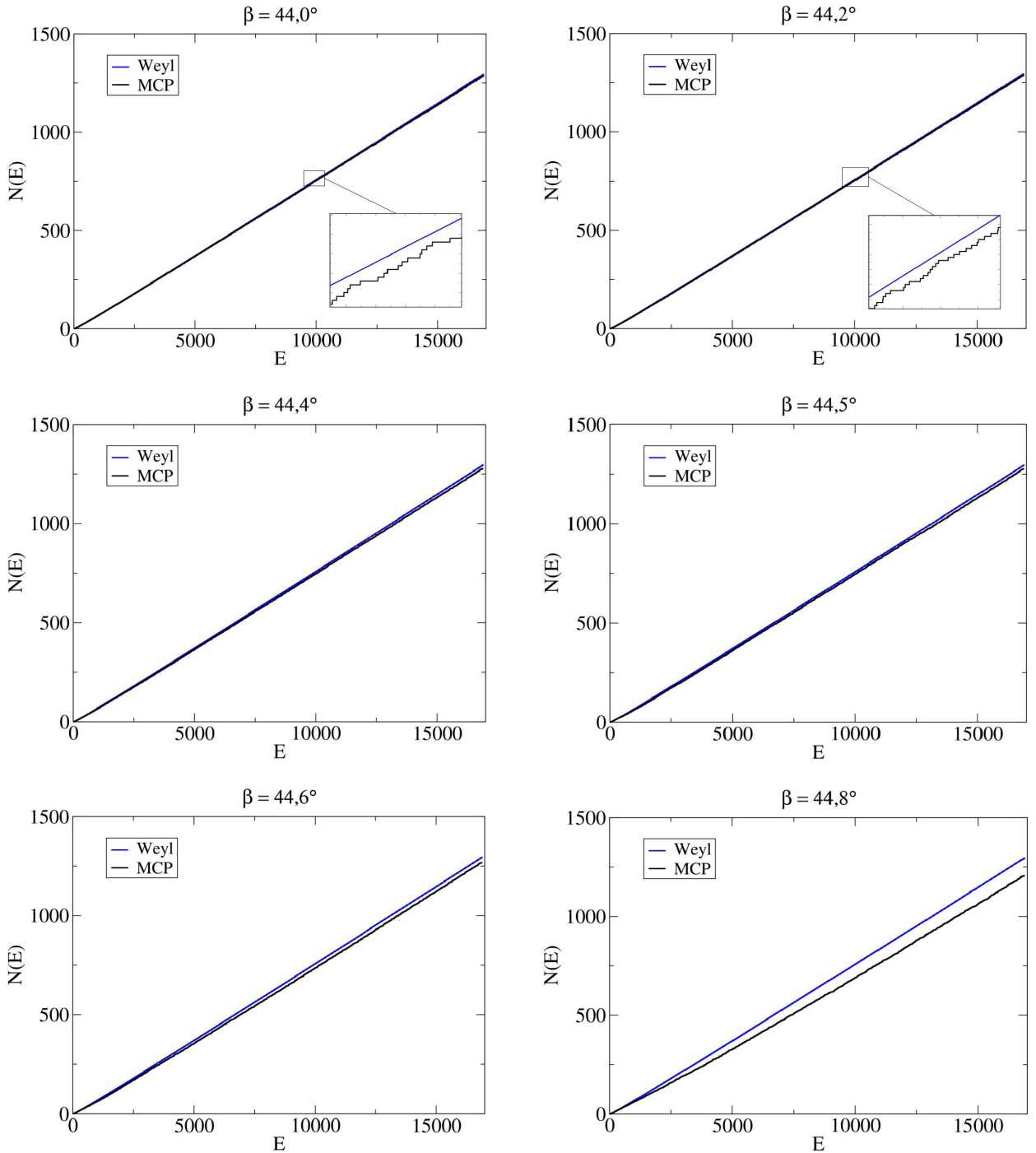


Figura 3.18: Função de escada espectral dos primeiros 1280 níveis de energia para ângulos compreendidos nas proximidades da região regular do triângulo. As curvas representam as soluções analíticas e numéricas por (3.1) (Weyl) e MCP, respectivamente.

minuição de μ e d_k menores, mas pela equação (2.60), vemos que a dimensão da matriz cresce inversamente tanto com o valor de μ quanto de d_k .

A Fig. 3.19a traduz graficamente a discussão do parágrafo anterior. Nela é feita a

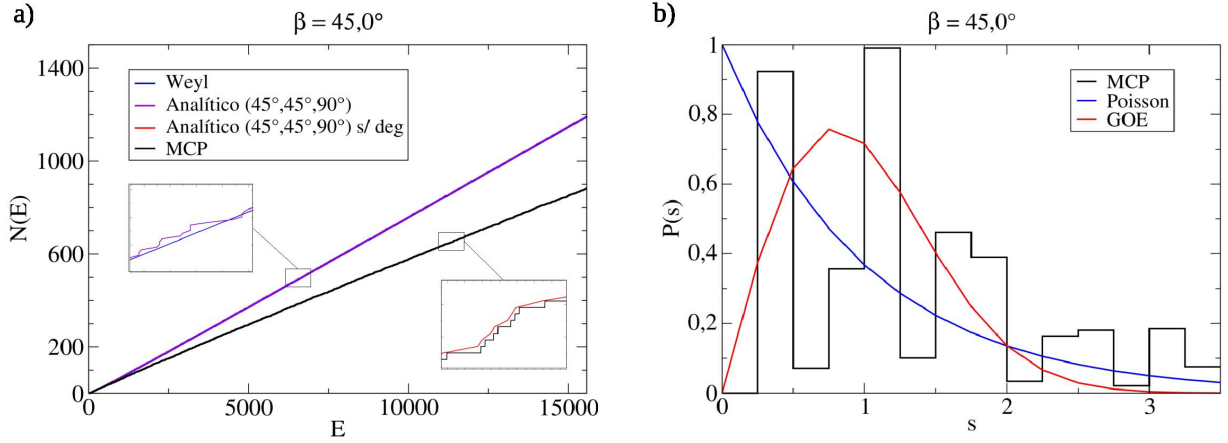


Figura 3.19: a) Função de escada espectral mediante resultados analíticos (usando Weyl-(3.1) e (3.2)) e numéricos via MCP. A legenda “s/ deg” indica autovalores de (3.2) com apenas um autoestado por degenerescência. b) Distribuição dos níveis de energia $P(s)$ para as primeiras 953 autoenergias do triângulo $(45^\circ, 45^\circ, 90^\circ)$. As linhas contínuas representam as distribuições de Poisson e Wigner (GOE).

contagem de autoestados usando duas soluções analíticas para o triângulo $(45^\circ, 45^\circ, 90^\circ)$. A primeira usando a equação de Weyl descrita por (3.1) e a segunda descrita pela equação de autovalores de energia que define o espectro analítico do triângulo $(45^\circ, 45^\circ, 90^\circ)$ [52, 101],

$$k_{m,n}^{(A)} = \pi \sqrt{\frac{m^2}{l_1^2} + \frac{n^2}{l_2^2}}, \quad (3.2)$$

com $m > n$ e $l_1 = l_2$. Dados relativos a (3.1) e (3.2) indicam que há perda na contagem de autoestados pelo MCP. No entanto, estes autoestados se referem as degenerências do triângulo, em que o espaçamento médio entre estados vizinhos é $s = 0$. Para que a identificação destas degenerescências pelo MCP fosse possível, deveríamos atribuir $d_k = 0$ e por consequência $n_k \rightarrow \infty$, o que obviamente inviabilizaria a aplicação numérica. Mas quando removemos as degenerências da solução analítica, mantendo apenas um autoestado por energia, a contagem pelo MCP passa a ter uma boa margem de aproximação com o método analítico, como visto em detalhes na Fig. 3.19a. A Fig. 3.19b exibe a densidade de probabilidade $P(s)$ obtida via MCP para as primeiras 953 autoenergias do triângulo $\beta = 45^\circ$. Assim como esperávamos, a ausência de estados degenerados na contagem numérica resulta em uma visível divergência no aspecto da densidade de probabilidade $P(s)$ em relação aos dados já descritos

na literatura, onde é mostrado que o bilhar $(45^\circ, 45^\circ, 90^\circ)$ possui dinâmica associada a uma distribuição de Poisson [52, 56].

De qualquer forma, a existência de estados degenerados em uma determinada geometria não compromete o desenvolvimento da nossa pesquisa, tendo em vista que neste trabalho a função de onda é o principal objeto de estudo. Além disso, a função de onda de estados degenerados pode ser obtida mediante a escolha correta da simetria do sistema através do ângulo de incidência θ . Como visto, por exemplo, nas figuras 3.8 e 3.9 nos autoestados ab calculados sobre $\beta = 45^\circ$.

Na Fig. 3.20 mostramos a densidade de probabilidade $P(s)$ em função do espaçamento médio de níveis de energia para alguns valores de β . As linhas contínuas se referem a distribuições que mais se aproximam dos histograma obtidos pelo MCP. Em todos os casos que observamos, há uma forte tendência para a distribuição de probabilidade do tipo Berry-Robnik com variações nos parâmetros de ajuste ρ_1 e ρ_2 , sendo $\rho_1 + \rho_2 = 1$. É possível interpretar tais parâmetros como uma proporção percentual intermediária entre as distribuições de Poisson e Wigner (GOE). Vejamos por exemplo o caso $\beta = 44,0^\circ$ em que $\rho_1 = 0,38$ e $\rho_2 = 0,62$. Podemos aferir que nessa geometria em particular, a estatística de níveis é resultado de uma distribuição de probabilidade $P(s)$ intermediária com 38% do tipo Poisson e 62% GOE.

3.2 Análise de famílias para $\beta \in [29^\circ, 31^\circ]$

Nesta seção vamos mostrar os resultados obtidos para o triângulo cuja geometria varia com $\beta \in [29^\circ, 31^\circ]$. A análise das propriedades da matriz $T(i, j)$ e a morfologia dos autoestados associada as famílias são feitas sob as mesmas regiões do espectro. Primeiramente para uma região baixa e posteriormente para uma região alta. As dimensões das paredes mantém-se com $l_1 \in [1,9, 1,82]$ e $l_2 \in [1,05, 1,09]$.

3.2.1 Soluções $\psi(x, y)$ para $k \in [1, 20]$

Na Fig. 3.21a temos a densidade de autoestados no intervalo $k \in [1, 20]$. As famílias descrevem uma dinâmica que se assimila ao que é observado quando $\beta \in [44^\circ, 46^\circ]$ da Fig. 3.3.

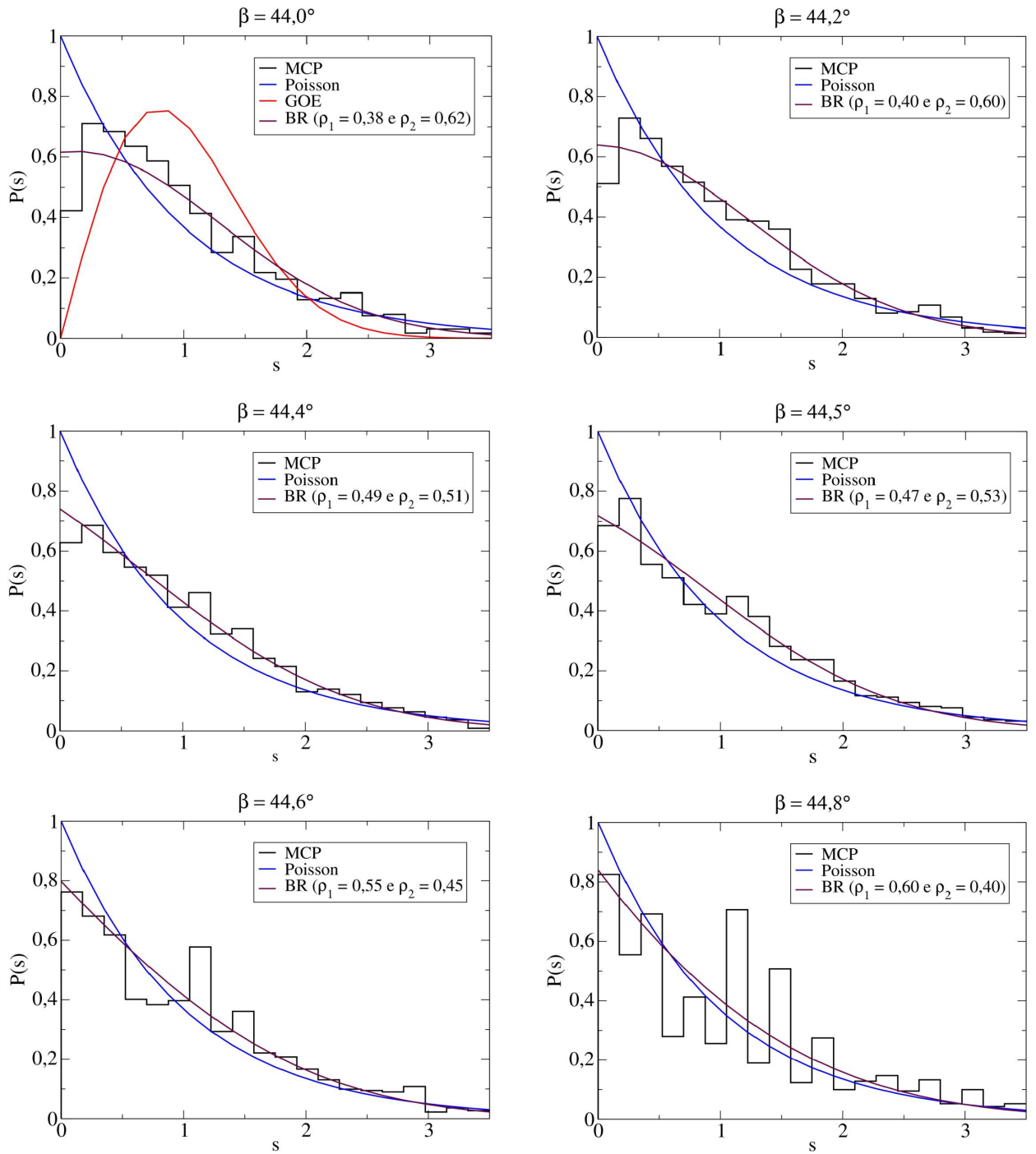


Figura 3.20: Densidade de probabilidade $P(s)$ para ângulos $\beta = 44,0^\circ$, $\beta = 44,2^\circ$, $\beta = 44,4^\circ$, $\beta = 44,5^\circ$, $\beta = 44,6^\circ$ e $\beta = 44,8^\circ$. As linhas contínuas representam $P(s)$ de Poisson, Wigner (GOE) e Berry-Robnik (BR). Os histogramas são montados numericamente via MCP.

Porém, mesmo situando-se na região em que os níveis de energia possuem comprimento de onda grande, os autoestados calculados para qualquer β diferem ligeiramente na morfologia

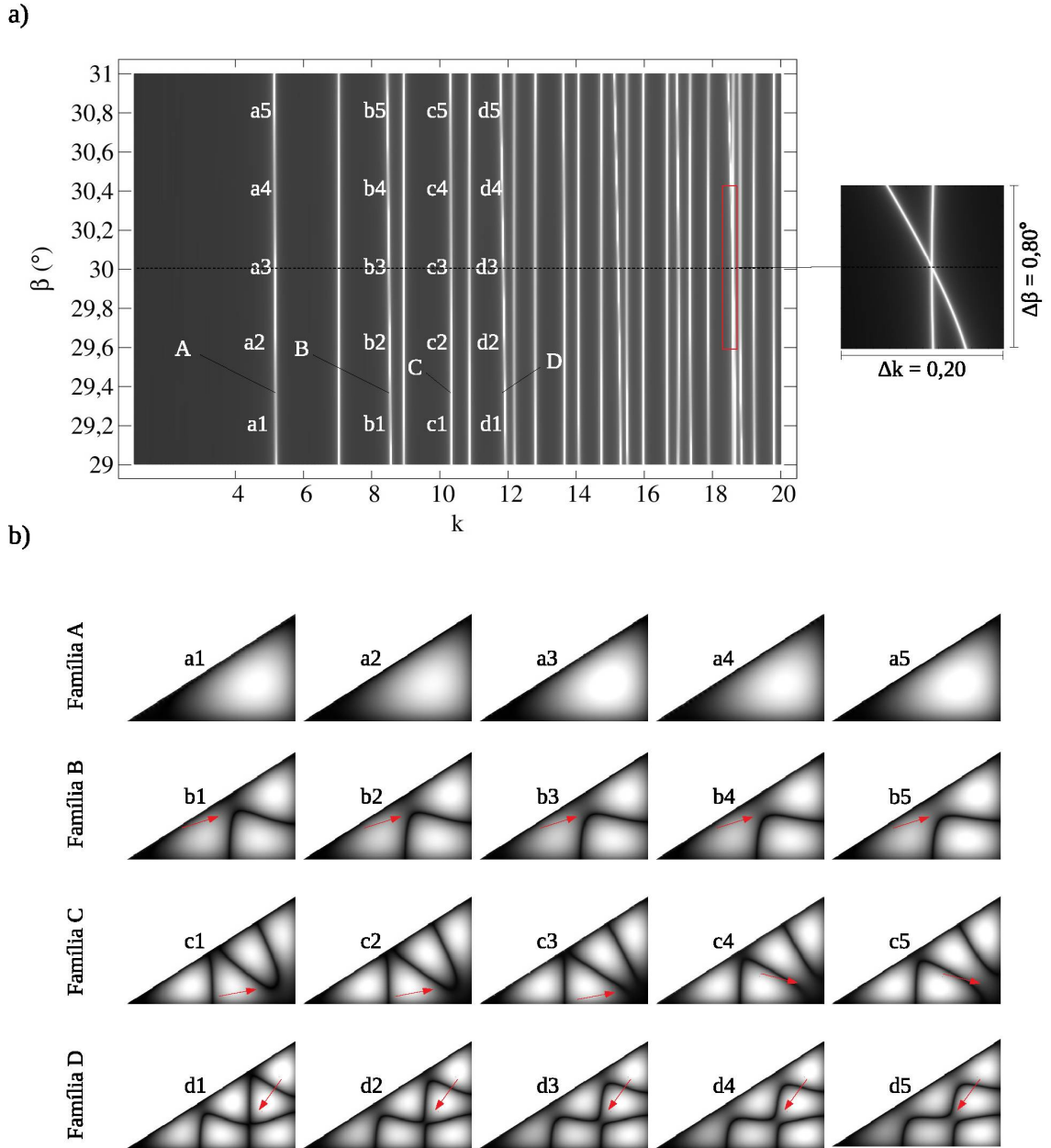


Figura 3.21: a) Gráfico de densidade $\langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$ em função do espaço de parâmetros $k \times \beta$. Densidade de probabilidade da função de onda $|\psi|^2$ com $k^{(a1)} = 5,211$, $k^{(a2)} = k^{(a3)} = 5,18$; $k^{(a4)} = k^{(a5)} = 5,148$; $k^{(b1)} = 8,568$; $k^{(b2)} = 8,536$; $k^{(b3)} = k^{(b4)} = 8,505$; $k^{(b5)} = 8,473$; $k^{(c1)} = k^{(c2)} = k^{(c3)} = 10,341$; $k^{(c4)} = k^{(c5)} = 10,31$; $k^{(d1)} = 11,925$; $k^{(d2)} = 11,893$; $k^{(d3)} = 11,861$; $k^{(d4)} = 11,83$; $k^{(d5)} = 11,798$. As setas indicam variações na morfologia da função de onda na transição de um autoestado para outro.

da função de onda. As setas destacadas na Fig. 3.21b indicam pontos em que é possível observar tais alterações. Na família B, por exemplo, é possível ver um achatamento na região que

contém um mínimo da função de onda próximo a mediana da hipotenusa. Em C, o terceiro ponto de máximo, contado a partir do vértice de β , alonga-se em direção ao ângulo reto do triângulo. Na família D, há um ponto na região central do bilhar em que um nó da função de onda separa-se para formar dois nós distintos. Estas pequenas variações para os primeiros autoestados podem ser interpretadas devido a maior sensibilidade da matriz T à variações dos ângulos internos do sistema, tendo em vista que nesse caso as paredes l_1 e l_2 formam um bilhar com área relativamente menor do que o caso discutido na seção anterior.

De acordo com o espectro analítico de autovalores do triângulo $(30^\circ, 60^\circ, 90^\circ)$ dada pela equação (2.69), a primeira degenerescência surge com $k_{10,1}^{(A)} = 18,67$, que corresponde a vigésima autoenergia. Este resultado também é obtido numericamente e pode ser visto em detalhes ao lado Fig. 3.21a para o número de onda $k = 18,61$ que também corresponde a vigésima autoenergia.

3.2.2 Soluções $\psi(x, y)$ para $k \in [100, 102]$

Vamos agora determinar as soluções do triângulo para altas energias. A Fig. 3.22 mostra $\langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$ em função do espaço de parâmetros $k \times \beta$ com o espectro de energia no intervalo $k \in [100, 102]$. Pela disposição das famílias observamos novamente o aspecto de evolução

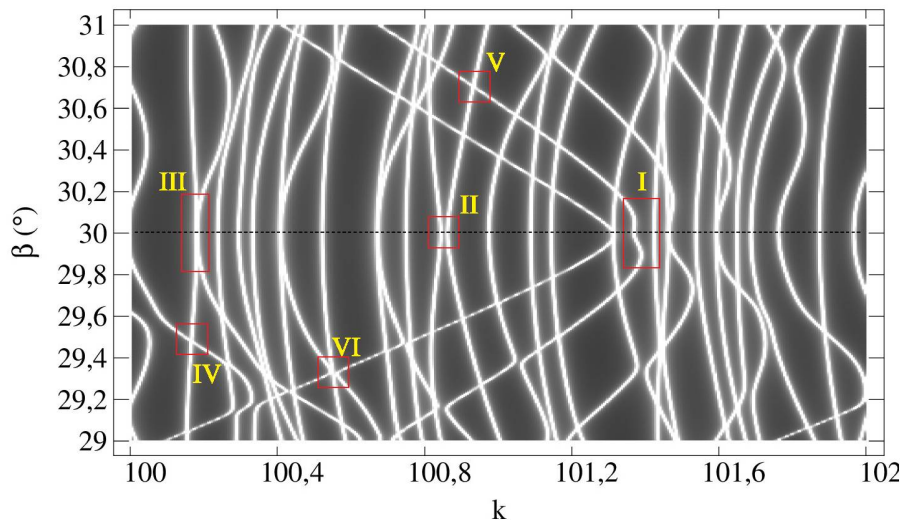


Figura 3.22: Gráfico de densidade $\langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$ em função do espaço de parâmetros $k \times \beta$. A linha pontilhada horizontal forma o bilhar triangular $(30^\circ, 60^\circ, 90^\circ)$. As regiões I a VI serão ampliadas para uma discussão mais detalhada da função de onda.

sob forte sensibilidade a variação dos ângulos internos. No bilhar definido pela geometria regular $\beta = 30^\circ$ (linha média horizontal), as famílias se sobrepõem sobre uma mesma energia e geometria, e o resultado é a ocorrência de estados degenerados [52, 102]. Quando quebramos a simetria do sistema com variações nos ângulos internos, as famílias passam a ter comportamento convergente. Para uma discussão mais detalhada de cruzamentos e repulsões, bem como a morfologia associada aos autoestados, selecionamos as regiões I a VI do espaço de fase para ampliação.

A Fig. 3.23 mostra com detalhes uma porção das famílias contidas em I, que evoluem na região de transição entre um bilhar regular e irregular. Os autoestados a_3 e b_3 são calculados sobre o triângulo regular ($30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$). Os demais são calculados no triângulo irregular. A função de onda associada aos autoestados da família A apresentam semelhanças em sua morfologia, excetuando algumas regiões da área interna em que vemos pequenas concavidades. Por exemplo, as setas da Fig. 3.23b indicam uma pequena área de nó que se desloca em direção a aresta lateral l_2 à medida que β é deslocado, estando situada na mediana de l_1 definida por $x = l_1/2$ quando calculada em $\beta = 30^\circ$. O intervalo de transição em estudo não oferece ao bilhar a mesma simetria que é vista no caso anterior (Fig. 3.6). Embora os autoestados a_1 e a_4 , por exemplo, sejam construídos em geometrias igualmente espaçadas a partir da linha de simetria $\beta = 30,0^\circ$, os seus números de onda possuem uma diferença numérica de $k^{(a_4)} - k^{(a_1)} = 0,018$. Os autoestados gerados em B também apresentam semelhança na morfologia da função de onda, em especial devido a ausência de fortes variações da matriz T diante da dependência dos seus parâmetros k e β .

O caso descrito acima exhibe um comportamento atípico a respeito da família A, pois, como sabemos, um conjunto de autoestados (uma família) possui a tendência de sustentar a morfologia da função de onda quando a família evolui em linha reta. A tendência é mantida até que um determinado autoestado de uma família passe a interagir com outro autoestado de outra família, assim uma repulsão ocorre e a morfologia entre eles é invertida. Mas de acordo com a evolução da família A, é possível observar que próximo ao bilhar $\beta = 29,9^\circ$ a família é defletida, assim como ocorre na região que descreve o bilhar $\beta = 30,05^\circ$. No entanto, os autoestados de B não indicam que ocorre qualquer inversão da morfologia com os estados de A. Logo, tal característica sugere que as famílias A e B não possuem qualquer

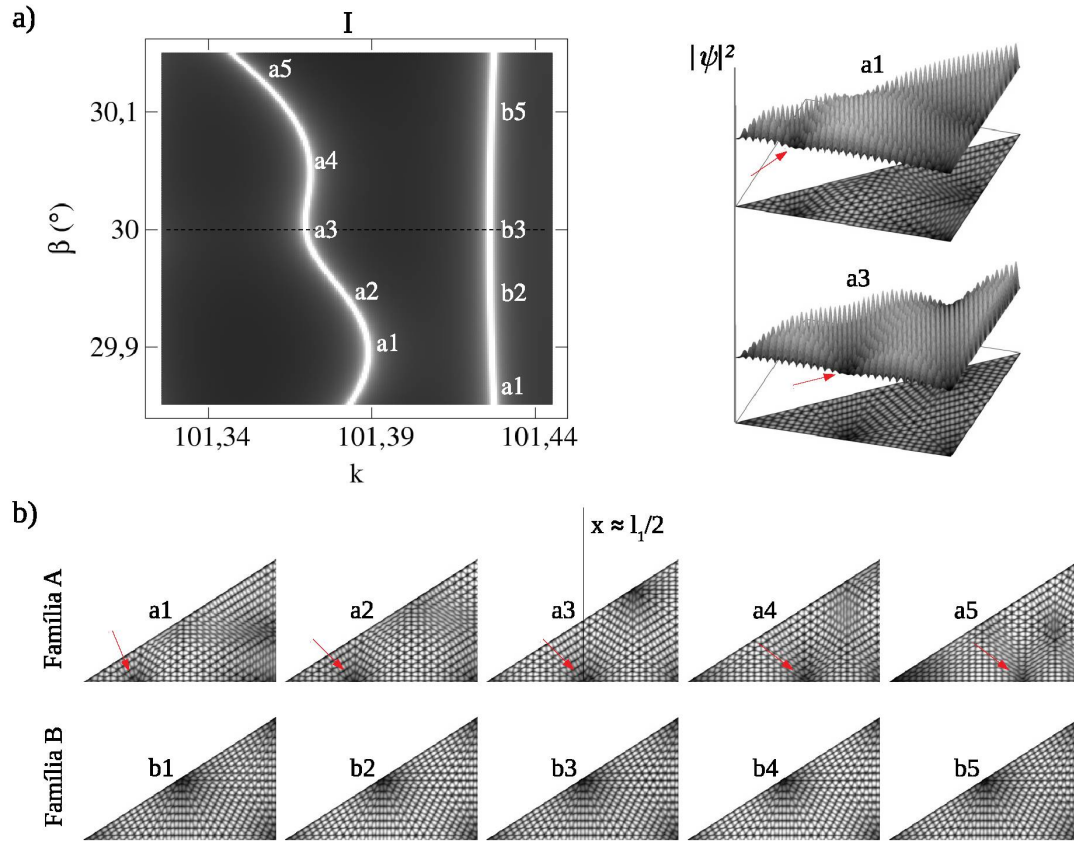


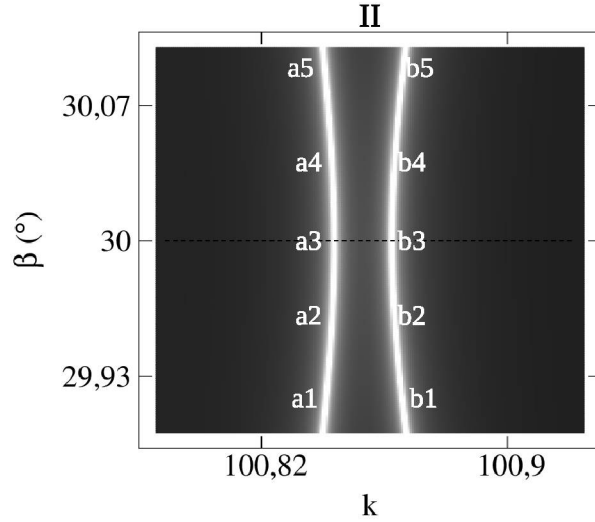
Figura 3.23: a) Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$ da região I. Ao lado são exibidos os estados a1 e a3 em três dimensões. b) Densidade de probabilidade da função de onda $|\psi|^2$ associada aos estados: **a1)** $k = 101,389$, $\beta = 29,89^\circ$; **a2)** $k = 101,38$, $\beta = 29,95^\circ$; **a3)** $k = 101,369$, $\beta = 30,0^\circ$; **a4)** $k = 101,371$, $\beta = 30,05^\circ$; **a5)** $k = 101,354$, $\beta = 30,13^\circ$; **b1)** $k = 101,427$, $\beta = 29,86^\circ$; **b2)** $k = 101,426$, $\beta = 29,95^\circ$; **b3)** $k = 101,425$, $\beta = 30,0^\circ$; **b4)** $k = 101,426$, $\beta = 30,05^\circ$; **a5)** $k = 101,426$, $\beta = 30,1^\circ$. As setas indicam flutuações na distribuição espacial da função de onda com a variação da geometria.

tipo de interação, apesar das nítidas variações na dinâmica da família A.

As regiões seguintes II e III, mostradas nas figuras 3.24 e 3.25, também são regiões de transição do bilhar irregular para o regular. Nos autoestados das famílias A e B em II, notamos que a função de onda não apresenta inversão na sua morfologia como com frequência ocorre em regiões de interação. Considerando ainda que não há ocorrência de degenerescência ou equivalente superposição de autoestados, podemos afirmar que nesta região do espaço de fase as famílias não possuem qualquer tipo de interação, apesar da aparente aproximação que ocorre entre ambas na linha média horizontal que define o bilhar ($30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$).

Na região III mostrada na Fig. 3.25, as famílias interagem em $\beta = 30^\circ$ gerando os auto-

a)



b)

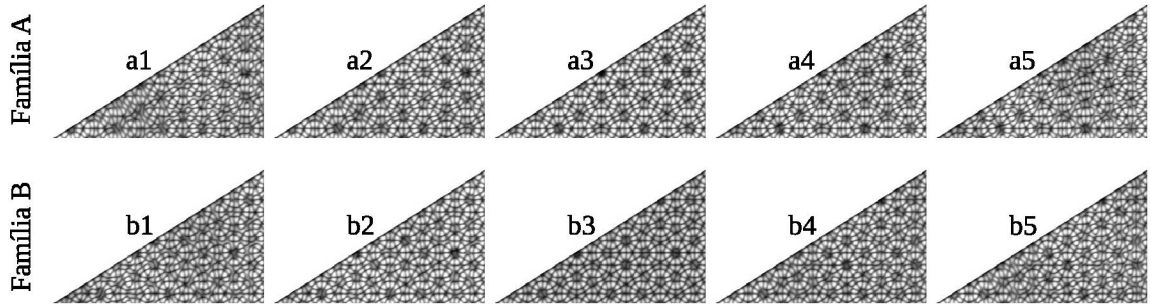


Figura 3.24: a) Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$ da região II. b) Densidade de probabilidade da função de onda $|\psi|^2$ associada aos estados: **a1)** $k = 100,841, \beta = 29,91^\circ$; **a2)** $k = 100,843, \beta = 29,96^\circ$; **a3)** $k = 100,843, \beta = 30,0^\circ$; **a4)** $k = 100,843, \beta = 30,03^\circ$; **a5)** $k = 100,841, \beta = 30,08^\circ$; **b1)** $k = 100,865, \beta = 29,92^\circ$; **b2)** $k = 100,864, \beta = 29,96^\circ$; **b3)** $k = 100,862, \beta = 30,0^\circ$; **b4)** $k = 100,863, \beta = 30,04^\circ$; **b5)** $k = 100,865, \beta = 30,08^\circ$.

estados degenerados ab, os quais possuem a mesma energia e geometria, mas com diferentes ângulos de ressonância θ . Ainda é possível identificar pequenas variações na morfologia da função de onda dos autoestados nas duas famílias. Mesmo que a família A apresente menor sensibilidade a variação dos ângulos internos, os seus autoestados produzem modificações na estrutura da função de onda como indicados pelas setas nos autoestados a1 e a4. Nota-se que na região do bilhar próxima ao vértice que compreende β , surge uma pequena região escura que caracteriza pontos de mínimos da função de onda. É importante mencionar que devido a inexistência de simetria entre as regiões acima e abaixo do bilhar $\beta = 30^\circ$, os autoestados a1

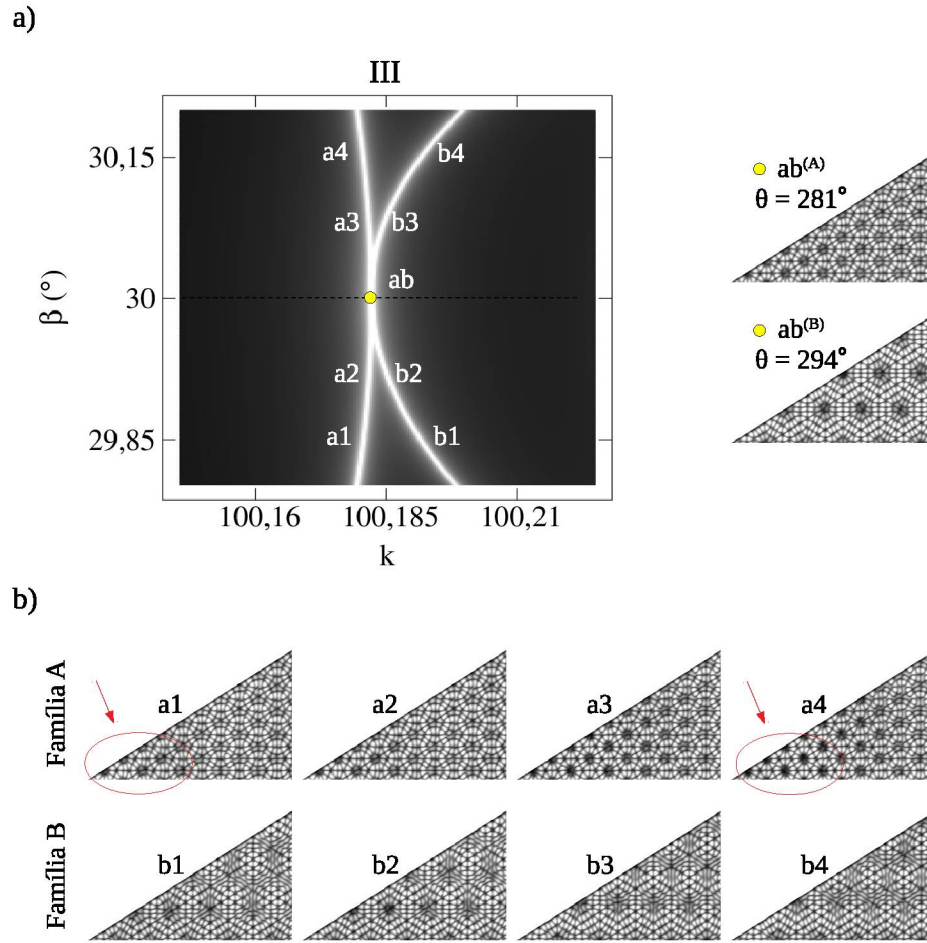


Figura 3.25: a) Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$ da região III. b) Densidade de probabilidade da função de onda $|\psi|^2$ associada aos estados: **a1)** $k = 100, 18, \beta = 29, 85^\circ$; **a2)** $k = 100, 181, \beta = 29, 9^\circ$; **a3)** $k = 100, 181, \beta = 30, 1^\circ$; **a4)** $k = 100, 18, \beta = 30, 15^\circ$; **b1)** $k = 100, 191, \beta = 29, 85^\circ$; **b2)** $k = 100, 186, \beta = 29, 9^\circ$; **b3)** $k = 100, 186, \beta = 30, 1^\circ$; **b4)** $k = 100, 192, \beta = 30, 15^\circ$; **ab)** $k = 100, 182, \beta = 30, 0^\circ$.

e a4, por exemplo, cujo $\beta^{(a1)} = 30^\circ - 0, 15^\circ$ e $\beta^{(a4)} = 30^\circ + 0, 15^\circ$ estão deslocados em mesmo módulo em relação a linha $\beta = 30^\circ$, não apresentam a mesma morfologia mediante a troca $l_1 \leftrightarrow l_2$ como ocorre para o caso de transição $\beta \in [44^\circ, 46^\circ]$. Este mesmo comportamento é observado na família B, a qual também apresenta oscilações na estrutura da função de onda.

Vamos agora avaliar o comportamento das famílias diante de variações da geometria que caracteriza bilhares irregulares. A Fig. 3.26a mostra uma repulsão de níveis na região delimitada por IV da Fig. 3.22. Os gráficos tridimensionais ao lado mostram novamente a influência da inclinação da família no aspecto dos autoestados. As autofunções associadas aos autoestados a3, a4, b1 e b2 mostram que uma partícula em interação com essas geometrias possui

maior probabilidade de ser detectada ao longo da aresta l_2 . Neste caso, apesar da morfologia sugerir uma dinâmica periódica, de acordo com a distribuição espacial das autofunções nas regiões de inclinação, não há ocorrência de cicatrizes. Para os demais estados a_1 , a_2 , b_3 e b_4 , a distribuição espacial é aproximadamente uniforme em toda a área do bilhar. A inversão da morfologia ocorre na região de convergência mediante as trocas $a_2 \rightarrow b_3$ e $b_2 \rightarrow a_3$.

Na Fig. 3.27a temos em detalhes a região V, na qual duas famílias se repelem após interação (as cores da repulsão ampliada acima do gráfico foram invertidas para melhorar a visualização). Neste intervalo, identificamos as primeiras cicatrizes provenientes das geometrias $\beta \in [29^\circ, 31^\circ]$. Os autoestados calculados sobre as famílias em evolução diagonal

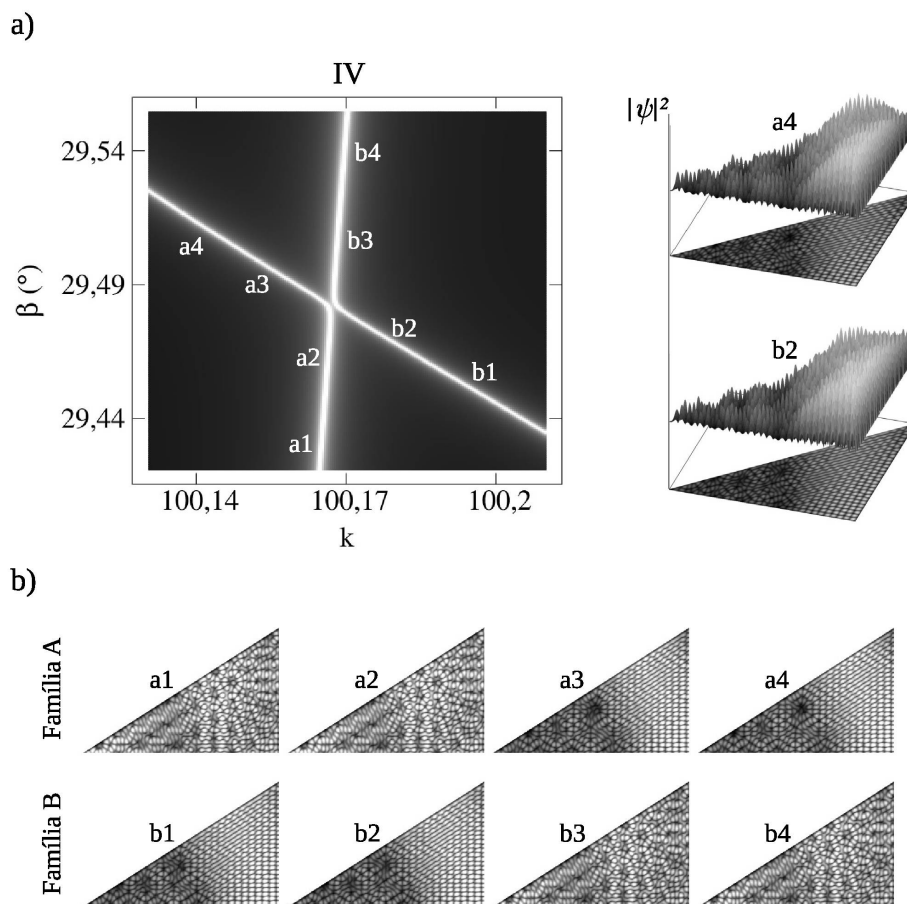


Figura 3.26: a) Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$ da região IV. Ao lado são plotados a_4 e b_2 em três dimensões. b) Densidade de probabilidade da função de onda $|\psi|^2$ associada aos estados: **a1)** $k = 100, 165$, $\beta = 29, 43^\circ$; **a2)** $k = 100, 166$, $\beta = 29, 46^\circ$; **a3)** $k = 100, 155$, $\beta = 29, 49^\circ$; **a4)** $k = 100, 144$, $\beta = 29, 5^\circ$; **b1)** $k = 100, 194$, $\beta = 29, 45^\circ$; **b2)** $k = 100, 18$, $\beta = 29, 467^\circ$; **b3)** $k = 100, 168$, $\beta = 29, 5^\circ$; **b4)** $k = 100, 169$, $\beta = 29, 53^\circ$.

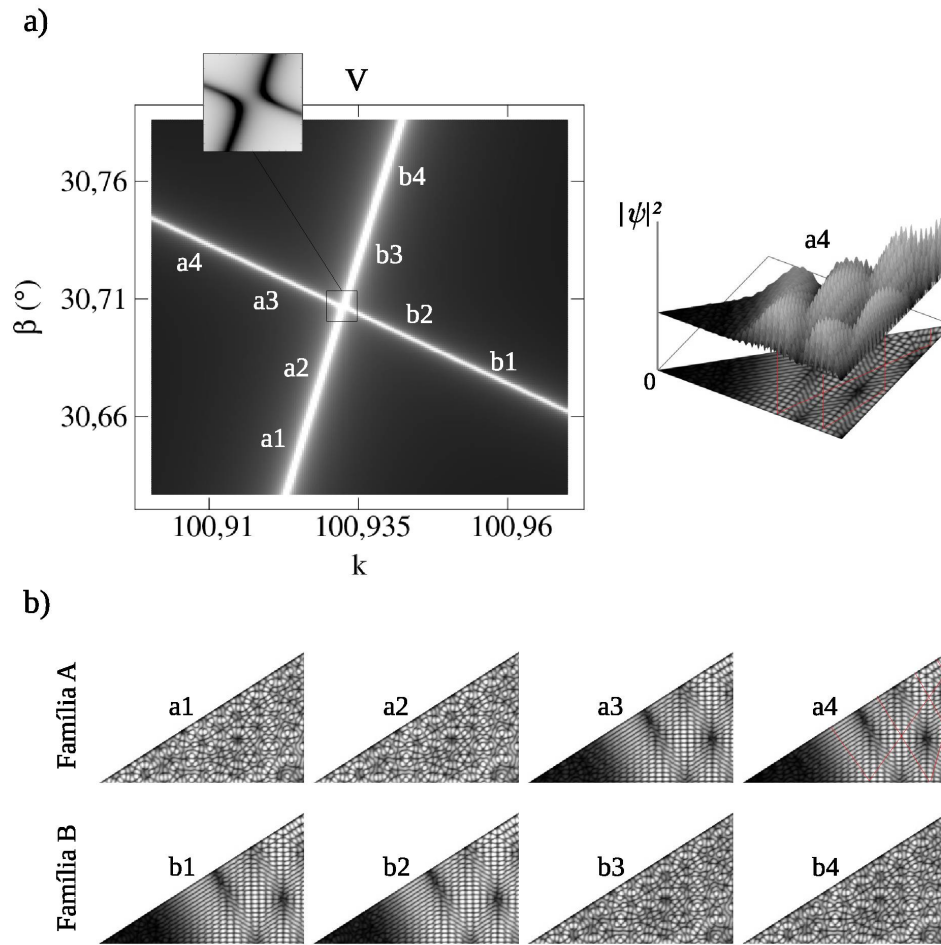


Figura 3.27: a) Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$ da região V. Ao lado é plotado a4 sob ponto de vista tridimensional. b) Densidade de probabilidade da função de onda $|\psi|^2$ associada aos estados: **a1**) $k = 100,926$, $\beta = 30,65^\circ$; **a2**) $k = 100,929$, $\beta = 30,67^\circ$; **a3**) $k = 100,921$, $\beta = 30,71^\circ$; **a4**) $k = 100,909$, $\beta = 30,73^\circ$; **b1**) $k = 100,96$, $\beta = 30,67^\circ$; **b2**) $k = 100,945$, $\beta = 30,69^\circ$; **b3**) $k = 100,936$, $\beta = 30,74^\circ$; **b4**) $k = 100,94$, $\beta = 30,77^\circ$.

(com grande variação de k em relação a β) a3, a4, b1 e b2, mostram que as funções de onda apresentam morfologias que descrevem uma partícula sob dinâmica periódica, caracterizando uma cicatriz. A dinâmica no análogo clássico é descrita qualitativamente pela trajetória em linhas vermelhas da Fig. 3.27b. Mencionamos anteriormente que uma autofunção não necessariamente deve localizar-se nas extremidades do bilhar quando seus autoestados evoluem diagonalmente. Para o tipo de interação deste caso, a cicatriz desenvolve-se por uma área mais ampla do bilhar. A razão da periodicidade ocorrer próxima a parede l_2 é explicada em decorrência da variação inversa dos valores de k em função de β na evolução dos autoestados.

A Fig. 3.28a mostra a evolução tripla de famílias que interagem na região VI da Fig. 3.22.

Diferentemente das regiões em que analisamos até o momento, a região VI exibe a família B que evolui sem aparente interação com as demais famílias A e C. É possível verificar

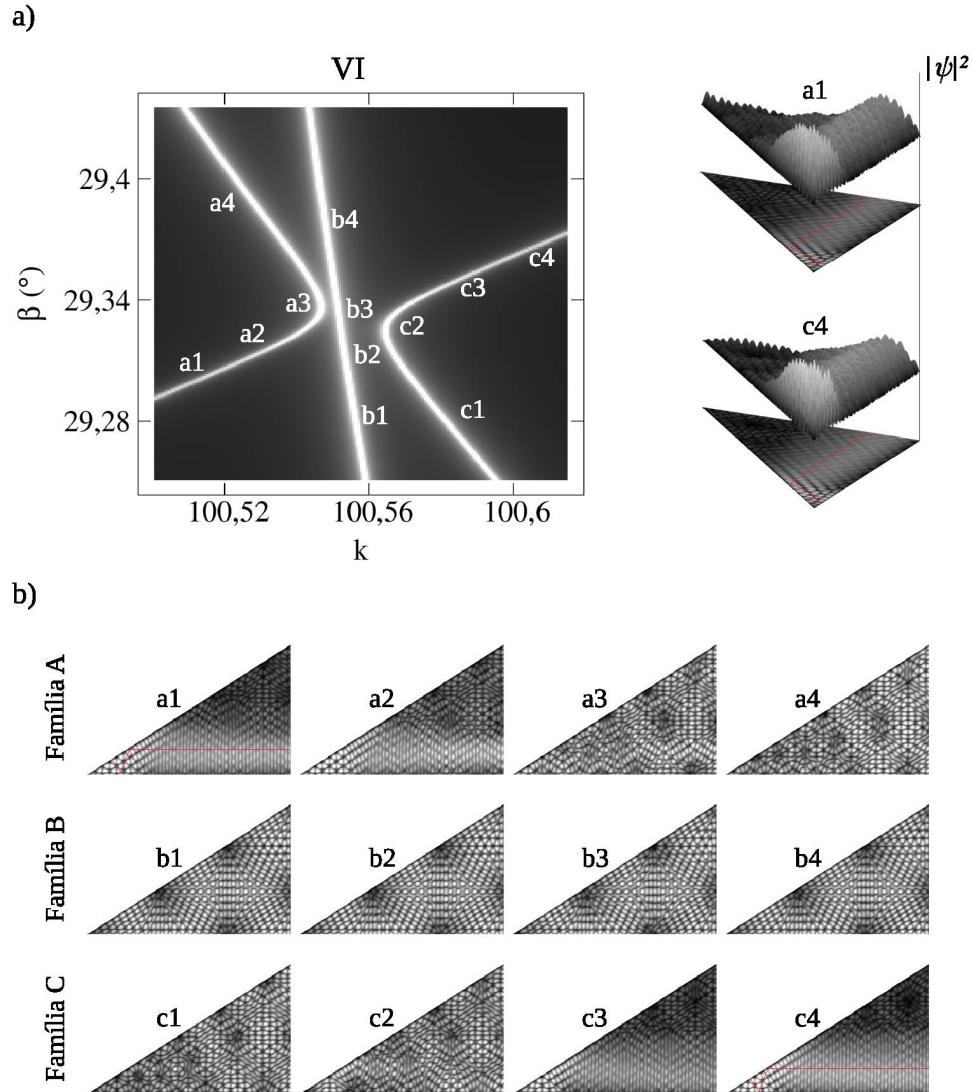


Figura 3.28: a) Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$ da região VI. Ao lado são plotados a1 e c4 em três dimensões. b) Densidade de probabilidade da função de onda $|\psi|^2$ associada aos estados: **a1)** $k = 100,52$, $\beta = 29,3^\circ$; **a2)** $k = 100,537$, $\beta = 29,32^\circ$; **a3)** $k = 100,547$, $\beta = 29,33^\circ$; **a4)** $k = 100,531$, $\beta = 29,38^\circ$; **b1)** $k = 100,556$, $\beta = 29,27^\circ$; **b2)** $k = 100,554$, $\beta = 29,3^\circ$; **b3)** $k = 100,551$, $\beta = 29,33^\circ$; **b4)** $k = 100,547$, $\beta = 29,38^\circ$; **c1)** $k = 100,586$, $\beta = 29,27^\circ$; **c2)** $k = 100,564$, $\beta = 29,32^\circ$; **c3)** $k = 100,58$, $\beta = 29,346^\circ$; **c4)** $k = 100,6$, $\beta = 29,36^\circ$.

esta afirmação através dos autoestados calculados sobre B em relação aos autoestados de A e C. Uma característica comum entre regiões de interação com repulsão é a inversão da morfologia da função de onda entre os autoestados gerados próximos a interação. Como

também sabemos, qualquer que seja a família em evolução retilínea possui a tendência de manter a função de onda de seus autoestados sob constante morfologia. As variações abruptas que ocorrem são em todos os casos resultado de interação entre famílias que convergem gerando repulsão entre níveis de energia. Do aspecto encontrado para os autoestados de B, por exemplo, a invariância da função de onda durante o deslocamento angular sugere que não há sensibilidade da família B em relação as demais famílias. Por isso a evolução contida neste intervalo pode ser considerada de interação somente entre as famílias A e C, as quais possuem nitidamente morfologias semelhantes que são observadas nas inversões $a2 \rightarrow c3$ e $c1 \rightarrow a4$.

Há ainda a ocorrência de cicatrizes nos autoestados construídos sob coordenadas em evolução diagonal, como visto em a1, a2, c3 e c4. A linha vermelha descreve uma trajetória no análogo clássico de uma partícula com dinâmica periódica. A distribuição localizada adjacente a parede l_1 com um pico acentuado no vértice compreendido por β (como mostrado em três dimensões pelos autoestados a1 e c4) é atribuído a variação crescente relativa entre a geometria e a energia do sistema.

3.2.3 Órbitas periódicas em estados cicatrizados

Como frequentemente fora discutido neste trabalho, a função de onda mostra uma forte tendência em concentrar-se sob pequenas áreas do bilhar quando os seus autoestados evoluem sob estreitos intervalos de geometria, e que isso pode resultar em dinâmicas periódicas, as cicatrizes. A Fig. 3.29 exhibe autoestados construídos dentro do limite $\beta \in [29, 2^\circ, 30, 8^\circ]$, em função do número de onda $k \in [100, 6, 101, 4]$. O grupo de autoestados A e B são gerados abaixo da linha de simetria de $\beta = 30^\circ$, enquanto os de C e D, acima de $\beta = 30^\circ$. Os autoestados b1 e c1 são plotados em três dimensões ao lado da Fig. 3.29a.

Novamente observamos padrões semelhantes no comportamento das cicatrizes quando levamos em conta a distribuição espacial da função de onda, assim como a quantidade de órbitas presentes em cada autoestado. Em relação ao primeiro padrão, podemos novamente fazer uma análise quantitativa do nível de inclinação da família a qual determinado autoestado é gerado.

Primeiramente vamos considerar, por exemplo, os autoestados a1 e a5 presentes no grupo

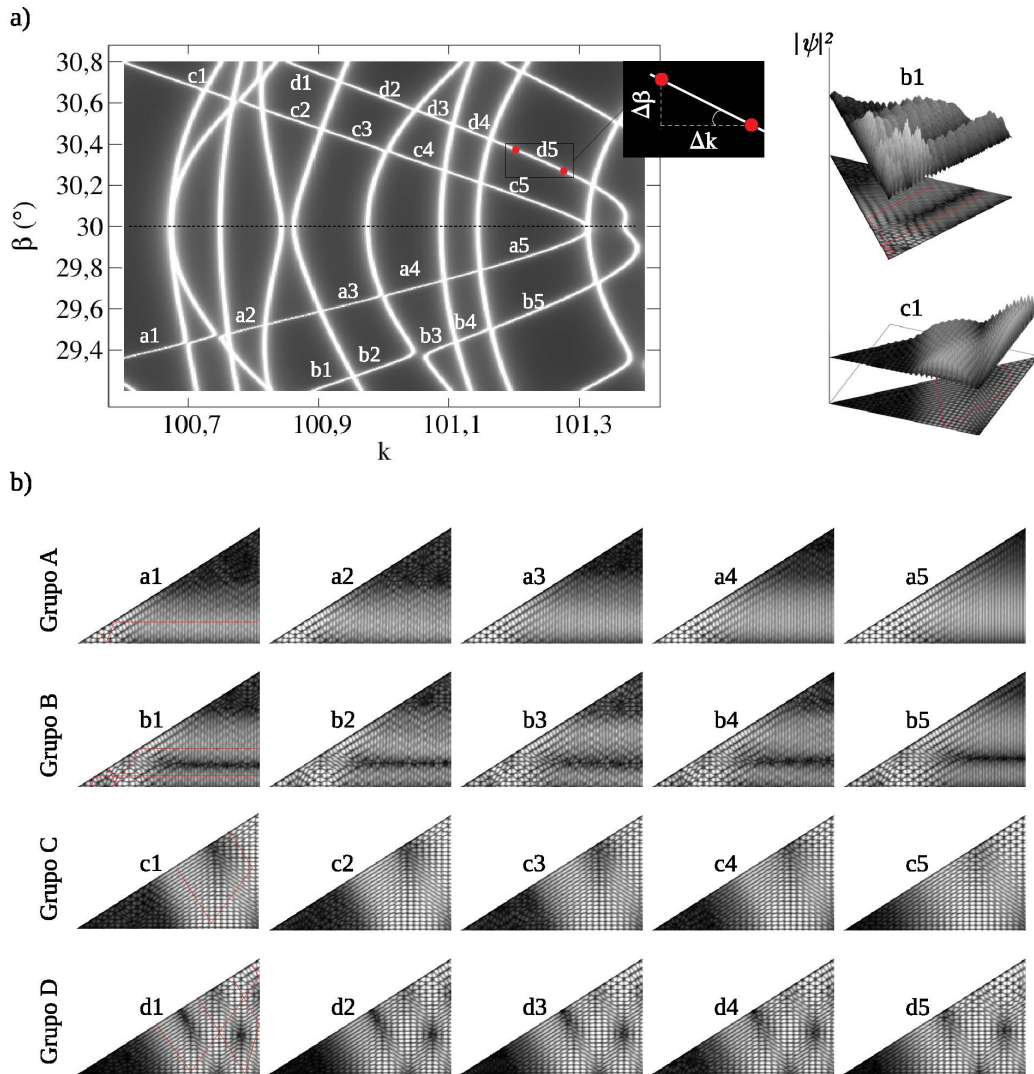


Figura 3.29: a) Gráfico de densidade $k \times \beta \times \langle |T_k(i, j)|^2 \rangle$. Ao lado são plotados os autoestados b1 e c1 em três dimensões. As linhas vermelhas indicam a trajetória de uma partícula no seu bilhar análogo clássico. No detalhe, uma porção ilustrada do grupo D. b) Densidade de probabilidade da função de onda $|\psi|^2$ associada aos estados: **a1)** $k = 100,64, \beta = 29,39^\circ$; **a2)** $k = 100,782, \beta = 29,45^\circ$; **a3)** $k = 100,948, \beta = 29,62^\circ$; **a4)** $k = 100,044, \beta = 29,7^\circ$; **a5)** $k = 101,192, \beta = 29,82^\circ$; **b1)** $k = 100,92, \beta = 29,23^\circ$; **b2)** $k = 101,012, \beta = 29,33^\circ$; **b3)** $k = 101,084, \beta = 29,4^\circ$; **b4)** $k = 101,144, \beta = 29,48^\circ$; **b5)** $k = 101,25, \beta = 29,61^\circ$; **c1)** $k = 100,652, \beta = 30,74^\circ$; **c2)** $k = 100,862, \beta = 30,52^\circ$; **c3)** $k = 100,956, \beta = 30,42^\circ$; **c4)** $k = 101,312, \beta = 30,31^\circ$; **c5)** $k = 101,212, \beta = 30,14^\circ$; **d1)** $k = 100,849, \beta = 30,75^\circ$; **d2)** $k = 100,982, \beta = 30,64^\circ$; **d3)** $k = 101,072, \beta = 30,54^\circ$; **d4)** $k = 101,14, \beta = 30,45^\circ$; **d5)** $k = 101,22, \beta = 30,35^\circ$.

A. Escolhemos duas coordenadas no espaço de fase de k e β associados nos arredores próximos a cada um deles. Para o autoestado a1 então temos as coordenadas de energia, $k_2^{(a1')} - k_1^{(a1')} =$

$100,672 - 100,608 = \Delta k^{(a1')} = 0,064$, com as suas geometrias associadas $\beta_2^{(a1')} - \beta_1^{(a1')} = 29,416^\circ - 29,368^\circ = \Delta\beta^{(a1')} = 0,048$ (lembrando que o sobrescrito ' é usado para diferenciar as coordenadas escolhidas da coordenada própria do autoestado a1, por exemplo). Com a relação trigonométrica da tangente para o triângulo retângulo, a inclinação aproximada da família do autoestado a1 é $\tan^{-1}(\Delta\beta^{(a1')}/\Delta k^{(a1')}) \approx 36,86^\circ$. Usando a mesma técnica, fazemos o mesmo para o autoestado a5, logo, $k_2^{(a5')} - k_1^{(a5')} = 101,234 - 101,170 = \Delta k^{(a5')} = 0,064$, e das geometrias, $\beta_2^{(a5')} - \beta_1^{(a5')} = 29,868^\circ - 29,808^\circ = \Delta\beta^{(a5')} = 0,06$, a inclinação de a5 é, $\tan^{-1}(\Delta\beta^{(a5')}/\Delta k^{(a5')}) \approx 43,15^\circ$. Repetimos novamente a técnica para os autoestados c1 e c5, e para d1 e d5. Para c1 e c5, $\tan^{-1}(\Delta\beta^{(c1')}/\Delta k^{(c1')}) \approx 47,64^\circ$ e $\tan^{-1}(\Delta\beta^{(c5')}/\Delta k^{(c5')}) \approx 49,26^\circ$. Para d1 e d5 temos, $\tan^{-1}(\Delta\beta^{(d1')}/\Delta k^{(d1')}) \approx 49,39^\circ$ e $\tan^{-1}(\Delta\beta^{(d5')}/\Delta k^{(d5')}) \approx 53,13^\circ$.

Dos resultados listados acima, identificamos novamente como a inclinação da família influencia consideravelmente na distribuição da função de onda. Apesar da aparente semelhança entre os autoestados d1 e d5, por exemplo, ainda é nítida a diferença que ambos apresentam em determinadas regiões no interior do bilhar, e isso é particularmente devido a relativa diferença na inclinação da família em que cada um é construído. Em relação as órbitas, estas estarão presentes em igual quantidade nos autoestados construídos no mesmo grupo. Portanto, a distribuição da densidade da função de onda é tão localizada espacialmente quanto menor for o valor de $\Delta\beta$ em relação a seu Δk associado. Também, o número de órbitas descritas pela função de onda de um certo autoestado não é definida pela inclinação da família em que este é construído, e sim por qual grupo é construído (observe que $\tan^{-1}(\Delta\beta^{(c5')}/\Delta k^{(c5')}) < \tan^{-1}(\Delta\beta^{(d1')}/\Delta k^{(d1')})$).

3.2.4 Estatística dos níveis de energia

Nesta seção iremos determinar a dinâmica do triângulo para ângulos internos atribuídos nas proximidades do caso regular ($30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$). O mesmos obstáculos encontrados nesta geometria para obter $P(s)$ assimila-se ao caso triangular ($45^\circ, 45^\circ, 90^\circ$). O triângulo ($30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$) também possui dinâmica regular, onde sua distribuição de probabilidade é descrita por um função de Poisson [52]. De acordo com o espectro analítico de autovalores dado por (2.69), há estados degenerados em que $s = 0$ e, por conseguinte, em nosso método $n_k \rightarrow \infty$. Por

isso, vamos buscar a dinâmica associada ao sistema em que β está suficientemente distante da geometria regular.

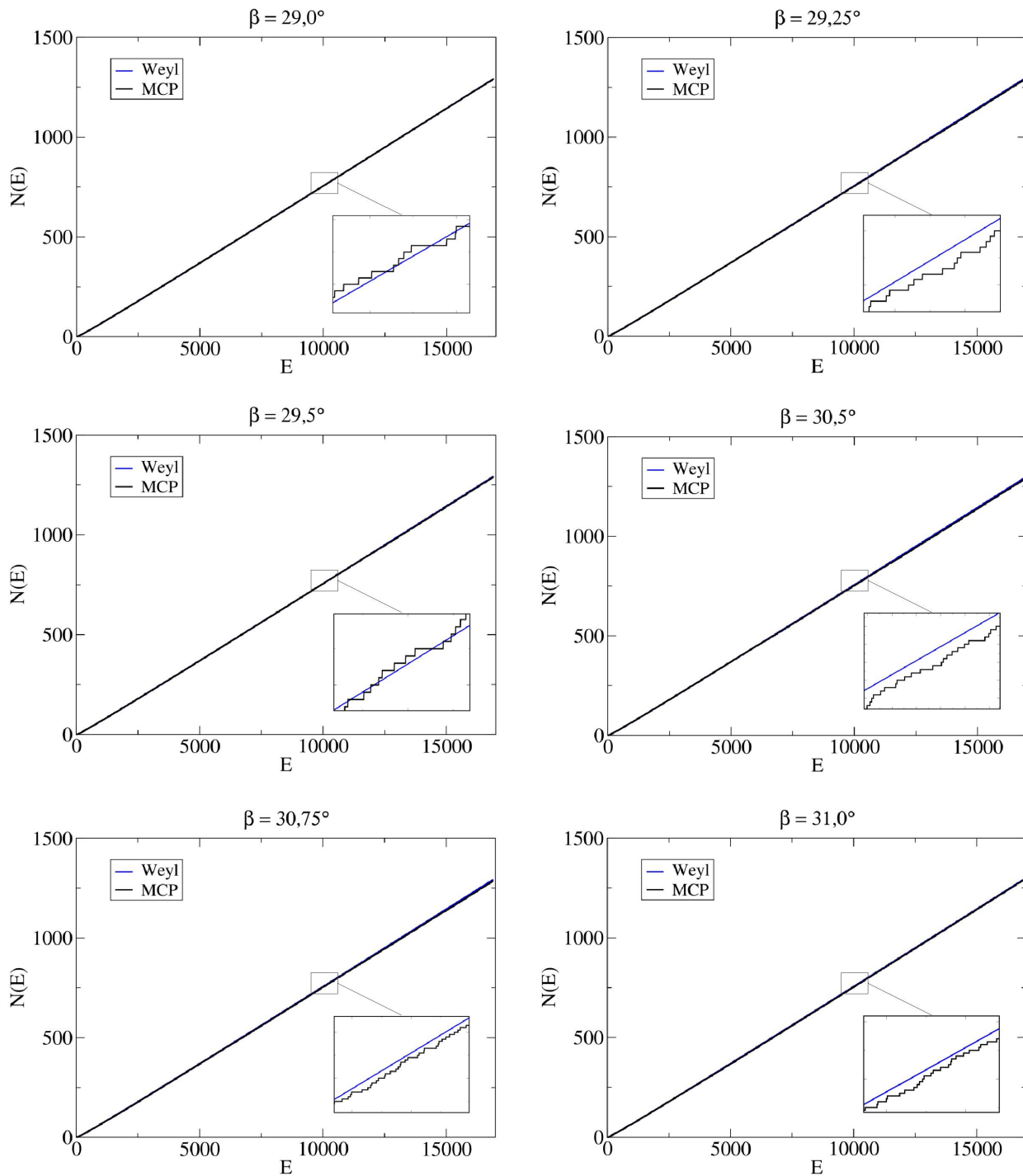


Figura 3.30: Função de escada espectral dos primeiros 1290 níveis de energia para ângulos compreendidos nas proximidades da região regular do triângulo. As curvas representam as soluções analíticas e numéricas por (3.1) (Weyl) e MCP, respectivamente.

Primeiramente contamos os autoestados obtidos pelo MCP e comparamos com o caso analítico descrito por Weyl em (3.1). A Fig. 3.30 mostra a função de escada espectral $E \times N(E)$ via MCP em contraste com o caso teórico via Weyl. Os dados obtidos numericamente se mantêm próximos de $N(E)^{(MCP)} \approx 1290$ enquanto a fórmula de Weyl imprime uma média de $N(E) = 1291$. A contagem pelo MCP passa a decair em relação a teoria nas regiões de regularidade novamente pelo fato de que as autoenergias nesta região de interesse possuem proximidade considerável e a determinação de um d_k ou μ apropriados tornam-se inviáveis no âmbito computacional. Contudo, ambas as soluções analítica e numérica mostram forte correspondência nas geometrias de interesse (ver os β 's na figura 3.30), e assim podemos determinar $P(s)$.

Tratamos de início o caso para o bilhar $(30^\circ, 60^\circ, 90^\circ)$. A Fig. 3.31a exibe a contagem de autoestados por método analítico através de (3.1) e (2.69), e por método numérico via MCP. Na curva em que as degenerescências do triângulo $(30^\circ, 60^\circ, 90^\circ)$ são removidas, constatamos boa precisão em relação aos dados obtidos pelo método numérico. A ausência dos estados degenerados na contagem pelo MCP, novamente resulta em um $P(s)$ que vai na contramão de dados já existentes na literatura, na qual encontramos que a densidade de probabilidade que descreve o sistema $(30^\circ, 60^\circ, 90^\circ)$ exibe dinâmica associada a uma curva de Poisson [52]. A Fig. 3.31b mostra o histograma construído numericamente para os primeiros 1009 autoestados do triângulo $(30^\circ, 60^\circ, 90^\circ)$. As curvas contínuas representam as densidades $P(s)$ das distribuições de Poisson e Wigner (GOE).

A seguir são mostradas as estatísticas de níveis para ângulos internos nas proximidades de $\beta = 30^\circ$. Em todos os casos que observamos, há uma forte tendência de distribuição de probabilidade do tipo Berry-Robnik. Aparentemente as estatísticas indicam um aumento relativo entre os valores de ρ_1 e ρ_2 com a proximidade de β ao caso regular $\beta = 30, 0^\circ$, de tal forma que a curva de Berry-Robnik se desloca de uma distribuição do tipo Wigner ($\rho_1 = 0$ e $\rho_2 = 1$) para uma distribuição do tipo Poisson ($\rho_1 = 1$ e $\rho_2 = 0$).

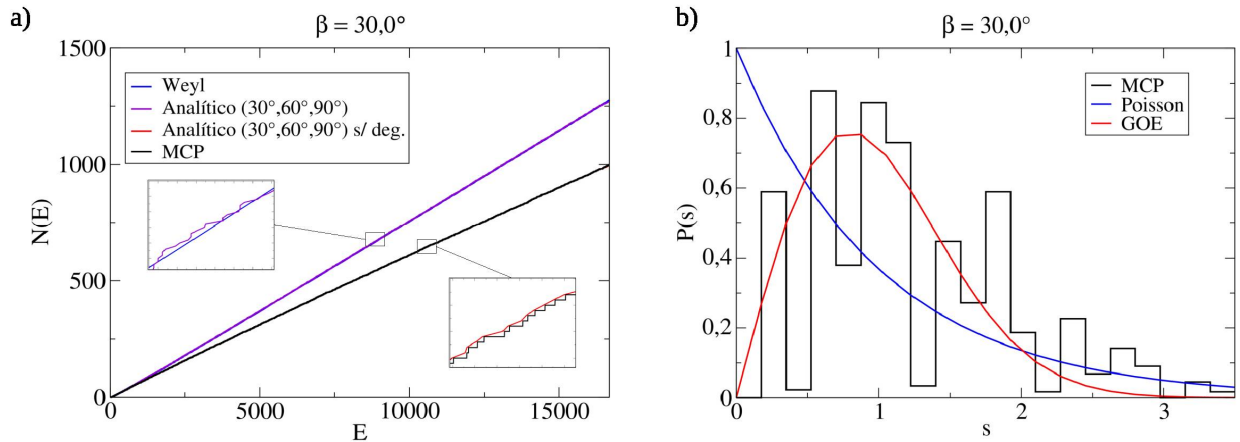


Figura 3.31: a) Função de escada espectral mediante resultados analíticos e numéricos via MCP. b) Distribuição dos níveis de energia $P(s)$ para os primeiros 1009 autoestados do triângulo ($30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$). As linhas contínuas representam as curvas de Poisson e GOE.

3.3 Conclusões parciais

Usando o Método do Contorno de Paredes foi analisada a variação no espectro, e autoestados correspondentes, do bilhar triangular na região de transição entre os comportamentos regular/não-regular, quando sua geometria é perturbada através da variação dos ângulos internos α/β .

Inicialmente é observado que para baixas energias, as famílias de autoestados desenvolvem-se descrevendo evolução paralela ao eixo que define a geometria do sistema. Isso é resultado do conjunto de ondas incidentes com baixo comprimento de onda que excitam um conjunto de bilhares cujas geometrias possuem variações suficientemente pequenas. Dessa forma, a função de onda dos autoestados no espaço $k \times \beta$ não apresenta alterações significativas na sua morfologia, mantendo assim a distribuição espacial da função de onda constante durante a variação dos parâmetros.

Para altas energias, observa-se que a variação do espectro, evidenciada pela dinâmica das famílias de autoestados, é fortemente influenciada pela relação da morfologia das funções de onda associadas aos estados ressonantes com a região mais fortemente afetada pela mudança na geometria (vértices do triângulo). Na região regular (nas proximidades imediatas das linhas de $\beta = 45^\circ$ e $\beta = 30^\circ$, linha média horizontal) do espaço $k \times \beta$ as famílias podem sobrepor-se e gerar degenerescência. Fora das linhas de $\beta = 45^\circ$ e $\beta = 30^\circ$ as degenerescências

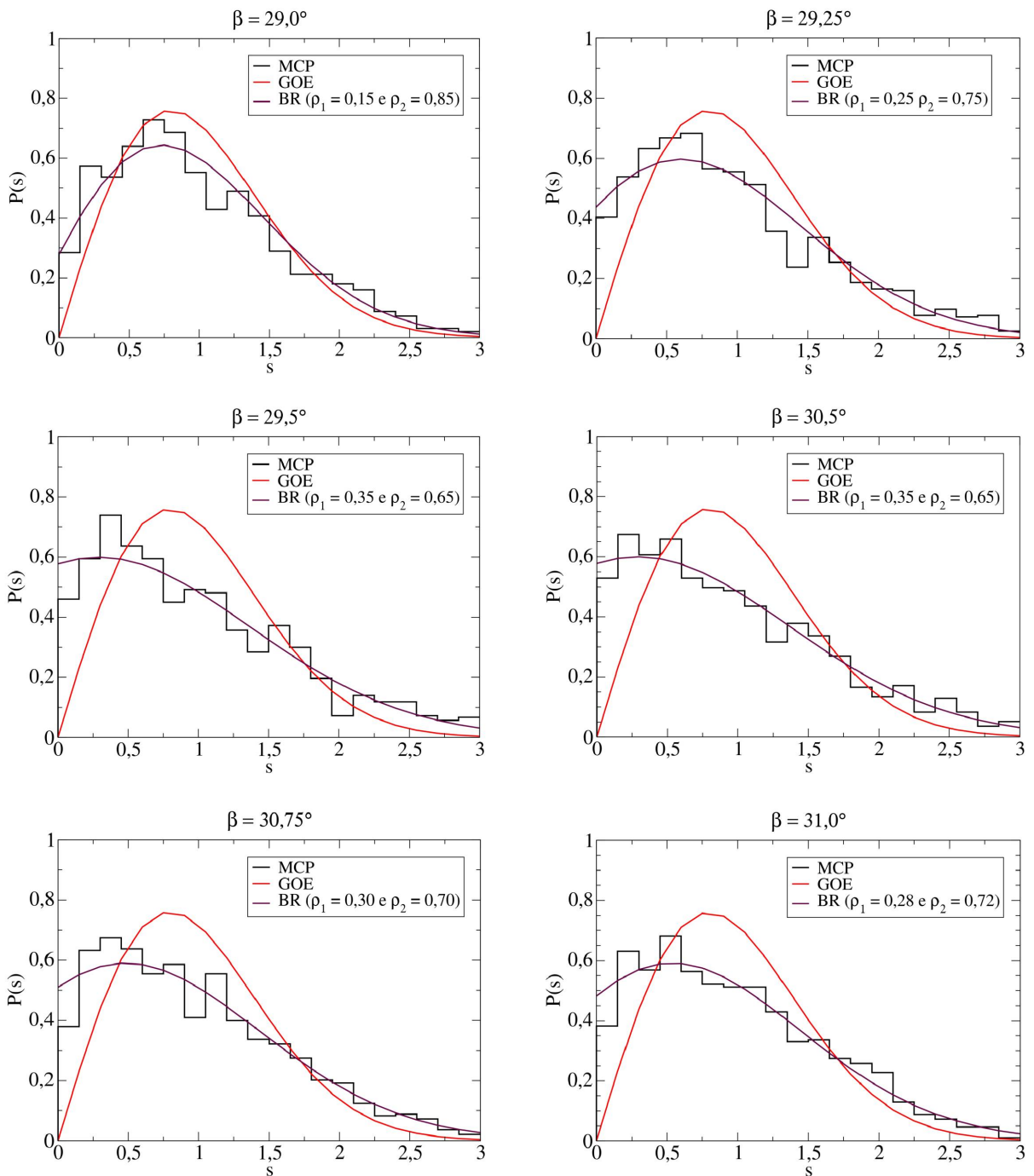


Figura 3.32: Densidade de probabilidade $P(s)$ para ângulos $\beta = 29^\circ$, $\beta = 29,25^\circ$, $\beta = 22,5^\circ$, $\beta = 30,5^\circ$, $\beta = 30,75^\circ$ e $\beta = 31^\circ$. As linhas contínuas representam $P(s)$ de Wigner (GOE) e Berry-Robnik (BR). Os histogramas são montados numericamente via MCP.

são quebradas e quando as famílias aproximam-se estas repelem-se, evitando as degenerescências, em um comportamento de *avoided crossing* [103–105], o que indica um comportamento não-regular [106]. Na situação de *avoided crossing* as famílias trocam entre si suas morfologias nas regiões de interação de maneira a manter a tendência de suas evoluções, em efeito semelhante a uma transição adiabática [107]. Estas últimas observações são de importante destaque pois são resultados obtidos originalmente neste trabalho.

A função de onda mostrou, em todos os casos, forte tendência em concentrar-se em determinados espaços na região interna do bilhar quando os autoestados evoluem diagonalmente. Tal aspecto está diretamente ligado ao favorecimento da ocorrência de cicatrizes, em que a função de onda além de distribuir-se localmente, apresenta periodicidade e instabilidade estrutural na dinâmica descrita pelo autoestado.

Para as estatísticas de níveis, a densidade de probabilidade $P(s)$ mostrou uma aparente tendência de distribuição do tipo Berry-Robnik. De acordo com os ângulos atribuídos ao bilhar fora da geometria regular ($45^\circ, 45^\circ, 90^\circ$) e ($30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$), essa distribuição se ajusta aos parâmetros ρ_1 e ρ_2 numa configuração intermediária entre as distribuições de Poisson e Wigner. Tal resultado indica que nestas geometrias $P(s)$ não descreve um sistema caótico, mas sim pseudo-integrável. As estatísticas para ângulos de geometria regular apresentam degenerescências de acordo com as expressões analíticas de autovalores, e assim neste trabalho o $P(s)$ mais apropriado segue a literatura, na qual possui resultados mostrando que para bilhares triangulares ($45^\circ, 45^\circ, 90^\circ$) e ($30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$), a distribuição de probabilidade obedece uma curva de Poisson [52].

Até o momento, tratamos todos os casos em que a transmissão nas paredes periféricas do bilhar possuem valor numérico muito próximo de zero, ou seja, a intensidade do potencial tende ao infinito, $\gamma \rightarrow \infty$. No capítulo seguinte, vamos abordar as soluções do bilhar retangular cuja geometria é constituída por uma diagonal de permeabilidade variável, enquanto as paredes da periferia mantêm-se impermeáveis.

Capítulo 4

Bilhar retangular com diagonal permeável

Neste capítulo, vamos dar continuidade a aplicabilidade do MCP na obtenção das soluções quânticas para o bilhar retangular constituído também de uma parede de potencial na diagonal com permeabilidade variável. Para este tipo de sistema, o MCP mostra-se novamente como uma poderosa ferramenta para o cálculo de espalhamento, pois poucos métodos são tão versáteis em bilhares com diferentes valores de permeabilidade.

Alguns trabalhos descritos na literatura adotam sistemas semelhantes em que um determinado bilhar é elaborado contendo uma parede de potencial que divide a região interna em duas regiões, ou seja, a função de onda submetida a algum tipo de “obstáculo”. Assim, cada região é estabelecida com diferentes valores de potenciais. Exemplos desse tipo de sistemas incluem a dinâmica de uma partícula quântica em interação com bilhares na forma de círculo [108], estádio [36], triângulo reto e equilátero [109], retângulo [110], cavidade de microondas [111], etc. Além disso, bilhares cujas paredes não são totalmente reflexivas, ou possuem alguma variação na permeabilidade, também têm um grande volume de aplicações [64], por exemplo, no campo de microrressonadores ópticos onde se explora a caoticidade do sistema para aumentar significativamente a unidirecionalidade da emissão de luz [112,113]. Podemos mencionar também trabalhos sobre dispersão caótica em um bilhar circular composto por um corte reto e duas aberturas, em que mediante variações na geometria das aberturas, mostra-se uma gama completa de comportamentos dinâmicos [114]. Outras aplicações também podem ser encontradas nas medições de densidade elétrica em bilhares de microondas com barreiras permeáveis [115,116], transporte de fluidos incompressíveis [117,118], etc.

Nossa contribuição no presente capítulo será analisar o comportamento da função de onda mediante pequenas variações na transmissão na parede diagonal do retângulo. A partir da dinâmica descrita pelas famílias no espaço de fase $k \times T_d$, vamos calcular a densidade de probabilidade da função de onda $|\psi|^2$ associada aos autoestados para obter informações da evolução da sua morfologia tanto para valores intermediários de transmissão quanto para valores limites. Com tais variações as soluções deste bilhar serão transitadas entre as geometrias do bilhar triangular e retangular, ou seja, no limite inferior onde a parede de potencial na diagonal é impermeável, as soluções terão a forma do triângulo, enquanto no limite superior com a diagonal totalmente permeável, as soluções serão de domínio retangular.

Para que possamos incluir a permeabilidade no cálculo da função de onda, buscamos soluções que agora levam em conta a expressão (2.21) (ou a sua forma discretizada (2.53)) com o parâmetro γ finito. Os nossos cálculos numéricos serão feitos usando o parâmetro de transmissão T_d na diagonal e o parâmetro T_p no contorno externo. Logo, a relação que descreve a conversão entre os valores de transmissão e permeabilidade de qualquer parede é dada por,

$$\gamma = 2k \left(\frac{1}{T_{p/d}} - 1 \right)^{1/2}. \quad (4.1)$$

Onde k é o número de onda correspondente a onda incidente e $T_{p/d}$ a transmissão na periferia/diagonal. No entanto, para os dois limites de transmissão, o método numérico inviabiliza as atribuições $T_{p/d} = 0$ e/ou $T_{p/d} = 1$. Por isso, adotamos valores que são satisfatoriamente próximos destes limites, ou seja, para o limite inferior usamos $T_d = 10^{-9}$, e para o superior, $T_d = 1 - 10^{-9}$. O contorno externo mantém a transmissão $T_p = 10^{-9}$. Para simplificar a leitura do texto, a apresentação destes valores será dado da seguinte forma: $T_d = 0$ para o limite inferior e $T_d = 1$ para o limite superior.

Para também simplificar as discussões, iremos construir a geometria proposta substituindo as denominações l_1, l_2, \dots , descritas no capítulo anterior, pela identificação dos vértices do retângulo. Então, agora as paredes periféricas são definidas pelos segmentos \overline{ab} , \overline{bc} , \overline{cd} e \overline{da} , como mostrado na Fig. 4.1. O segmento de reta que conecta dois vértices opostos é identificado por \overline{ac} tal que $|\overline{ac}| = \sqrt{|\overline{ab}|^2 + |\overline{bc}|^2} = \sqrt{|\overline{cd}|^2 + |\overline{da}|^2}$. Por simplicidade, vamos definir o cateto $|\overline{ab}| = 1$ e a partir da atribuição angular de β , temos que $|\overline{bc}| = |\overline{ab}| \tan[\beta]$.

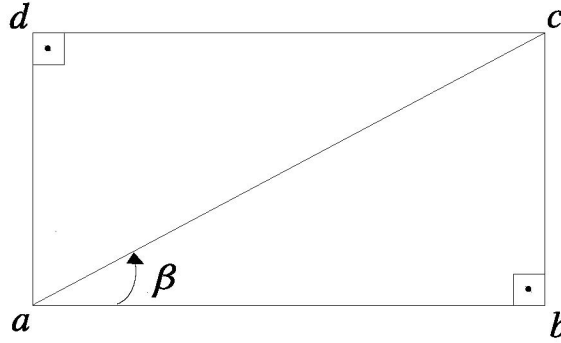


Figura 4.1: Bilhar retangular com diagonal permeável.

A discretização da barreira para o cálculo numérico da matriz de espalhamento e da função de onda obedece a mesma técnica descrita na seção 2.5, com a inclusão do parâmetro de permeabilidade dado por (4.1). A abordagem dos parâmetros relativos ao comprimento do segmento Δ e da dimensão da matriz $N^{(l_n)}$ fornecidos por (2.58) e (2.60) se aplicam da mesma maneira para as paredes que compõe o contorno externo ao bilhar. Contudo, para a diagonal, definimos um parâmetro de proporcionalidade n_d que ajusta a dimensão da matriz na intenção de isolar as soluções correspondentes aos triângulos inferior \overline{abc} e superior \overline{cda} quando $T_d = 0$, ou seja

$$N^{(\overline{ac})} = \frac{|\overline{ac}|k}{2\pi\mu}n_d. \quad (4.2)$$

Assim, o número de segmentos Δ_d na diagonal, se $n_d > 1$, será proporcionalmente maior em relação ao número de segmentos Δ_p do contorno externo.

Para a determinação do n_d mais adequado, usamos a solução analítica do triângulo regular $(30^\circ, 60^\circ, 90^\circ)$, e introduzimos o espectro relativo aos seus autoestados para confrontar com as soluções numéricas obtidas via MCP com $\beta = 30^\circ$ e $T_d = 0$, formando dois triângulos, um superior e outro inferior, ambos com a mesma configuração geométrica. O resultado é visto na Fig. 4.2. Nela são plotadas as curvas referentes a contagem de autoestados do bilhar triangular $(30^\circ, 60^\circ, 90^\circ)$ através do espectro analítico de autovalores em (2.69) e da equação de Weyl em (3.1). A função de escada espectral é obtida numericamente via MCP. O ajuste mencionado se refere a remoção de uma das energias duplicadas que são as energias de ressonância do triângulo $(30^\circ, 60^\circ, 90^\circ)$. De acordo com os dados referentes ao método analítico pela equação de autovalores (sem degenerescências) e do MCP, a escolha de $n_d = 2$

mostra-se adequado para a discretização da barreira \overline{ac} . Na realidade, nossos resultados mostram que valores tal que $n_d > 2$ também se tornam apropriados para isolar as soluções dos dois triângulos. Entretanto, tais atribuições para $n_d > 2$ implicam em maior custo computacional e não revelam maior acurácia na contagem dos autoestados.

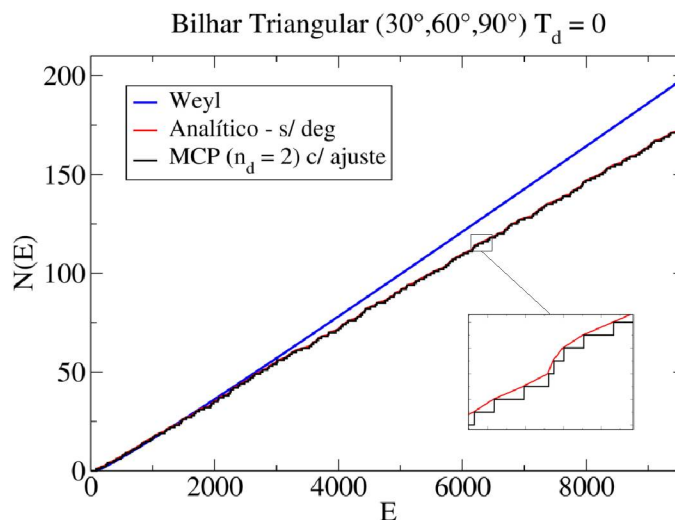


Figura 4.2: Função de escada espectral mediante MCP com $n_d = 2$, $\beta = 30^\circ$ e $T_d = 0$. O “ajuste” consiste na remoção de uma das energias duplicadas. As demais curvas representam autoestados obtidos analiticamente. A divergência visível do MCP com Weyl é resultado da presença de degenerescências no triângulo $(30^\circ, 60^\circ, 90^\circ)$.

Nas seções seguintes, vamos iniciar as discussões a respeito das soluções do bilhar em questão. O primeiro caso a ser estudado será o bilhar com $\beta = 30^\circ$ e o segundo com $\beta = 22,5^\circ$, os quais constroem os triângulos $(30^\circ, 60^\circ, 90^\circ)$ e $(22,5^\circ, 67,5^\circ, 90^\circ)$, respectivamente. Em primeira análise, usaremos as propriedades da matriz de espalhamento para caracterizar a dinâmica das famílias de autoestados no espaço de fase em que $k \in [6, 20]$ e a transmissão na diagonal $T_d \in [0, 1]$. Em seguida, vamos calcular a densidade de probabilidade da função de onda $|\psi(x, y)|^2$ de k e T_d associados para que possamos determinar a sua morfologia mediante variações sucessivas da transmissão na diagonal \overline{ac} . Em todos os casos, o contorno periférico que compreende o perímetro \overline{abcd} mantém a transmissão $T_p = 0$. Para ambas as atribuições de β , usaremos $\mu = 0,05$. Na Fig. 4.3 é plotado o gráfico $k \times N$, onde N define a dimensão da matriz T . Para os dois bilhares, as dimensões de $T(i, j) = [T_{i,j}]_{N \times N}$ de $\beta = 30^\circ$ e $\beta = 22,5^\circ$ são calculadas com $N \in [104, 347]$ e $N \in [95, 317]$, respectivamente.

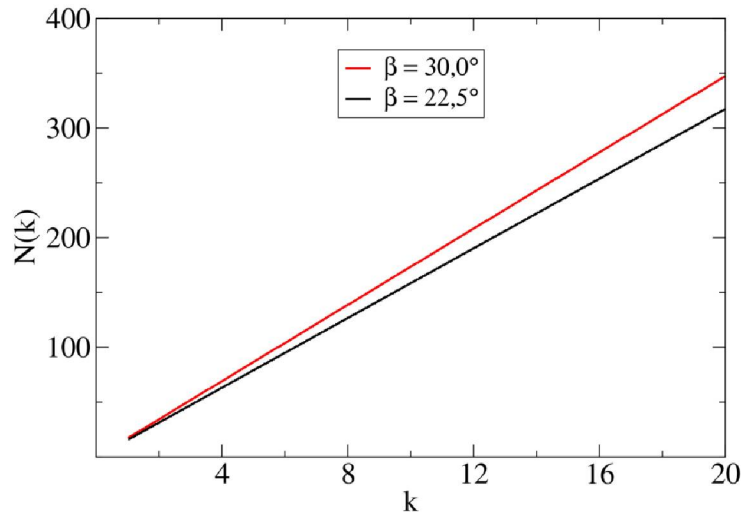


Figura 4.3: Representação gráfica da equação (2.61) mostrando a dependência linear da dimensão da matriz T do retângulo da relação $N \times k$ para $\beta = 30,0^\circ$ e $\beta = 22,5^\circ$ com $\mu = 0,05$.

4.1 Análise de famílias para $\beta = 30^\circ$

Nesta configuração angular, as dimensões do bilhar são definidas de acordo com a inclinação da diagonal determinada por $\beta = 30^\circ$, como ilustrado na Fig. 4.4. Com as atribuições $|\overline{ab}| = |\overline{cd}| = 1$ e $\beta = 30^\circ$ o dimensionamento das paredes laterais são $|\overline{bc}| = |\overline{da}| = 1/\sqrt{3}$.

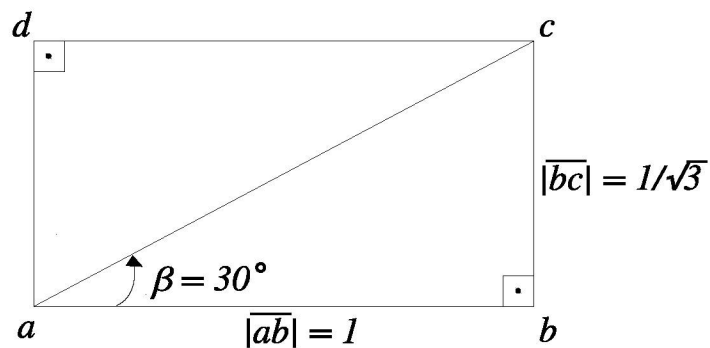


Figura 4.4: Estrutura da geometria atribuída ao bilhar retangular com uma parede que forma a diagonal do sistema.

4.1.1 Espectro de famílias $k \times T_d$

A Fig. 4.5 mostra o primeiro conjunto de famílias para $k \in [6, 20]$. As regiões claras, formando curvas ou as famílias propriamente ditas, consistem na média sobre os elementos (i, j) da matriz de espalhamento T calculadas no espaço de fase $k \times T_d$. No limite inferior, definido por $T_d = 0$, a parede diagonal é totalmente impermeável ($\gamma \rightarrow \infty$), enquanto no limite superior a transmissão é máxima, $T_d = 1$, e a diagonal é totalmente permeável ($\gamma = 0$). Sendo assim, no limite inferior as soluções se referem as energias ressonantes do triângulo

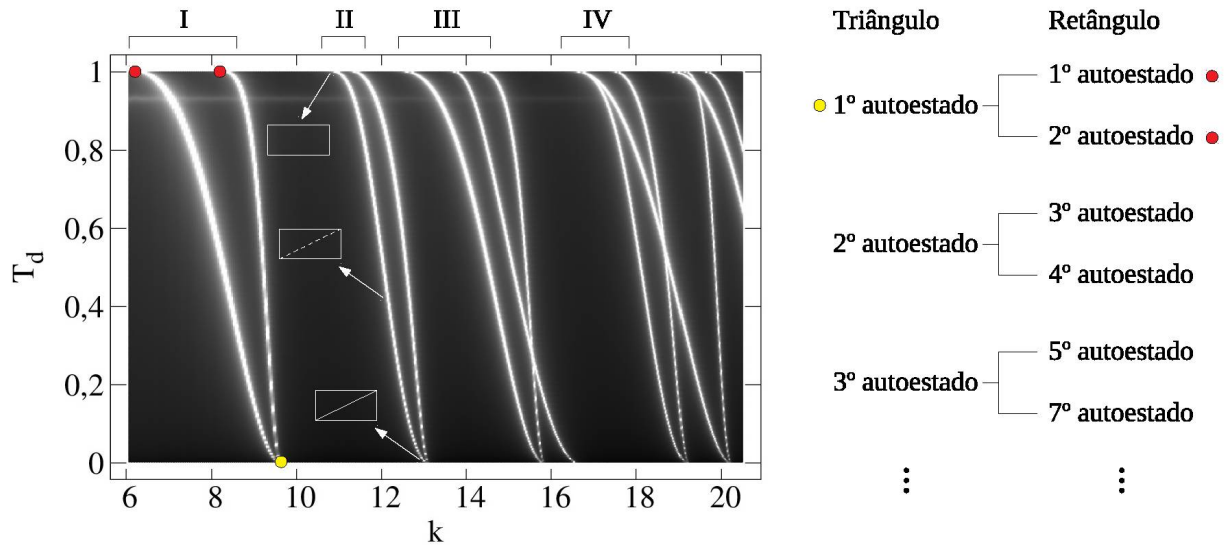


Figura 4.5: Gráfico de $k \times T_d \times \langle |T(i, j)|^2 \rangle$ para $\beta = 30, 0^\circ$. As regiões claras formando curvas representam famílias de autoestados do bilhar retangular com diagonal permeável. As setas indicam esquematicamente o processo de variação da transmissão na parede \overline{ac} . Ao lado é mostrado a relação entre os estados inicial e final diante da permeabilidade calculada nos limites inferior e superior, respectivamente.

($30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$). Para $T_d = 1$ no limite superior, temos as autoenergias do bilhar retangular sem diagonal.

Na região intermediária em que $T_d \in (0, 1)$, as famílias evoluem descrevendo uma dinâmica que promove decréscimo no módulo do vetor de onda e disso resulta em um aumento do comprimento de onda da função de onda espalhada. Este resultado, que será visto adiante com mais detalhes através de $|\psi|^2$, pode ser interpretado pelo fato de que a área efetiva do bilhar aumenta por consequência do acréscimo da transmissão na diagonal. Tal acréscimo também resulta na dissociação dos autoestados, como visto no esquema ao lado direito da

Fig. 4.5. O primeiro autoestado calculado sobre $T_d = 0$, por exemplo, separa-se formando dois autoestados independentes que, por fim, no limite superior $T_d = 1$, irão construir os dois primeiros autoestados do retângulo com parede totalmente permeável.

É importante, contudo, salientar que a sobreposição de duas famílias, como ocorre com frequência em regiões em que $T_d = 0$, não é via de regra para a existência de superposição de autoestados ou ainda a ocorrência de degenerescência. Esta conclusão pode ser verificada numericamente por meio do parâmetro de simetria θ do vetor de onda, como também através do espectro analítico de autovalores dado por (2.69).

4.1.2 Função de onda $\psi(x, y)$

Para uma discussão mais clara sobre a morfologia da função de onda associada aos autoestados de cada família, vamos separar o espaço de fase da Fig. 4.5 em quatro regiões definidas por I, II, III e IV. Cada região é delimitada de acordo com a dinâmica na qual há interação visível entre níveis de energia.

A Fig. 4.6 exibe a distribuição de autoestados para as primeiras duas famílias do bilhar retangular, decrita pela região I (as denominações $m \times n$ acima de cada autoestado da Fig. 4.6b são os números quânticos associados a solução analítica para o triângulo e retângulo. Tais denominações serão posteriormente justificadas para descrever o elo com nossas soluções numéricas). No limite que compreende a transmissão mínima $T_d = 0$, as famílias estão sobrepostas sobre uma mesma energia ressonante. Tal coordenada, representada pelo autoestado ab1, consiste no primeiro estado do bilhar triangular ($30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$). Os pontos nos quais são plotadas a função de onda de a2, a3 e a4 e b2, b3 e b4 a transmissão possui valor intermediário.

Da evolução dos autoestados mostrada na Fig. 4.6b, observa-se que a função de onda “transita” suavemente entre os dois limites de tal maneira que com o aumento da transmissão a partir do limite próximo de $T_d = 0$, os autoestados dissociam-se para gerar dois autoestados independentes. Pode-se observar que a transição da função de onda ocorre de duas formas diferentes, por exemplo, nos autoestados da família A, as duas soluções, tanto do triângulo inferior como do superior, se “unem” e assim uma das soluções do retângulo é gerada. Já para os autoestados de B, o nó originalmente na diagonal do autoestado ab1 “sobrevive” conforme

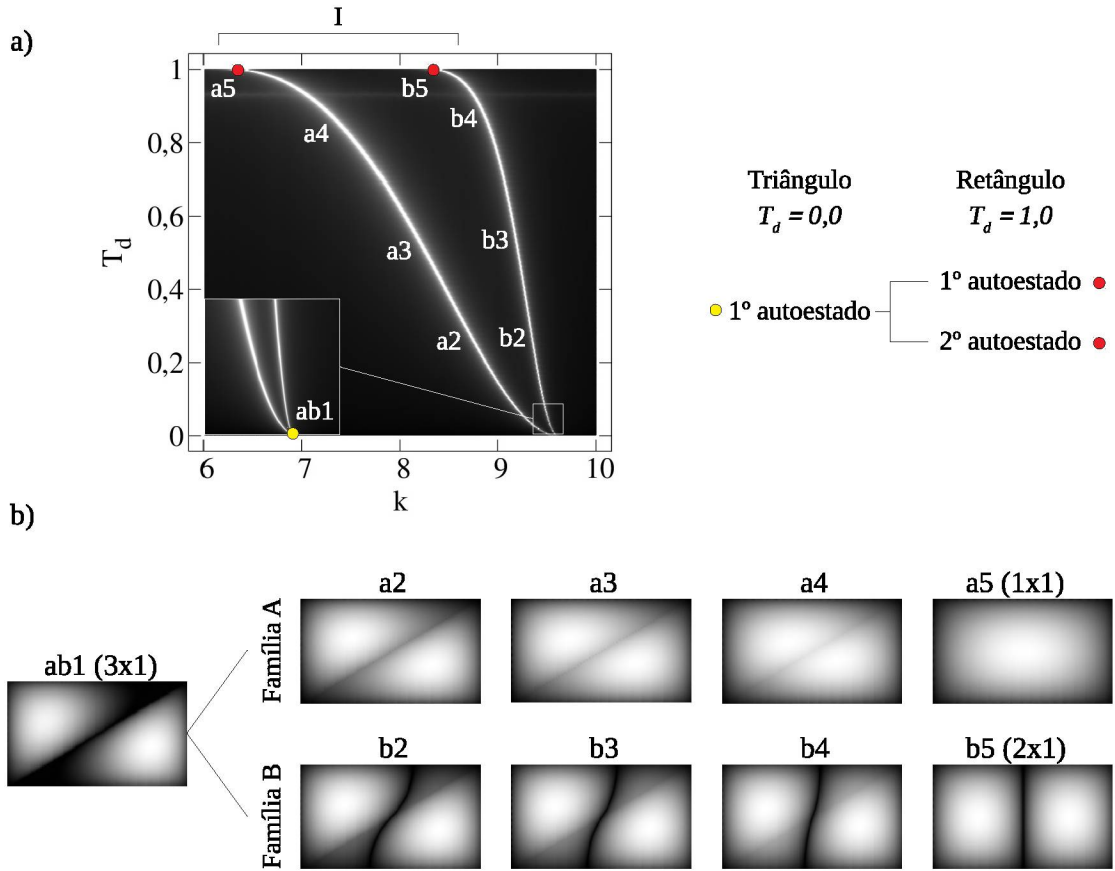


Figura 4.6: a) Gráfico de $k \times T_d \times \langle |T(i,j)|^2 \rangle$ da região I. b) Densidade de probabilidade $|\psi|^2$ associada aos estados: **ab1**) $k = 9,62$, $T_d = 0$; **a2**) $k = 8,80$, $T_d = 0,235$; **a3**) $k = 8,21$, $T_d = 0,525$; **a4**) $k = 7,58$, $T_d = 0,79$; **a5**) $k = 6,30$, $T_d = 1$; **b2**) $k = 9,35$, $T_d = 0,26$; **b3**) $k = 9,18$, $T_d = 0,535$; **b4**) $k = 8,90$, $T_d = 0,845$; **b5**) $k = 8,33$, $T_d = 1$.

aumento na transmissão, e assim o segundo autoestado do retângulo é gerado. Em suma, a primeira família A irá formar o primeiro autoestado do retângulo (1×1) ($(m \times n)$), enquanto a segunda, B, formará o segundo (2×1), ambos no limite superior $T_d = 1$, no qual também podemos considerar que a diagonal é removida do sistema.

A Fig. 4.7 mostra em detalhes a região II em que temos a dinâmica de duas famílias que evoluem a partir de uma sobreposição no limite inferior definido pela transmissão mínima, $T_d = 0$, até a transmissão máxima calculada sobre $T_d = 1$, e ambas com $k \in [10,9,13,1]$. Os conjuntos de autoestados associados as famílias representam o segundo estado do triângulo retângulo e o terceiro e quarto estado do retângulo, conforme esquema ao lado. O autoestado **ab1** é calculado para k e T_d associados próximos ao limite inferior, caracterizando o segundo

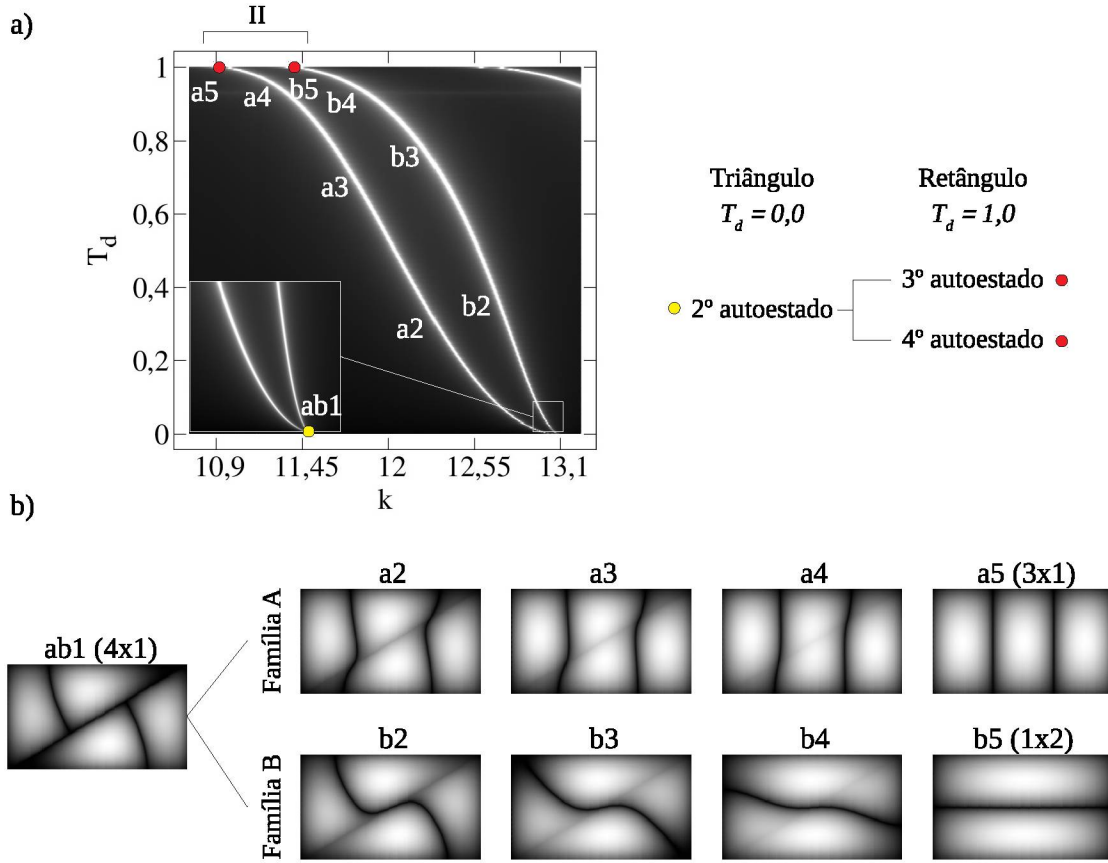


Figura 4.7: a) Gráfico de $k \times T_d \times \langle |T(i, j)|^2 \rangle$ da região II. b) Densidade de probabilidade $|\psi|^2$ associada aos estados: **ab1**) $k = 13, 11$, $T_d = 0$; **a2**) $k = 12, 27$, $T_d = 0, 325$; **a3**) $k = 11, 80$, $T_d = 0, 68$; **a4**) $k = 11, 42$, $T_d = 0, 9$; **a5**) $k = 10, 90$, $T_d = 1$; **b2**) $k = 12, 77$, $T_d = 0, 28$; **b3**) $k = 12, 32$, $T_d = 0, 715$; **b4**) $k = 11, 88$, $T_d = 0, 925$; **b5**) $k = 11, 35$, $T_d = 1$.

estado ressonante do triângulo. Após variação positiva da transmissão, as famílias separam-se formando dois autoestados distintos com funções de onda distintas. A transição mediada pelo deslocamento da transmissão e da energia é suave por consequência do ajuste da função de onda no interior do bilhar até os limites superiores, onde exibem os autoestados **a5** e **b5** do retângulo cujas funções de onda são representadas analiticamente pelos números quânticos 3×1 e 1×2 , respectivamente. Aqui novamente o nó originalmente contido na diagonal do autoestado **ab1** é sustentado por uma das famílias, nesse caso, B, até gerar o autoestado **b5** do retângulo, enquanto nos autoestados de A, ocorre apenas a junção das soluções dos dois triângulos para gerar o autoestado **a5**.

Em III vemos a primeira ocorrência de convergência de transmissividade na região de

interação entre as famílias B e C. Originalmente as famílias A e B situam-se sobre o mesmo ponto no limite inferior $T_d = 0$. Após acréscimo da transmissão na diagonal, os autoestados separam-se formando funções de onda com densidades distintas. Enquanto a dinâmica de

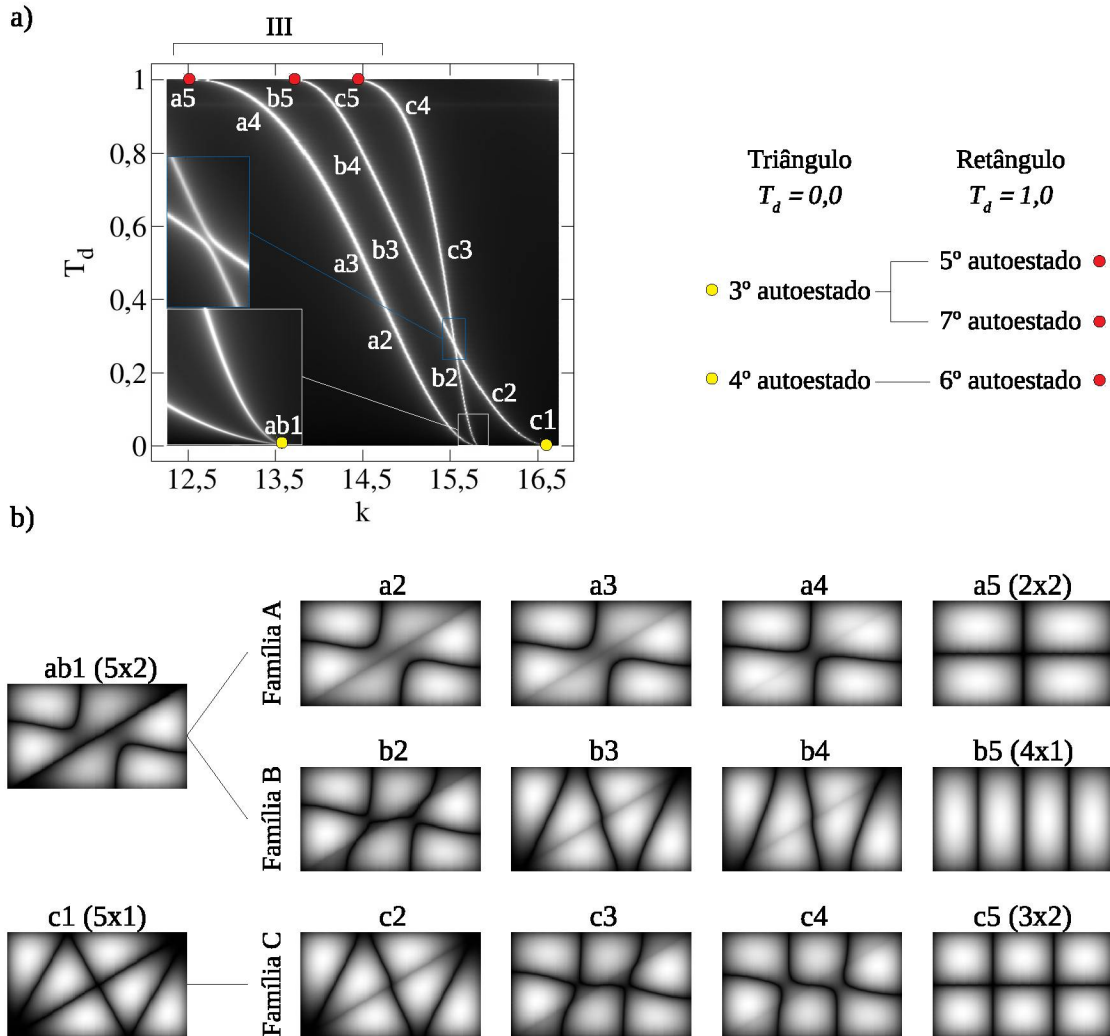


Figura 4.8: a) Gráfico de $k \times T_d \times \langle |T(i, j)|^2 \rangle$ da região III. b) Densidade de probabilidade $|\psi|^2$ associada aos estados: **ab1**) $k = 15,83, T_d = 0$; **a2**) $k = 14,91, T_d = 0,29$; **a3**) $k = 14,38, T_d = 0,57$; **a4**) $k = 13,5, T_d = 0,89$; **a5**) $k = 12,58, T_d = 1$; **b2**) $k = 15,57, T_d = 0,23$; **b3**) $k = 15,3, T_d = 0,39$; **b4**) $k = 14,69, T_d = 0,7$; **b5**) $k = 13,71, T_d = 1$; **c1**) $k = 16,65, T_d = 0$; **c2**) $k = 15,77, T_d = 0,18$; **c3**) $k = 15,39, T_d = 0,51$; **c4**) $k = 15,03, T_d = 0,86$; **c5**) $k = 14,41, T_d = 1$.

A evolui sem aparente interação com B e C, os autoestados de B convergem na direção dos autoestados de C até gerar uma repulsão de níveis com T_d contido na região intermediária do espaço de fase. De acordo com a Fig. 4.8b, as funções de onda referentes aos pontos ab1 e b2,

c1 e c2 são calculadas antes da região de interação. Em seguida, há inversão da morfologia dos autoestados correspondentes a transmissão posterior a repulsão, como visto em b3 a b5 e c3 a c5. Podemos aferir que neste intervalo do espectro, a solução do triângulo representada por ab1 (5×2) irá construir as soluções do retângulo a5 (2×2) e c5 (3×2). Devido ao ponto de convergência, onde os autoestados trocam entre si suas morfologias, o autoestado c1 (5×1) irá construir o autoestado do retângulo b5 (4×1).

A função de onda para as três famílias mostra que a transição entre os limites de transmissão não é abrupta, pois na evolução exibida pelos autoestados, exceto na região de convergência onde há inversão, a densidade da função de onda transita de maneira “suave”, indicando baixa sensibilidade da matriz T aos parâmetros de permeabilidade e energia. Na verdade, a suavidade exibida pela função de onda durante a transição é resultado direto dessa baixa sensibilidade da matriz T , pois não havendo grandes mudanças na dinâmica dos autoestados (das famílias), a morfologia destes tende a transitar sem grandes variações significativas (como observa-se em regiões de convergência, por exemplo).

Nas famílias contidas em IV, a qual é mostrada em detalhes na Fig. 4.9a, constatamos o segundo caso de convergência de autoestados, porém agora com cruzamento (para facilitar a identificação e discussão dos resultados, vamos manter a notação usual na demoninação das famílias), e o primeiro de degenerescência no limite superior. As famílias A e B, compartilham o mesmo autoestado inicial gerado a partir do extremo inferior em que $T_d = 0$. Após aumento da transmissão na diagonal, os autoestados de A evoluem sem interação com os demais conjuntos até formar um dos estados degenerados no extremo superior $T_d = 1$. A família B desenvolve-se até certo ponto em que sua dinâmica converge em direção a C.

Devido a ausência de repulsão entre B e C, podemos aferir que nessa região de convergência não ocorre inversão da morfologia, por isso, é um caso de cruzamento ou degenerescência acidental, em que dois autoestados são calculados sobre uma mesma energia e permeabilidade, mas suas funções de onda não são correspondentes. No entanto, devido a nomenclatura aqui adotada, mesmo não havendo interação, também ocorre uma inversão, porém, na ordem dos autoestados gerados nos dois limites. Por exemplo, de acordo com o aspecto da morfologia exibida nos autoestados da Fig. 4.9b, o autoestado ab1 gerado em $T_d = 0$, que representa o quinto autoestado do triângulo com os números quânticos (6×2), dissocia-se formando dois

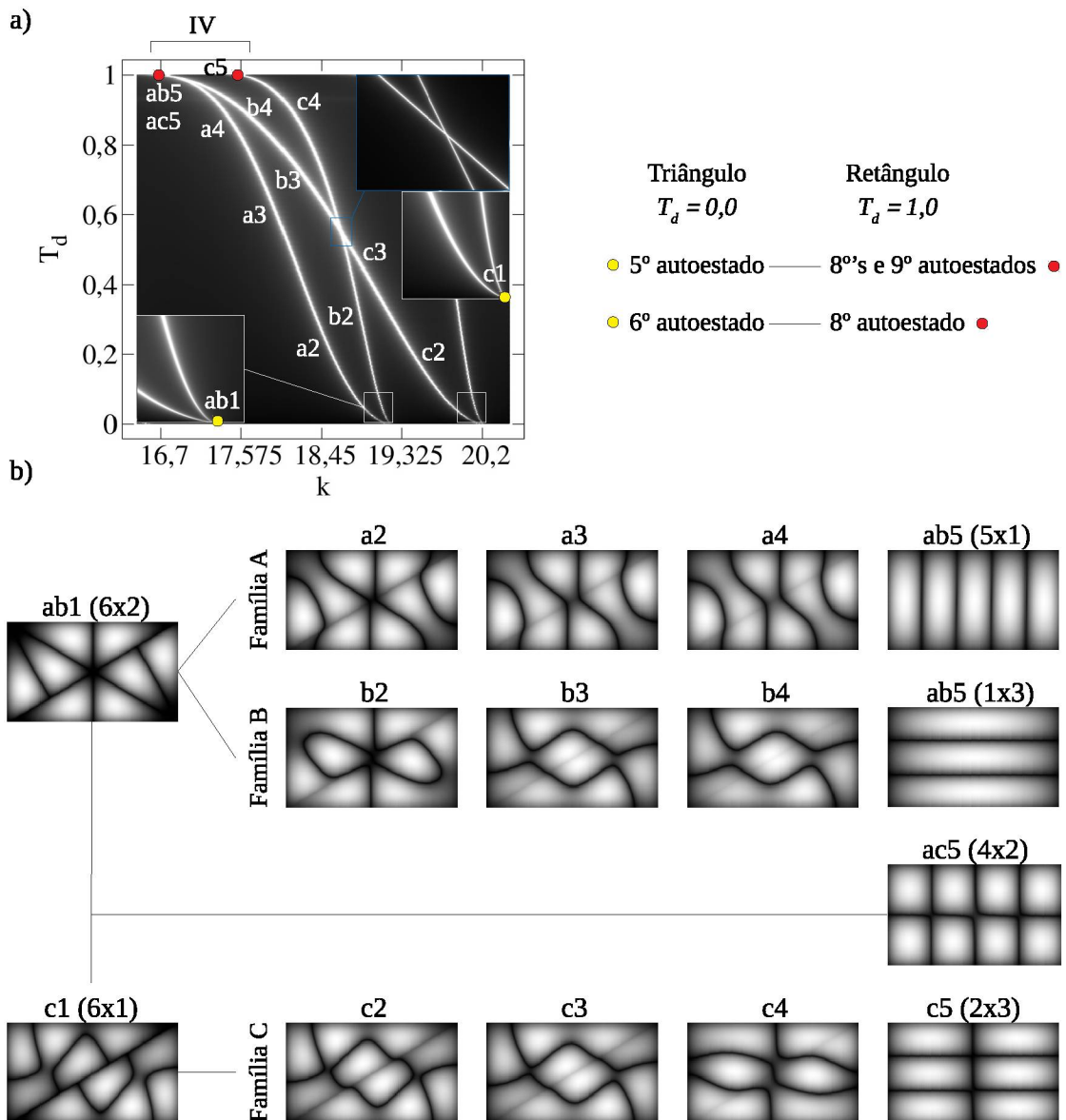


Figura 4.9: a) Gráfico de $k \times T_d \times \langle |T(i, j)|^2 \rangle$ da região IV. b) Densidade de probabilidade $|\psi|^2$ associada aos estados: **ab1)** $k = 19,22$, $T_d = 0$; **a2)** $k = 18,6$, $T_d = 0,17$; **a3)** $k = 17,96$, $T_d = 0,6$; **a4)** $k = 17,63$, $T_d = 0,79$; **ab5) = ac5)** $k = 16,63$, $T_d = 1$; **b2)** $k = 18,83$, $T_d = 0,35$; **b3)** $k = 18,29$, $T_d = 0,69$; **b4)** $k = 17,59$, $T_d = 0,9$; **c1)** $k = 20,22$, $T_d = 0$; **c2)** $k = 19,55$, $T_d = 0,15$; **c3)** $k = 18,75$, $T_d = 0,51$; **c4)** $k = 18,19$, $T_d = 0,87$; **c5)** $k = 17,51$, $T_d = 1$.

autoestados independentes identificados por a's e b's. No espaço de fase para transmissões intermediárias, os autoestados da família A constroem um dos estados degenerados do retângulo identificado por ab5 (5×1), enquanto os autoestados de B constroem o nono autoestado do retângulo c5 (2×3). O sexto autoestado do triângulo c1(6×1) forma o outro autoestado

degenerado do retângulo $ab5$ (1×3).

Investigações foram feitas para determinar a origem do autoestado $ac5$ (4×2) variando θ nas três famílias. Porém, $ac5$ aparentemente tem origem apenas no limite superior, e sua morfologia completa a degenerescência sendo o terceiro autoestado degenerado do retângulo. Logo, os três estados degenerados (5×1), (1×3) e (4×2) possuem mesma energia e transmissão, $k = 16, 63$ e $T_d = 1$. Resumidamente, o quinto autoestado do triângulo ($T_d = 0$) constrói dois dos três estados degenerados do retângulo ($T_d = 1$) e o nono autoestado do retângulo ($T_d = 1$). O sexto autoestado do triângulo ($T_d = 0$) forma o outro autoestado degenerado do retângulo ($T_d = 1$). Essa “quebra” na ordem crescente da nomenclatura dos autoestados é resultado da região de convergência entre as famílias B e C onde, após o cruzamento, ambas as famílias mantêm a tendência de evolução da função de onda.

Uma discussão analítica é capaz de reforçar os resultados exibidos até o momento para os estados quânticos gerados nos dois limites. A função de onda que descreve uma partícula confinada em um poço retangular é similar a expressão (2.62), porém, agora com $l_1 = |\overline{ab}|$ e $l_2 = |\overline{bc}|$. Logo,

$$\psi_{ret,mn}^{(A)}(x, y) = \text{sen} \left(\frac{m\pi}{|\overline{ab}|} x \right) \text{sen} \left(\frac{n\pi}{|\overline{bc}|} y \right). \quad (4.3)$$

O espectro analítico que imprime os autovalores $k^{(A)}$ é obtido substituindo a equação (4.3) na equação de Schrödinger independente do tempo, então

$$k_{ret,mn}^{(A)} = \pi \sqrt{\frac{m^2}{|\overline{ab}|^2} + \frac{n^2}{|\overline{bc}|^2}}. \quad (4.4)$$

De acordo com as dimensões que adotamos $|\overline{ab}| = 1$ e $|\overline{bc}| = 1/\sqrt{3}$, a expressão (4.4) toma a seguinte forma,

$$k_{ret,mn}^{(A)} = \pi \sqrt{m^2 + 3n^2}. \quad (4.5)$$

Há ainda a equação de autovalores do triângulo ($30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$) dado pela equação (2.69),

$$k_{tr,mn}^{(A)} = \frac{2\sqrt{3}}{3} \pi \sqrt{m^2 - mn + n^2}, \quad (4.6)$$

com $m > 2n$. A partir da equação (4.6), os primeiros autovalores de energia associados ao

triângulo são $k_{tr,31}^{(A)} = 9,59$, $k_{tr,41}^{(A)} = 13,07$, $k_{tr,52}^{(A)} = 15,81$, $k_{tr,51}^{(A)} = 16,62$, $k_{tr,62}^{(A)} = 19,19$ e $k_{tr,61}^{(A)} = 20,19$. Estes resultados mostram-se suficientemente próximos aos obtidos numericamente e que podem ser identificados nos autovalores de k nas legendas das figuras 4.6(I), 4.7(II), 4.8(III) e 4.9(IV). É possível também verificar tal concordância na morfologia da função de onda, como descrito pela Fig. 2.8b, onde os autoestados são obtidos analiticamente, ou também pelo gráfico da Fig. 4.2 na qual usamos a solução analítica do triângulo para encontrar o parâmetro de discretização n_d da parede \overline{ac} .

Para o retângulo, os autovalores de energia sob resultado analítico é encontrado via equação (4.5). Então, a julgar por esta, da tabela 4.1 mostra os primeiros autovalores de energia comparados com os dados relativos ao MCP.

A partir da coleta de dados analíticos mostrados acima, somado aos resultados numéricos obtidos até o momento, o MCP mostra-se novamente eficiente na determinação dos níveis de energia em sistemas cujas paredes possuem permeabilidade finita, como também na morfologia da densidade de probabilidade da função de onda associada a estes níveis, com este último permanecendo o principal foco de estudo do nosso trabalho.

Na Fig. 4.10 é exibido um resumo, sob a forma de diagrama, que mostra a relação entre os dois bilhares triangular e retangular quando suas soluções são obtidas no limite inferior com $T_d = 0$ e superior com $T_d = 1$, respectivamente. O primeiro autoestado (1°) do triângulo (3×1), por exemplo, constrói os dois primeiros autoestados (1°) e (2°) do retângulo (1×1) e (2×1). Já para as regiões do espaço de fase em que as famílias desenvolvem-se sob pontos de convergência, os autoestados invertem sua morfologia e o resultado é visto como exemplo no terceiro autoestado do triângulo que, na ordem, gera o quinto e sétimo autoestado do retângulo.

No atual cenário em que tentamos identificar a natureza da convergência de autoestados, seja ela uma interação ou um cruzamento, algumas dificuldades numéricas passam a surgir. Em determinadas regiões como, por exemplo, a evolução das famílias na região III e IV, identificamos na região III uma repulsão entre as famílias B e C, e dessa interação resulta em uma inversão da morfologia entre os autoestados que nela são gerados. Já em IV, ocorre um cruzamento, porém, não há nenhum tipo de interação entre as famílias B e C, logo, variações na morfologia da função de onda são causadas apenas por alterações no potencial da parede

Autovalores de energia do retângulo para $\beta = 30^\circ$

Autoestado	$k^{(A)}$	$k^{(MCP)}$	$(m \times n)$
1 ^o	6,28	6,30	(1 × 1)
2 ^o	8,31	8,33	(2 × 1)
3 ^o	10,88	10,90	(3 × 1)
4 ^o	11,32	11,35	(1 × 2)
5 ^o	12,56	12,58	(2 × 2)
6 ^o	13,69	13,71	(4 × 1)
7 ^o	14,39	14,41	(3 × 2)
8 ^o	16,62	16,63	(5 × 1) (1 × 3) (4 × 2)
9 ^o	17,49	17,51	(2 × 3)

Tabela 4.1: Relação entre os autovalores de energia do retângulo $\beta = 22,5^\circ$ obtidos via método analítico e MCP. m e n são os números quânticos associados às autofunções.

$\bar{a}\bar{c}$. Desse modo, no exemplo dado em IV, os autoestados evoluem independentemente da região de convergência. Quando mencionamos a “tendência” da função de onda em evitar regiões mais fortemente afetadas pela variação de k e T_d , nos referimos também a pontos de cruzamentos, isto é, em uma região de repulsão a função de onda inverte a morfologia para manter a tendência de evolução, enquanto que para regiões de cruzamento, os autoestados mantêm a tendência de evolução, mas, sem interagir com autoestados vizinhos.

Devido a necessidade de atribuir ao método parâmetros dentro de limites aceitáveis para obter resultados cada vez mais próximos do exato, algumas limitações surgem quando pretendemos buscar o tipo de interação em determinados pontos de convergência. Em alguns casos, necessitamos alterar os parâmetros que definem a precisão do método como, por exemplo, o parâmetro μ , o qual, vale lembrar, relaciona-se inversamente ao tamanho da matriz N , e esta última relaciona-se proporcionalmente a exigência computacional. Vejamos o gráfico $k \times T_d \times \langle |T(i, j)|^2 \rangle$ mostrado na Fig. 4.11a. As regiões V a VIII são pontos em que

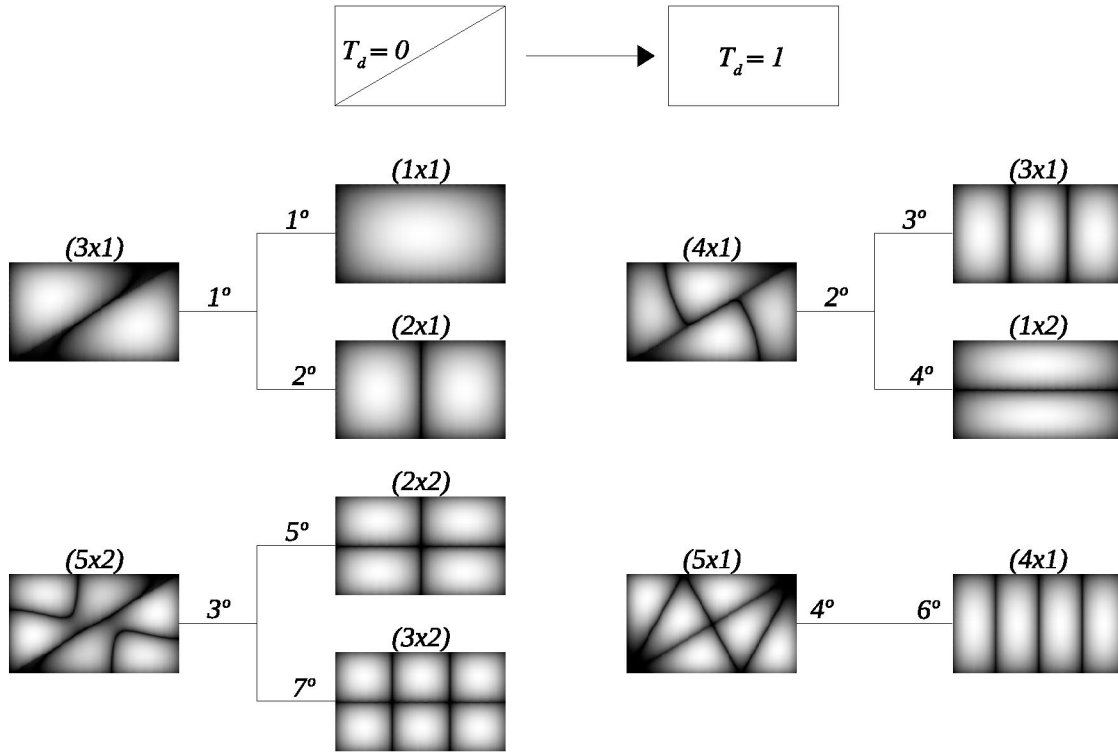


Figura 4.10: Diagrama com a morfologia da função de onda associada aos estados do triângulo e retângulo nos extremos $T_d = 0$ e $T_d = 1$ para o bilhar ($30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$).

há convergência entre as famílias, e nestas calculamos a função de onda associada aos seus autoestados na Fig. 4.11b. As regiões V e VIII são identificadas como repulsão de níveis, enquanto as demais se cruzam (C) gerando degenerescências acidentais.

De acordo com a morfologia apresentada pelos autoestados, a função de onda, tanto em zonas de repulsão quanto de cruzamento, mantém a tendência de evolução, no primeiro caso invertendo a sua morfologia após interagir com a família vizinha e, no segundo, mantendo a tendência de evolução alterando sua morfologia apenas mediante variação do parâmetro de permeabilidade na parede \bar{ac} . Para que a identificação da natureza destas aproximações fosse possível, foi necessário adotar μ cada vez menor em relação ao valor que vinhamos utilizando ($\mu = 0,05$), ou seja $\mu = 0,025$ para a região V e $\mu = 0,02$ para VIII (e $\mu = 0,025$ na repulsão da região III). Para as demais regiões VI e VII impomos μ 's com diversos valores muito abaixo do que normalmente atribuiríamos com o objetivo de identificar uma possível repulsão. No entanto, estas regiões sugerem comportamento cruzado, logo, concluimos que (até onde sabemos) os pontos de convergência VI e VII representam degenerescências acidentais.

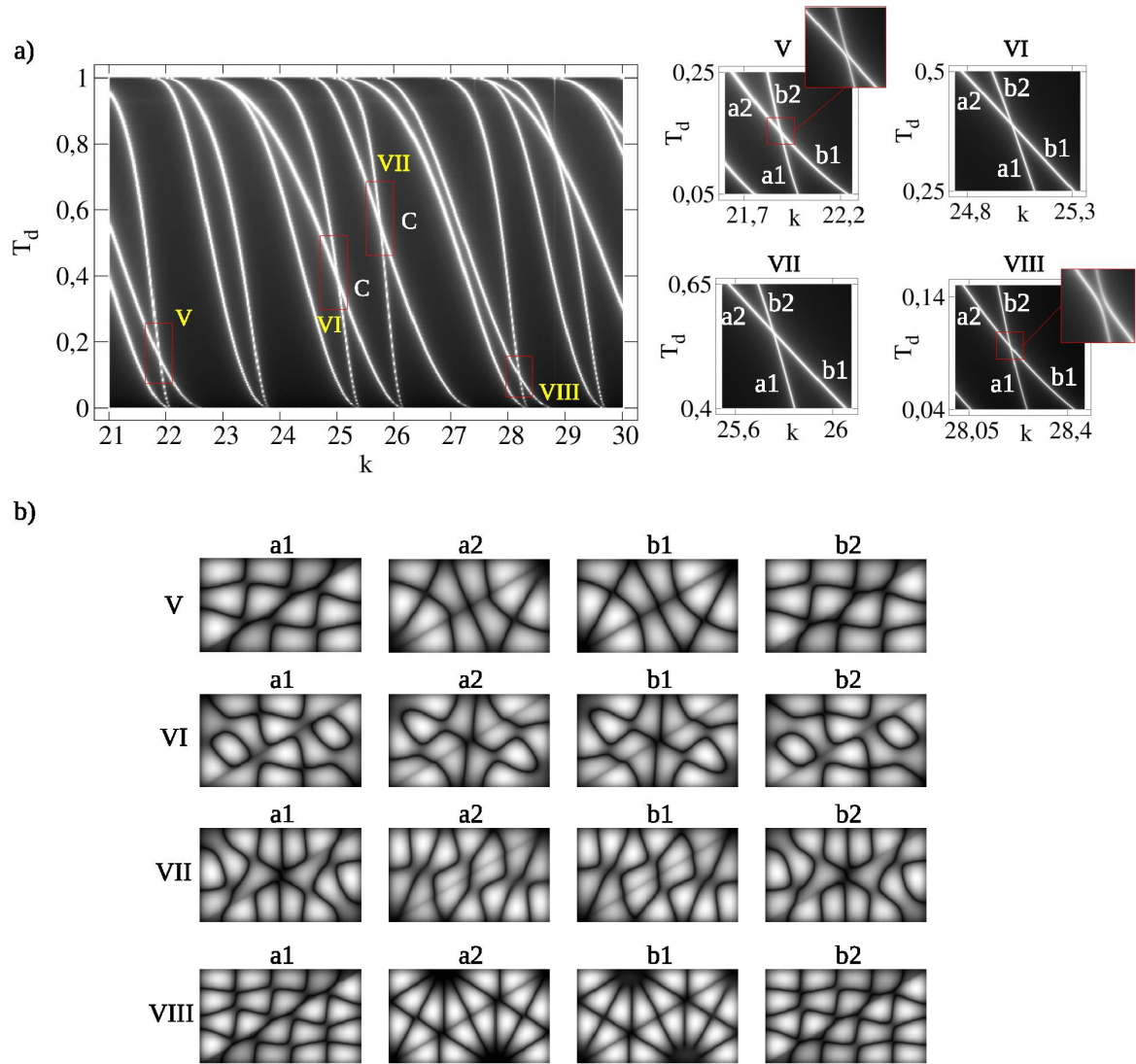


Figura 4.11: a) Gráfico de $k \times T_d \times \langle |T(i,j)|^2 \rangle$ para $k \in [21, 30]$. As regiões V a VIII são ampliadas a direita para identificar a natureza dos pontos de convergência. C representa uma região de cruzamento. b) Densidade de probabilidade $|\psi|^2$ associada aos estados; **V)** **a1)** $k = 21,94$, $T_d = 0,086$; **a2)** $k = 21,73$, $T_d = 0,212$; **b1)** $k = 22,1$, $T_d = 0,082$; **b2)** $k = 21,83$, $T_d = 0,22$. **VI)** **a1)** $k = 25,08$, $T_d = 0,298$; **a2)** $k = 24,88$, $T_d = 0,45$; **b1)** $k = 25,19$, $T_d = 0,304$; **b2)** $k = 24,95$, $T_d = 0,456$. **VII)** **a1)** $k = 25,8$, $T_d = 0,47$; **a2)** $k = 25,64$, $T_d = 0,612$; **b1)** $k = 25,89$, $T_d = 0,482$; **b2)** $k = 25,71$, $T_d = 0,616$. **VIII)** **a1)** $k = 28,23$, $T_d = 0,058$; **a2)** $k = 28,08$, $T_d = 0,13$, **b1)** $k = 28,31$, $T_d = 0,064$; **b2)** $k = 28,15$, $T_d = 0,15$.

4.1.3 Estatística dos níveis de energia

Iremos apresentar agora os dados relativos a estatísticas de níveis para o bilhar retangular ($30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$) com diagonal permeável. Neste caso a contagem de autoestados com o objetivo de equiparar as soluções numéricas e analíticas fica impossibilitada devido a ausência na

equação de Weyl de um parâmetro que descreva a presença de permeabilidade nas paredes do bilhar. Também por este motivo, modificamos a forma como aplicamos o *unfolding* ao espectro como anteriormente era feito usando Weyl. Para que o espaçamento médio s também seja uniforme e igual a 1, obtemos a média entre os espaçamentos de níveis vizinhos e dividimos cada um destes espaçamentos pela média obtida.

O espectro de energia é adotado para $E \in [1, 32400]$ e a contagem de autoestados nesta região imprime uma média nas proximidades de 1200 níveis. A Fig. 4.12 exibe a densidade de probabilidade $P(s)$ para valores de transmissão intermediárias, $T_d = 0, 2$, $T_d = 0, 4$, $T_d = 0, 5$, $T_d = 0, 6$ e $T_d = 0, 8$. As linhas contínuas descrevem as soluções de Poisson e Berry-Robnik e os histogramas são construídos numericamente via MCP. Aparentemente as estatísticas indicam uma considerável tendência a distribuição de Berry-Robnik para todos os valores de transmissão adotados e com diferentes ajustes por meio dos parâmetros ρ_1 e ρ_2 . Os resultados diferem nos limites inferior em que $T_d = 0$ e superior em $T_d = 1$, onde as soluções indicam uma distribuição do tipo Poisson para ambos os casos [35,52]. É importante destacar que para valores de transmissão tal que $T_d \neq 0$, não há necessidade de remoção das autoenergias duplicadas que representam as soluções do triângulo \overline{abca} e \overline{acda} . Considerando uma ligeira variação da transmissão na diagonal, o autoestado originado em $T_d = 0$ dissocia-se para gerar dois autoestados com soluções independentes. A remoção destas autoenergias se faz necessário somente quando a transmissão é nula na diagonal, que disso resulta em dois bilhares triangulares ($30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$).

4.2 Análise de famílias para $\beta = 22, 5^\circ$

Nesta seção presente será realizada a discussão dos resultados obtidos para o bilhar retangular com $\beta = 22, 5^\circ$, como visto na Fig. 4.13. Para o comprimento dos lados, adotamos novamente as paredes horizontais como $|\overline{ab}| = |\overline{cb}| = 1$ e por consequência da escolha de β , as paredes laterais possuem $|\overline{bc}| = |\overline{da}| = \sqrt{2} - 1$. Assim o sistema configura dois bilhares triangulares ($22, 5^\circ, 67, 5^\circ, 90^\circ$) os quais compartilham a mesma diagonal. Vale lembrar que esta configuração geométrica remete a transmissão nula na parede \overline{ac} . Para transmissões intermediárias ou até mesmo no limite superior em que $T_d = 1$, a permeabilidade permite ao

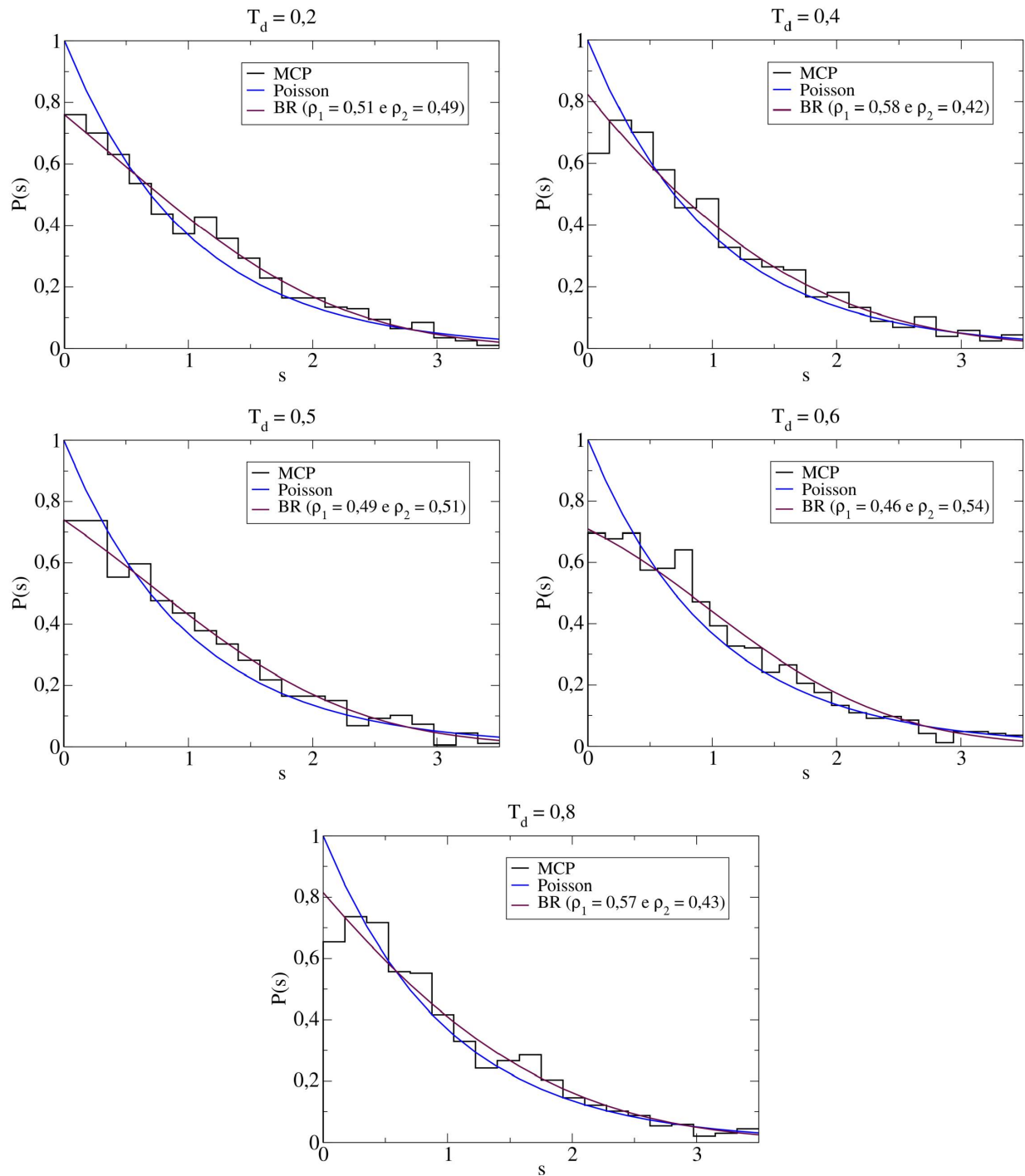


Figura 4.12: Densidade de probabilidade $P(s)$ dos primeiros 1200 níveis de energia para valores intermediários de transmissão. Os histogramas são construídos numericamente via MCP enquanto as curvas representam as distribuições de Poisson e Berry-Robnik.

sistema a fusão das soluções de ambos os bilhares.

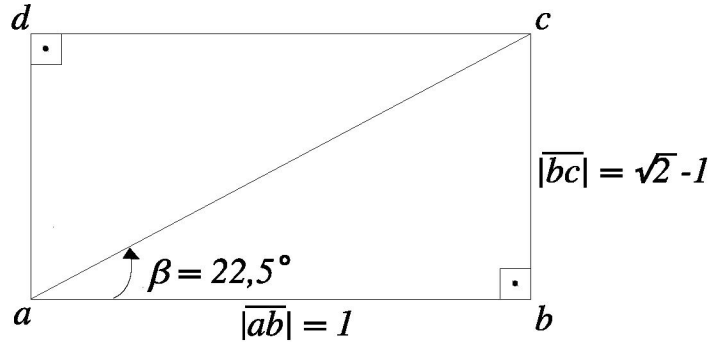


Figura 4.13: Estrutura geométrica atribuída ao bilhar retangular com uma diagonal conectando dois vértices.

4.2.1 Espectro de famílias $k \times T_d$

A Fig. 4.14 exibe a média sobre os elementos (i, j) da matriz de espalhamento, $\langle |T(i, j)|^2 \rangle$, em função do espaço de parâmetros $k \times T_d$. A transmissão na diagonal, descrita pelo eixo das ordenadas, varia desde o limite inferior a partir de $T_d = 0$ até o limite superior $T_d = 1$. As setas indicam esquematicamente o processo de variação da permeabilidade na parede \overline{ac} . O eixo das abscissas a qual traz o intervalo de número de onda é calculada para $k \in [8, 22, 5]$. Neste intervalo de energia são apresentados os primeiros cinco autoestados do triângulo, e os dez primeiros do retângulo. Ao lado do gráfico é mostrado um esquema de como a permeabilidade nas extremidades conecta os autoestados do triângulo e do retângulo. As famílias formando linhas contínuas, representadas pelas regiões mais claras do espaço de fase, evoluem com aspecto semelhante ao que fora observado para o caso anterior.

O decréscimo dos valores de energia pode ser novamente explicado pelo fato de que a área efetiva do bilhar aumenta diante do aumento da transmissão na diagonal. Além do mais, esse deslocamento da energia é mais acentuado nas extremidades da transmissão, desse modo as famílias desenvolvem-se aparentemente sob o ponto de vista de uma letra S ao ser refletida. Em algumas regiões, no entanto, as famílias evoluem até convergirem na direção de famílias vizinhas. Para uma discussão mais detalhada da função de onda dos autoestados da Fig. 4.14, separamos novamente o espaço de parâmetros em regiões I, II, III, IV e V. Por uma

questão de ordem crescente de complexidade, esta última será apresentada após a discussão da região II, ficando então a análise condicionada a seguinte ordem; I, II, V, III e IV.

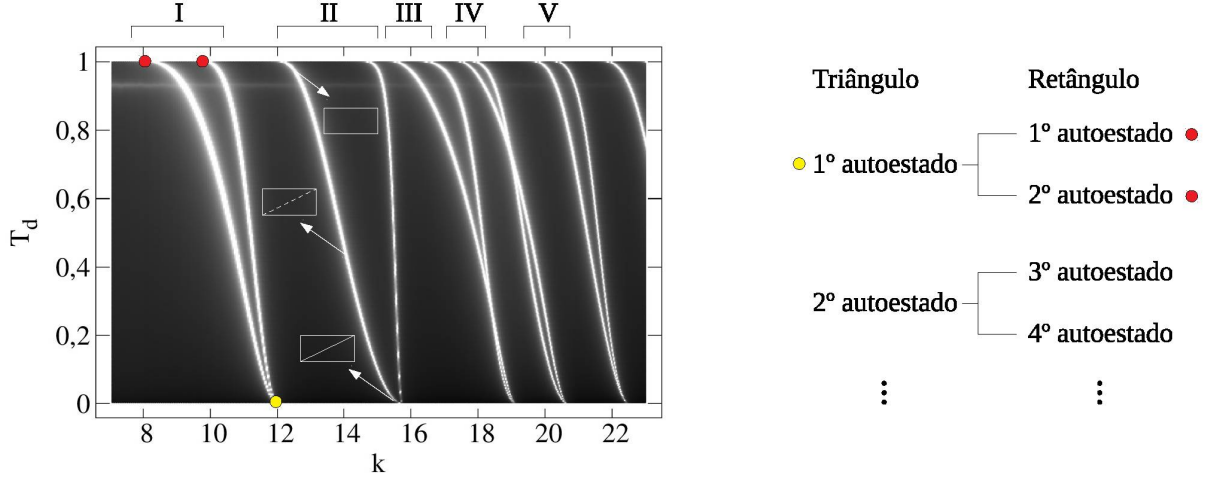


Figura 4.14: Gráfico de $k \times T_d \times \langle |T(i, j)|^2 \rangle$ para $\beta = 22, 5^\circ$. As regiões claras formando curvas representam famílias de autoestados do bilhar com diagonal permeável. As setas indicam esquematicamente como ocorre o processo de variação de transmissão na parede diagonal.

4.2.2 Função de onda $\psi(x, y)$

Como visto anteriormente no gráfico da Fig. 4.14, o conjunto de famílias definidas por I, II e V, não apresentam regiões de interação ou convergência, excetuando quando $T_d = 0$, pois neste limite temos a solução do triângulo $(22, 5^\circ, 67, 5^\circ, 90^\circ)$, em que todas as paredes do bilhar possuem permeabilidade infinita. No entanto, é importante novamente destacar que a sobreposição das famílias quando $T_d = 0$ não é resultado de degenerescência, tendo em vista inclusive a natureza irregular da geometria atribuída para este bilhar [73].

A Fig. 4.15a exibe a evolução das duas primeiras famílias para $k \in [8, 12]$. Ao lado direito está indicado a relação entre alguns autoestados gerados nos dois limites de transmissão. Em ambas as famílias, a variação positiva da transmissão na diagonal resulta no deslocamento do módulo das energias de ressonância de tal forma que o estado inicial, correspondente a solução do triângulo, possui maior módulo de energia em relação aos estados finais, que são correspondentes a solução do retângulo. A partir do limite inferior em que ambas as famílias

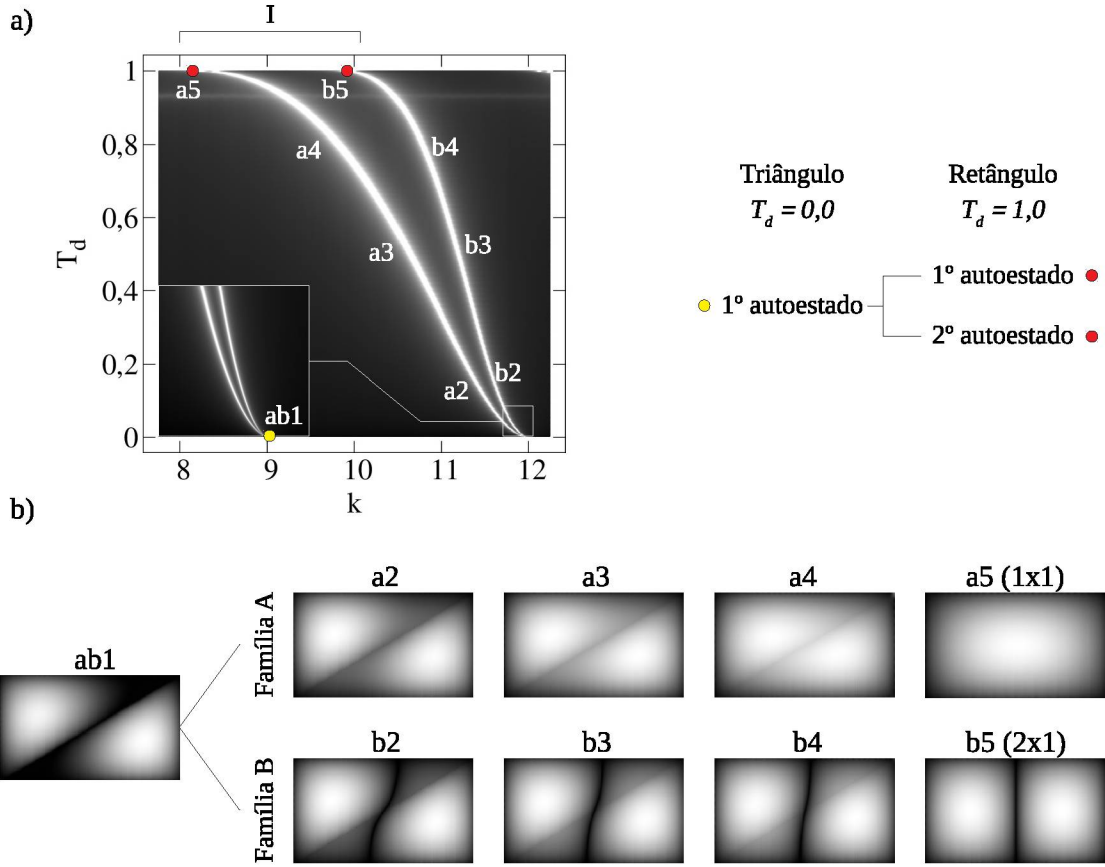


Figura 4.15: a) Gráfico de $k \times T_d \times \langle |T(i, j)|^2 \rangle$ da região I. b) Densidade de probabilidade $|\psi|^2$ associada aos estados: **ab1)** $k = 12,02$, $T_d = 0$; **a2)** $k = 11,38$, $T_d = 0,15$; **a3)** $k = 10,64$, $T_d = 0,5$; **a4)** $k = 9,89$, $T_d = 0,78$; **a5)** $k = 8,24$, $T_d = 1$; **b2)** $k = 11,59$, $T_d = 0,16$; **b3)** $k = 11,16$, $T_d = 0,52$; **b4)** $k = 10,86$, $T_d = 0,75$; **b5)** $k = 9,87$, $T_d = 1$.

estão sobrepostas sobre uma mesma energia e transmissão $T_d = 0$, a densidade da função de onda exibe o primeiro autoestado do triângulo, identificado pelo autoestado ab1 da Fig. 4.15b. Com o aumento da transmissão, os autoestados mostram pela morfologia associada que a solução de origem dissocia-se formando duas soluções independentes que evoluem mediante transição suave da função de onda, até construir os dois primeiros autoestados do retângulo a5 (1×1) e b5 (2×1) em $T_d = 1$. No caso A, a diagonal “desaparece” diante do aumento da transmissão, enquanto no caso B o nó originalmente em ab1 “sobrevive” para formar b5.

Nas regiões delimitadas por II e V a dinâmica associada as famílias reproduzem aspecto semelhante ao que é exibido na região I. Em II da Fig. 4.16a as energias ressonantes têm módulo em queda de acordo com o aumento da transmissão na parede \bar{ac} . A família A por sua

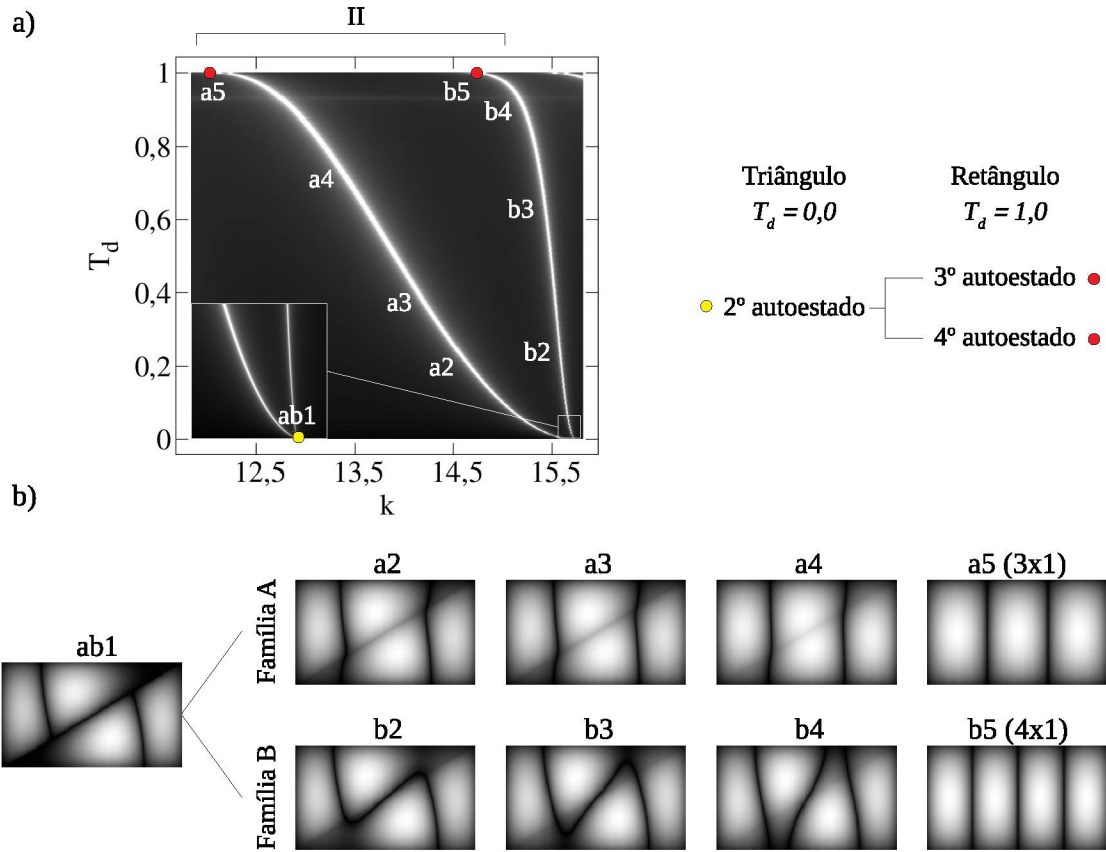


Figura 4.16: a) Gráfico de $k \times T_d \times \langle |T(i,j)|^2 \rangle$ da região II. b) Densidade de probabilidade $|\psi|^2$ associada aos estados: **ab1)** $k = 15,74, T_d = 0$; **a2)** $k = 14,59, T_d = 0,225$; **a3)** $k = 14,19, T_d = 0,38$; **a4)** $k = 13,35, T_d = 0,735$; **a5)** $k = 12,12, T_d = 1$; **b2)** $k = 15,57, T_d = 0,245$; **b3)** $k = 15,42, T_d = 0,645$; **b4)** $k = 15,26, T_d = 0,865$; **b5)** $k = 14,69, T_d = 1$.

vez possui maior influência da transmissividade a esta variação que a família B. No conjunto de autoestados gerados nas duas famílias, a função de onda associada ao segundo estado do triângulo $ab1$, gerado no limite inferior $T_d = 0$, constrói o terceiro e quarto autoestado do retângulo no limite superior $T_d = 1$ com os números quânticos definidos por $a5$ (3×1) e $b5$ (4×1). Na região V, mostrado na Fig. 4.18, temos a ocorrência de transição da função de onda a partir do quinto autoestado do triângulo definido por $ab1$ para a construção do nono e décimo autoestado do retângulo definidos por $a5$ (4×2) e $b5$ (6×1), respectivamente.

A região III mostrada na Fig. 4.17a descreve o primeiro caso de convergência na dinâmica das famílias A e B. O autoestado inicial $ab1$ cuja coordenada está localizada em $T_d = 0$, separa-se em dois conjuntos de autoestados com funções de onda distintas. Ambas as famílias

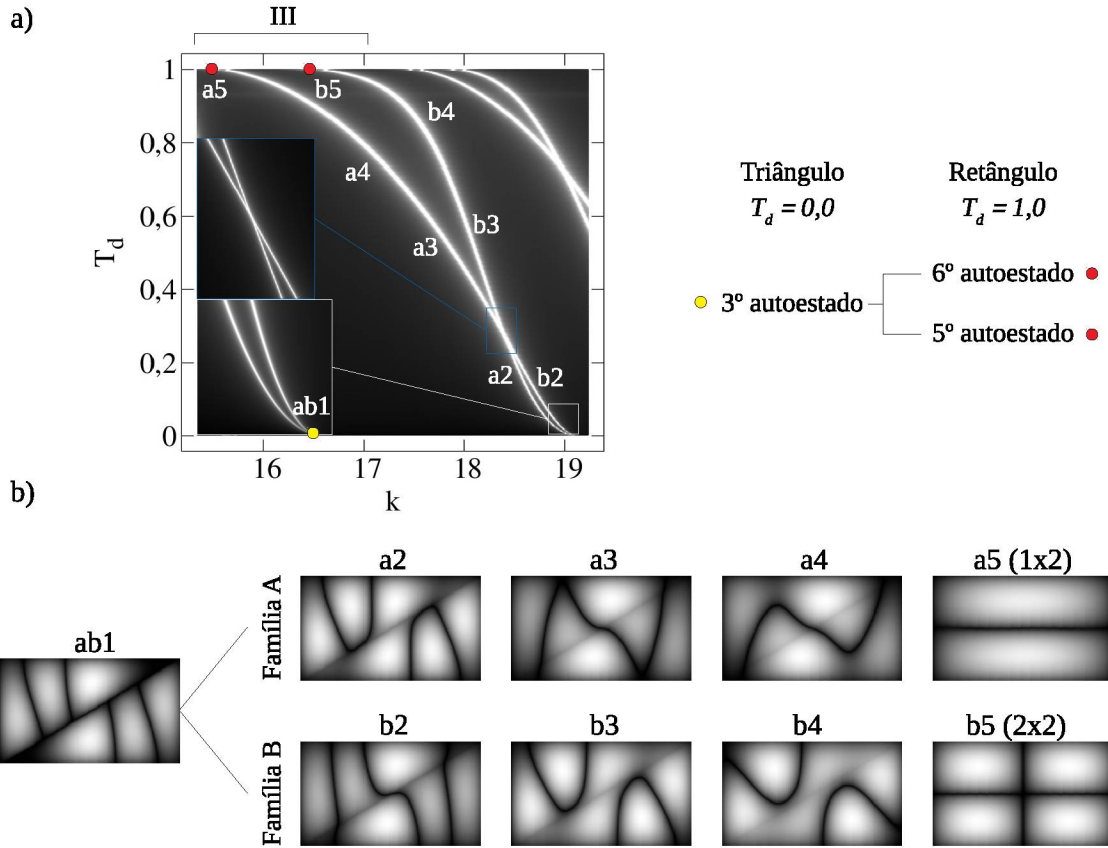


Figura 4.17: a) Gráfico de $k \times T_d \times \langle |T(i, j)|^2 \rangle$ da região III. b) Densidade de probabilidade $|\psi|^2$ associada aos estados: **ab1**) $k = 19, 13, T_d = 0$; **a2**) $k = 18, 51, T_d = 0, 195$; **a3**) $k = 17, 82, T_d = 0, 53$; **a4**) $k = 17, 2, T_d = 0, 74$; **a5**) $k = 15, 52, T_d = 1$; **b2**) $k = 18, 57, T_d = 0, 185$; **b3**) $k = 18, 05, T_d = 0, 55$; **b4**) $k = 17, 55, T_d = 0, 85$; **b5**) $k = 16, 45, T_d = 1$.

após a dissociação mostram novamente que os autoestados evoluem sob uma transição suave mediante variação da transmissão até interagirem sob o ponto de cruzamento. O cruzamento mencionado condiciona os autoestados a evoluírem sem interação com os autoestados vizinhos, o que ocorre é uma inversão na ordem da nomenclatura, de tal forma então que o terceiro autoestado do triângulo originalmente calculado no limite inferior irá construir, na ordem, o sexto e o quinto autoestado do retângulo definidos por b5 (2×2) e a5 (1×2), respectivamente.

As famílias contidas em IV mostram as dinâmicas com cruzamento na região do espaço de fase mais próxima ao limite superior $T_d = 1$. A partir do autoestado ab1 calculado inicialmente em $T_d = 0$, os autoestados após dissociação invertem a sua morfologia após convergir

com a família vizinha nas proximidades de $T_d = 0,75$. Neste caso o quarto autoestado do triângulo irá formar o oitavo e sétimo autoestado do retângulo b5 (3×2) e a5 (5×1), respectivamente.

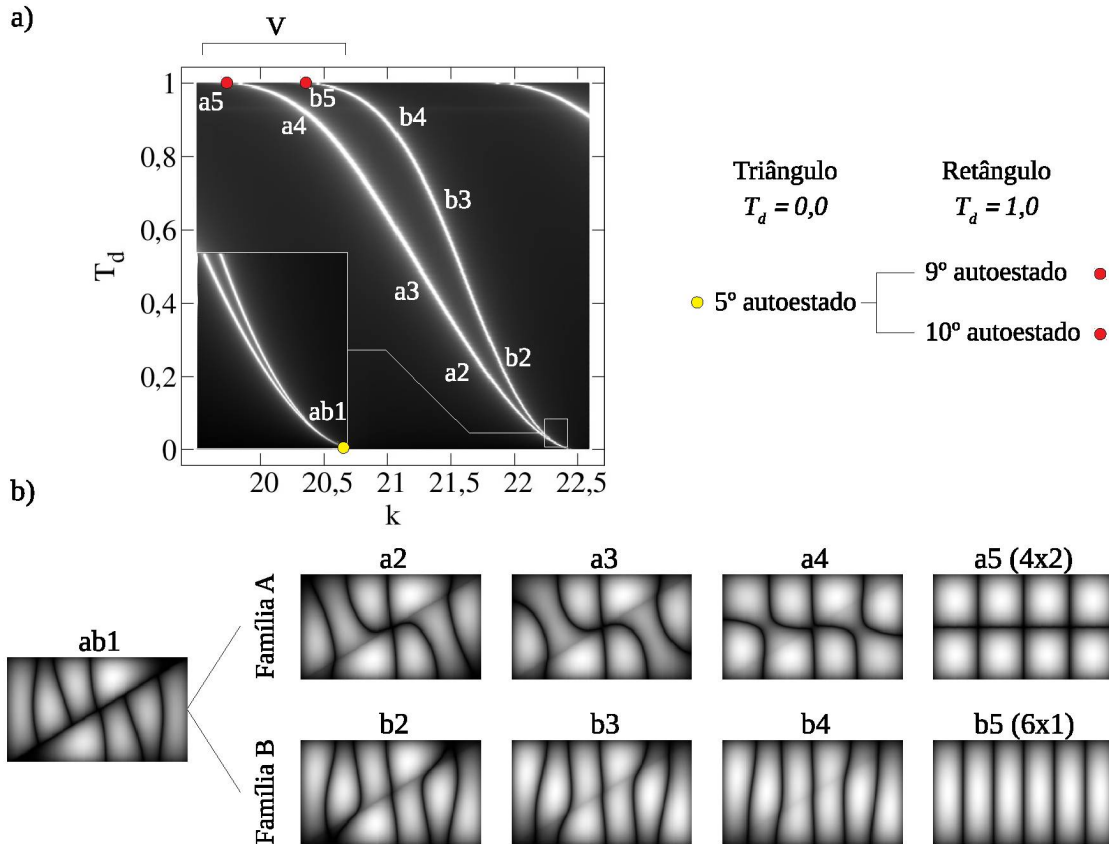


Figura 4.18: a) Gráfico de $k \times T_d \times \langle |T(i,j)|^2 \rangle$ da região V. b) Densidade de probabilidade $|\psi|^2$ associada aos estados: **ab1**) $k = 22, 49, T_d = 0$; **a2**) $k = 21, 71, T_d = 0, 24$; **a3**) $k = 21, 38, T_d = 0, 42$; **a4**) $k = 20, 44, T_d = 0, 89$; **a5**) $k = 19, 72, T_d = 1$; **b2**) $k = 21, 87, T_d = 0, 24$; **b3**) $k = 21, 38, T_d = 0, 66$; **b4**) $k = 20, 9, T_d = 0, 92$; **b5**) $k = 20, 33, T_d = 1$.

Como não dispomos de um método analítico que descreva as soluções do bilhar triangular $(22, 5^\circ, 67, 5^\circ, 90^\circ)$, faremos uma investigação no âmbito apenas do caso retangular. Para isso, usamos a equação de autovalores dada por (4.4). Com as dimensões das paredes definidas por $|AB| = 1$ e $|BC| = \sqrt{2} - 1$, o espectro analítico neste caso é

$$k_{ret,mn}^{(A)} = \pi \sqrt{m^2 + \frac{n^2}{(\sqrt{2} - 1)^2}}. \quad (4.7)$$

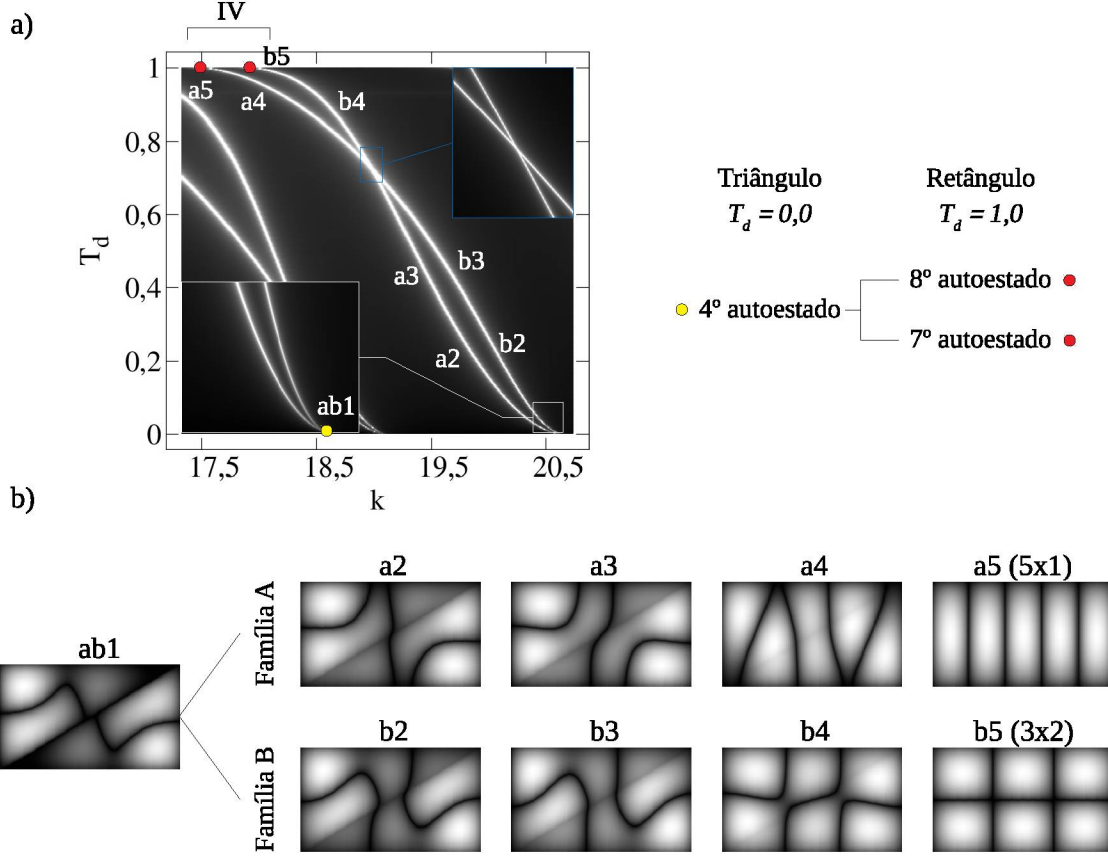


Figura 4.19: a) Gráfico de $k \times T_d \times \langle |T(i,j)|^2 \rangle$ da região IV. b) Densidade de probabilidade $|\psi|^2$ associada aos estados: **ab1**) $k = 20,66, T_d = 0$; **a2**) $k = 19,91, T_d = 0,19$; **a3**) $k = 19,5, T_d = 0,41$; **a4**) $k = 18,28, T_d = 0,91$; **a5**) $k = 17,46, T_d = 1$; **b2**) $k = 20,09, T_d = 0,21$; **b3**) $k = 19,69, T_d = 0,42$; **b4**) $k = 18,56, T_d = 0,91$; **b5**) $k = 17,88, T_d = 1$.

A tabela 4.2 mostra os autovalores de energia obtidos analiticamente a partir da equação (4.7), em comparação com os autovalores calculados via MCP.

A relação entre a função de onda calculada para os estados inicial e final do bilhar retangular é mostrado no diagrama da Fig. 4.20. Neste espaço de parâmetros, não detectamos nenhuma degenerescência no limite inferior e superior. No limite inferior, este resultado já era esperado antecipadamente tendo em vista que nesta geometria com $\beta = 22,5^\circ$, não há ocorrência de estados degenerados. Vale lembrar que no espaço de fase que descreve o terceiro e quarto autoestado do triângulo, não há inversão da morfologia da função de onda na região de cruzamento, porém, ocorre uma inversão na ordem das nomenclaturas adotadas, de tal maneira que, por exemplo, o quarto autoestado (4º) do triângulo resulta por meio da

Autovalores de energia do retângulo para $\beta = 22,5^\circ$

Autoestado	$k^{(A)}$	$k^{(MCP)}$	$(m \times n)$
1 ^o	8,20	8,24	(1 × 1)
2 ^o	9,84	9,87	(2 × 1)
3 ^o	12,09	12,12	(3 × 1)
4 ^o	14,67	14,69	(4 × 1)
5 ^o	15,49	15,52	(1 × 2)
6 ^o	16,41	16,45	(2 × 2)
7 ^o	17,44	17,46	(5 × 1)
8 ^o	17,85	17,88	(3 × 2)
9 ^o	19,69	19,72	(4 × 2)
10 ^o	20,31	20,33	(6 × 1)

Tabela 4.2: Relação entre os autovalores de energia do retângulo $\beta = 22,5^\circ$ obtidos via método analítico e MCP. m e n são os números quânticos associados às autofunções.

variação positiva da transmissão no oitavo (8^o) e sétimo (7^o) autoestado do retângulo, nesta ordem.

Como discutido nesta seção, variações no potencial da parede \overline{ac} não resultaram em repulsões de níveis para os primeiros autoestados calculados em $k \in [8, 22]$. De acordo com o que fora abordado, os autoestados evoluem sob aspecto de convergência em determinadas regiões do espaço de fase, e em todas elas ocorrem cruzamentos entre famílias. Para uma busca mais ampla a respeito das regiões de convergência, mostramos na Fig. 4.21a a densidade de autoestados para $k \in [30, 40]$ sob a mesma variação de transmissão $T_d \in [0, 1]$. As regiões VI, VII, VIII e IX são ampliações de famílias em aspecto de convergência mediante aproximação de autoestados vizinhos, e são exibidas ao lado da Fig. 4.21a. Na Fig 4.21b, plotamos a função de onda associada a estes autoestados antes (a1 e b1) e após (a2 e b2) a aproximação. Uma repulsão e um cruzamento (C) são identificados na região VI e uma repulsão na região IX, enquanto nas demais regiões VII e VIII são exibidos cruzamentos ou degenerescências

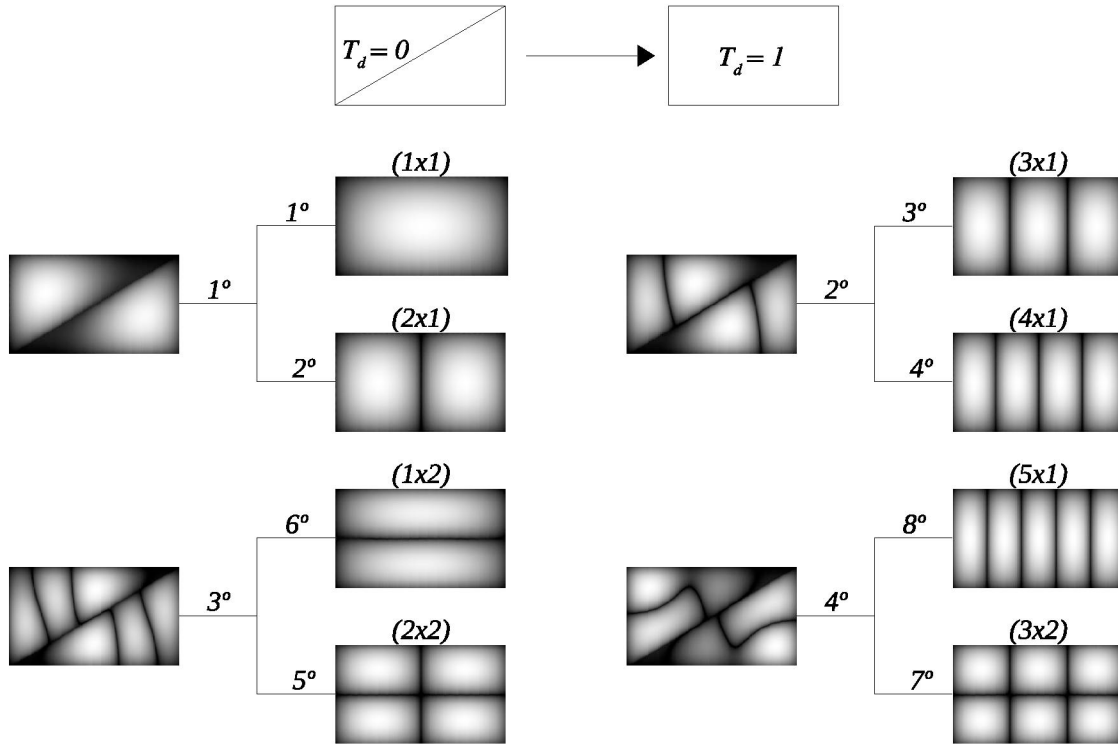


Figura 4.20: Diagrama com a morfologia da função de onda associada aos estados do triângulo e retângulo nos extremos $T_d = 0$ e $T_d = 1$ para o caso $(22, 5^\circ, 67, 5^\circ, 90^\circ)$.

acidentais.

4.2.3 Estatística dos níveis de energia

Iremos agora calcular as estatísticas de níveis para determinar a dinâmica mais apropriada para o sistema retangular $(22, 5^\circ, 67, 5^\circ, 90^\circ)$. Antes de avaliarmos a densidade de probabilidade $P(s)$ para valores intermediários de transmissão, vamos obter a contagem de autoestados relativa ao sistema na qual a transmissão nula na diagonal define as soluções do triângulo $(22, 5^\circ, 67, 5^\circ, 90^\circ)$. Neste limite caracterizado por $T_d = 0$, as energias de ressonância obtidas pelo método numérico são duplicadas, ou seja, são energias que remetem as soluções do triângulo superior \overline{acda} e inferior \overline{abca} . Com isso, a contagem de autoestados via MCP precisa do mesmo ajuste que fora feito anteriormente para o caso $(30^\circ, 60^\circ, 90^\circ)$. Porém, para este último, tínhamos em mãos a equação exata de autovalores para que fosse possível calcular analiticamente o espaçamento médio entre níveis e dessa forma obter o melhor ajuste possível. No caso agora em questão, não dispomos de uma equação que defina analiticamente as

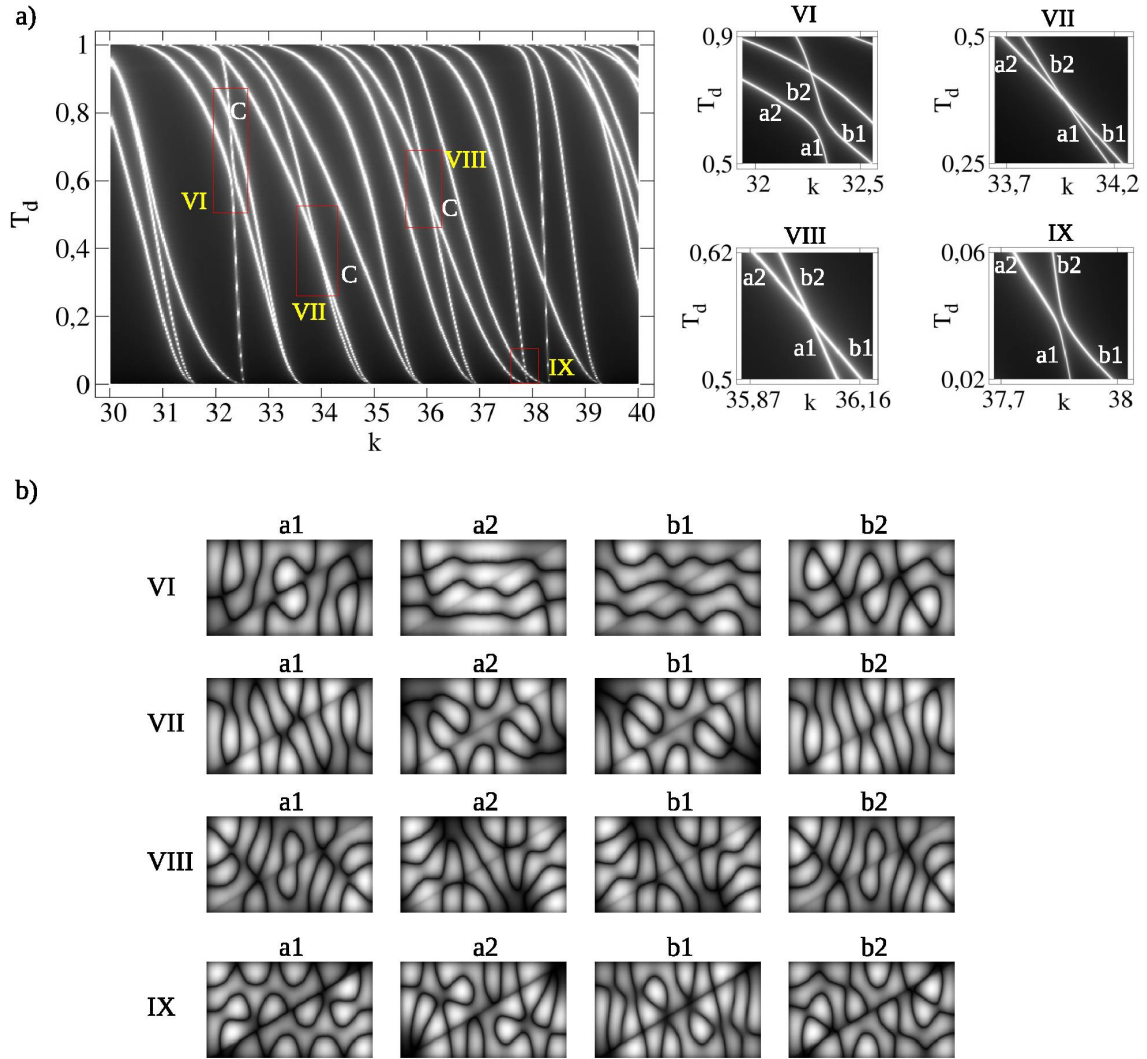


Figura 4.21: a) Gráfico de $k \times T_d \times \langle |T(i,j)|^2 \rangle$ para $k \in [30, 40]$. As regiões V a VIII são ampliadas a direita para identificar a natureza dos pontos de convergência. C representa uma região de cruzamento. b) Densidade de probabilidade $|\psi|^2$ associada aos estados; **VI)** **a1)** $k = 32, 34$, $T_d = 0, 5$; **a2)** $k = 32, 1$, $T_d = 0, 69$; **b1)** $k = 32, 5$, $T_d = 0, 53$; **b2)** $k = 32, 3$, $T_d = 0, 7$. **VII)** **a1)** $k = 34, 08$, $T_d = 0, 3$; **a2)** $k = 33, 79$, $T_d = 0, 45$; **b1)** $k = 34, 13$, $T_d = 0, 3$; **b2)** $k = 33, 85$, $T_d = 0, 45$. **VIII)** **a1)** $k = 36, 06$, $T_d = 0, 53$; **a2)** $k = 35, 5$, $T_d = 0, 59$; **b1)** $k = 36, 09$, $T_d = 0, 53$; **b2)** $k = 35, 98$, $T_d = 0, 59$. **IX)** **a1)** $k = 37, 86$, $T_d = 0, 027$; **a2)** $k = 37, 78$, $T_d = 0, 05$; **b1)** $k = 37, 93$, $T_d = 0, 027$; **b2)** $k = 37, 84$, $T_d = 0, 05$.

;

energias deste sistema, então o ajuste é feito através da remoção manual de uma das energias duplicadas condicionado a expressão de Weyl, que define a média de autoestados contidos em um determinado intervalo de energia.

A Fig. 4.22 mostra a contagem de autoestados $N(E)$ em função da energia para $E \in [32, 400]$. A curva contínua exibe a quantidade de autoestados obtidos analiticamente por meio da equação de Weyl e a função de escada espectral se refere a contagem de autoestados obtidas numericamente pelo MCP. Com os dados relativos ao nosso método, o MCP mostra uma boa margem de proximidade com os dados da fórmula de Weyl, e com isso podemos com segurança determinar a dinâmica mais apropriada para o limite inferior cuja transmissão é nula na parede \overline{ac} .

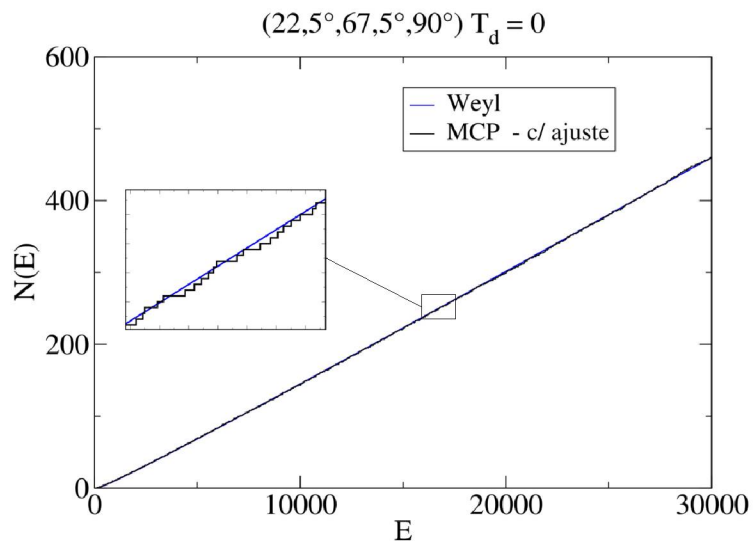


Figura 4.22: Função de escada espectral obtida numericamente via MCP e analiticamente via Weyl. O ajuste consiste na remoção de uma das energias duplicadas que são soluções dos triângulos superior \overline{acda} e inferior \overline{abca} quando a parede \overline{ac} é totalmente impermeável ($T_d = 0$).

A densidade de probabilidade $P(s)$ para o sistema descrito no parágrafo anterior encontra-se junto aos resultados para transmissões intermediárias na Fig. 4.23. De acordo com o histograma obtido pelo MCP no primeiro caso em que a diagonal possui transmissão nula, a densidade $P(s)$ descreve uma dinâmica na qual a distribuição de níveis sugere uma distribuição de Brody com parâmetro $\lambda = 0,7$. Para as demais transmissões, os histogramas indicam uma tendência a dinâmica de Berry-Robnik com variações nos parâmetros ρ_1 e ρ_2 .

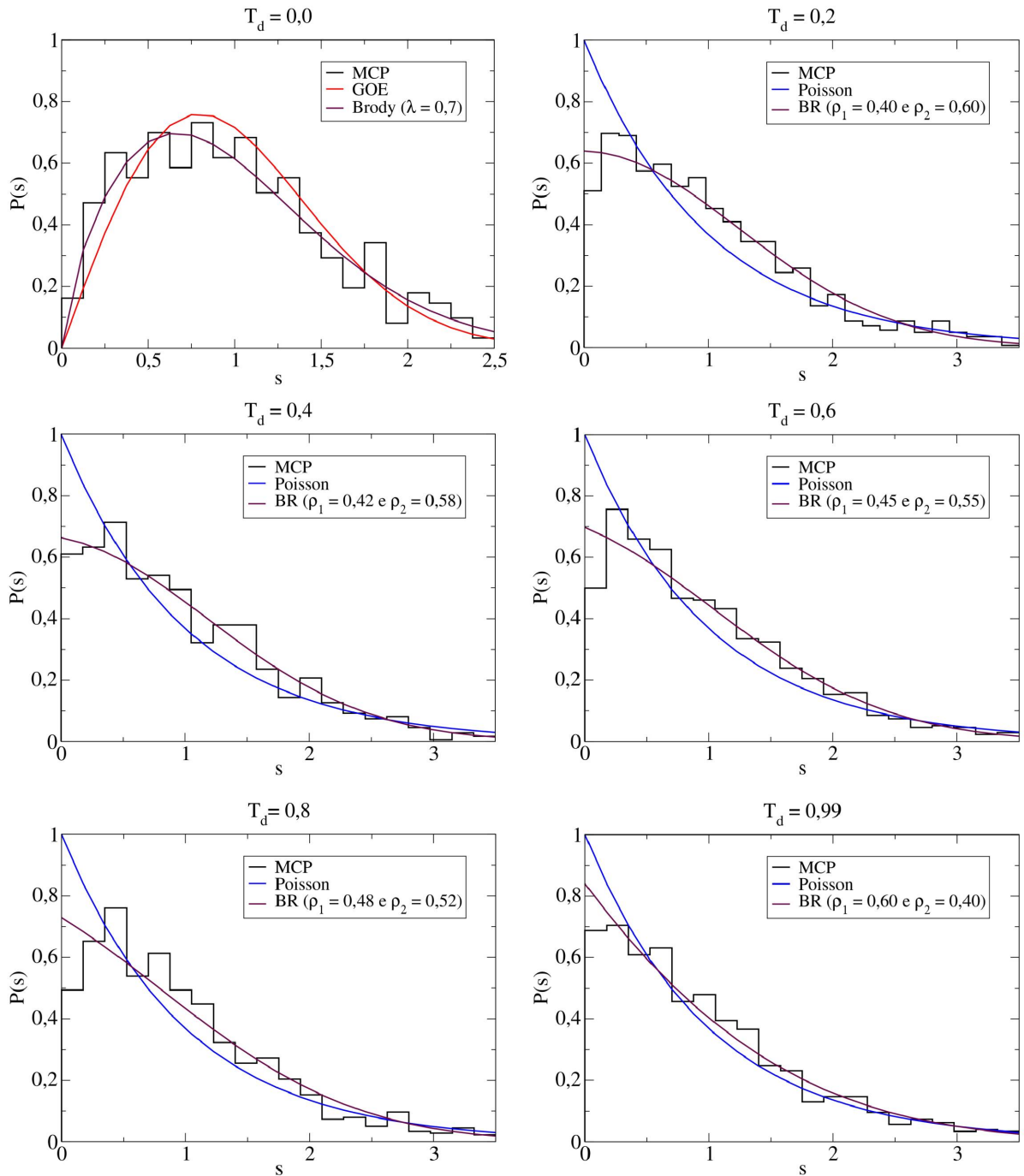


Figura 4.23: Densidade de probabilidade $P(s)$ dos primeiros 1200 nveis de energia para valores intermedirios de transmisso. Para a transmisso $T_d = 0$, $P(s)$  calculada para os primeiros 492 nveis. Os histogramas so montados numericamente via MCP e as curvas se referem a distribuio de Brody para o sistema com $T_d = 0$ e a distribuio de Berry-Robnik para transmisses intermedirias.

4.3 Conclusões parciais

O objeto de estudo deste capítulo consistiu na geometria descrita por uma bilhar retangular com um segmento de reta conectando dois vértices. O parâmetro responsável pelo dimensionamento das paredes do bilhar ficou condicionado a inclinação da diagonal definida pelo ângulo β . Em primeira análise, avaliamos as soluções que compõe o retângulo cujo $\beta = 30^\circ$. Desta configuração o retângulo é construído para formar dois triângulos $(30^\circ, 60^\circ, 90^\circ)$ compartilhando a mesma diagonal. Na segunda seção, adotamos $\beta = 22,5^\circ$, a qual descreve dois triângulos $(22,5^\circ, 67,5^\circ, 90^\circ)$.

Para o primeiro caso $\beta = 30^\circ$, avaliamos as propriedades da matriz $T(i, j)$ de espalhamento para os primeiros níveis com $k \in [6, 20]$, enquanto modificamos a transmissão na parede diagonal desde o limite inferior definido por $T_d = 0$ até o limite superior $T_d = 1$. O contorno periférico manteve-se sob mesma transmissão, e seu valor adotado foi de $T_p = 0$. De acordo com dados relativos a matriz de espalhamento, as famílias desenvolvem-se descrevendo suaves variações na dinâmica entre os limites de transmissão, sendo mais fortemente influenciadas nas regiões próximas aos limites inferior e superior. Em todos os casos os valores das energias de ressonância se deslocam inversamente ao aumento da transmissão. Essa variação pode ser comparada ao formato da letra S quando refletida. Podemos entender esse aspecto devido ao aumento da área do bilhar quando a transmissão varia positivamente na diagonal. Com o aumento da transmissão, a área do bilhar aumenta, com isso o comprimento de onda da solução interna ao bilhar também aumenta e, pela dependência inversa do comprimento de onda com a energia, esta se desloca na direção de um menor valor. Em algumas regiões do espaço de fase $k \times T_d$, identificamos interações entre famílias, nas quais em alguns casos pudemos classificar a interação como uma repulsão de níveis. Nestas observamos novamente a tendência da função de onda em evitar desvios acentuados no parâmetro de permeabilidade, e o resultado disso é o comportamento de *avoided crossing* [103–105], o qual se assemelha a uma transição adiabática de fase [107].

Para classificar as soluções presentes em cada família, avaliamos a morfologia da função de onda dos autoestados calculada nas regiões intermediárias de transmissão, assim como nos dois limites inferior e superior. A partir do limite inferior em que a transmissão é nula,

os autoestados estão sobrepostos sobre uma mesma energia a qual configura a solução do bilhar triangular ($30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$). Com a variação da transmissão, ocorre uma quebra das autoenergias e o resultado é a dissociação dos autoestados com funções de onda independentes até construírem os autoestados do bilhar retangular no limite superior cuja transmissão é máxima. No entanto, essa dissociação não é via de regra para todos os casos em que a transmissão é nula. Em algumas situações, uma mesma família pode evoluir sem interação aparente com as demais, deste modo um único autoestado carecterístico do triângulo formará outro único autoestado do retângulo.

Mediante teoria do espaçamento de níveis, tentamos descrever de forma sucinta a dinâmica mais apropriada para o referido sistema. De acordo com os histogramas obtidos pelo MCP, transmissões intermediárias mostram uma forte tendência a distribuição de Berry-Robnik com diferentes ajustes dos parâmetros ρ_1 e ρ_2 . Tais resultados apontam para um sistema com dinâmica pseudo-integrável. Dados já existentes na literatura indicam que para uma transmissão nula, ou seja, $T_d = 0$, as soluções descrevem uma dinâmica regular dos níveis de energia característica do triângulo ($30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$), no qual exhibe uma distribuição do tipo Poisson [52]. Para transmissão máxima, $T_d = 1$, temos a solução do retângulo, cujo densidade de probabilidade também obedece a uma curva de Poisson [35].

Para o caso em que $\beta = 22,5^\circ$, os resultados mostram-se com relativa semelhança ao caso $\beta = 30^\circ$. As autoenergias do sistema se ajustam inversamente a variação da transmissão devido ao aumento da área efetiva do bilhar. No intervalo do espectro estudado, todas as famílias dissociam-se após pequenas variações da permeabilidade na parede diagonal, onde originalmente encontram-se sobrepostas em uma mesma coordenada de $k \times T_d$ associados. A sobreposição em $T_d = 0$, e posterior separação das famílias em $0 < T_d < 1$, indica que cada autoestado originado no limite inferior do espaço de fase irá formar um ou mais autoestados do retângulo no limite $T_d = 1$.

Algumas regiões do espaço de parâmetros também apresentam interações entre famílias e conseqüente repulsão de níveis. De acordo com os dados obtidos no cálculo da função de onda, a densidade de probabilidade apresenta morfologia com transição suave mediante acréscimo da permeabilidade e também de inversão quando calculada em regiões de repulsão entre famílias. No cálculo estatístico, identificamos uma forte tendência do sistema a se comportar

de acordo com a distribuição de Berry-Robnik, excetuando o caso em que a transmissão na diagonal é nula, pois neste caso o espaçamento de níveis indica uma distribuição do tipo Brody, com parâmetro variacional $\lambda = 0,7$. Ambos os resultados sugerem novamente um sistema sob dinâmica pseudo-integrável. Para o limite superior em que $T_d = 1$, o sistema configura um retângulo e a dinâmica associada é descrita por uma distribuição de Poisson [35].

Capítulo 5

Explorando as distintas funções de Green para o Método do Contorno de Paredes: Guias de onda e bilhar permeável

Até o momento, os diferentes resultados e aplicações apresentadas neste trabalho ilustram a versatilidade do MCP. Mas, de forma semelhante a muitos protocolos de problemas de fronteira [119, 120], alguns problemas para o MCP também podem surgir. Aqui mencionamos provavelmente os dois mais importantes. Em primeiro lugar, a grande maioria dos estudos usando o MCP são numéricos. De fato, uma das principais vantagens da abordagem é a sua implementação numérica direta [1, 63, 68, 75]. No entanto, o processamento computacional necessário pode ser exigente se Δ 's associados a contornos \mathcal{C} 's forem muito grandes em comparação com os comprimentos de onda procurados ($2\pi/k$), por exemplo, se for necessário simular guias de ondas para altas energias (para informações adicionais consulte [65]). Em segundo lugar, existem apenas alguns resultados analíticos derivados com o método. Podemos citar linhas retas [63] e círculos [63, 65], com esta última forma sendo recentemente “revisitada” em termos de técnicas de solução de equações integrais particulares aplicadas ao MCP [121]. Além disso, um bilhar elíptico $2D$ [122] (para números consulte [72]) e uma barreira esferoidal $3D$ [123] foram analisados através de transformações engenhosas e escolhas apropriadas de sistemas de coordenadas para as expressões associadas ao MCP. Em todos esses casos, o potencial V é considerado como todo o espaço $2D$ ou $3D$, assim, com as si-

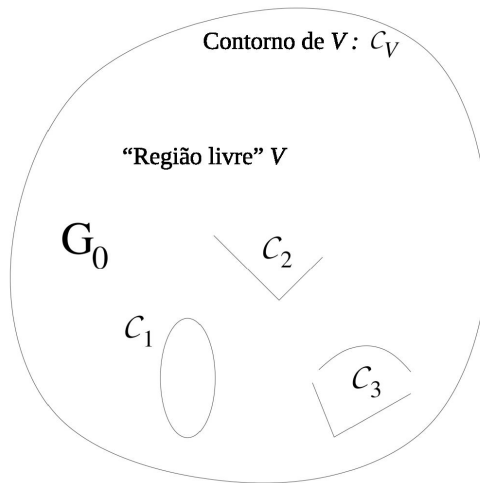


Figura 5.1: O Método do Contorno de Paredes assume que para a “região livre” $V \in \mathbb{R}^N$. A função de Green é dada por G_0 , onde apropriadas condições de contorno são impostas para as bordas \mathcal{C}_V de V . Se \mathcal{C}_V for infinito, então $V = \mathbb{R}^N$ e G_0 é a função de Green para todo o espaço livre, situação usualmente considerada no MCP. Ao descrever estruturas arbitrárias fechadas (por exemplo, \mathcal{C}_1), abertas conectadas (por exemplo, \mathcal{C}_2), e abertas desconectadas (por exemplo, \mathcal{C}_3) estruturas de paredes finas — que podem satisfazer condições de contorno distintas — como potenciais de parede δ , o MCP é capaz de obter espalhamento externo e/ou estados internos em termos de uma abordagem de espalhamento baseada em uma equação do tipo Lippmann-Schwinger.

metrias polares ou esféricas de G_0 complementando em grande parte as do \mathcal{C} 's investigados. Infelizmente, esse tipo de correspondência de simetria, mitigando grandemente os cálculos explícitos mencionados, não pode ser explorado, por exemplo, para estruturas retangulares, cúbicas, etc, usando estes mesmos G_0 's.

Um ingrediente chave do MCP é que ele não exige que o domínio V (no qual \mathcal{C} está inserido) seja livre em todo \mathcal{R}^N . Na verdade, há uma grande liberdade (uma vez que algumas condições são observadas, Seção 5.1.1) para selecionar V . Portanto, dependendo do \mathcal{C} particular, pode-se tentar escolher V tal que: (i) G_0 correspondente seja fácil de obter; (ii) a forma exata de G_0 simplifica analítica ou numericamente a implementação do MCP. Dada essa perspectiva, nosso objetivo no presente capítulo é mostrar como V 's adequados levam às funções de Green, o que facilita consideravelmente o estudo de \mathcal{C} 's distintos usando o MCP. Nossas considerações gerais aqui são válidas para N arbitrário. Mas para os exemplos que apresentaremos ao longo deste trabalho, focamos apenas no caso $2D$ ($N = 2$).

O capítulo está organizado da seguinte forma. Na seção 5.1, apresentamos uma breve revisão com conceitos gerais sobre o MCP, também explicando como ele pode ser implementado assumindo V 's distintos, e por consequência G_0 's. Discutimos uma forma geral para calcular a função de Green exata para guias de ondas semi-infinitas na seção 5.2. Como exemplo, consideramos a guia de onda semi-infinita retangular em $2D$. Na seção 5.3, consideramos o domínio de V calculado na seção 5.2 para analisar diferentes aplicações. Derivamos resultados analíticos para o bilhar retangular em uma guia de onda com uma estrutura ressonante nos seus limites. Autovalores e autoestados numéricos também são obtidos para formas triangulares e trapezoidais de bilhares.

5.1 Uma breve revisão do MCP: A escolha da função de Green

A construção do MCP foi anteriormente detalhada no capítulo 2. Então, a seguir, apenas retomamos algumas ideias principais e os resultados mais relevantes sem entrar em grandes detalhes. Assumimos a equação de Helmholtz em $V \in \mathcal{R}^N$, com apropriadas condições de contorno \mathcal{C}_V , ver Fig. 5.1. Para \mathcal{C}_V tendendo ao infinito, temos todo o espaço livre real e as condições de contorno podem ser as condições de saída (+) ou de entrada (-). Na região em que o potencial é nulo, a função de onda $\psi_k(\vec{r})$ provém de $(\nabla^2 + k^2)\phi_k(\vec{r}) = 0$ enquanto a função de Green “livre” (0) resulta de $(\nabla^2 + k^2)G_0(\vec{r}, \vec{r}_0; k) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0)$. As condições de contorno desejadas em \mathcal{C}_V são impostas a ambas as funções.

Agora, sendo U um potencial de suporte compacto dentro da região V , a solução da onda de espalhamento $\psi_k(\vec{r})$ para o problema é dada pela equação de Lippmann-Schwinger $\psi_k(\vec{r}) = \phi_k(\vec{r}) + \int_V d\vec{r}_0 G_0(\vec{r}, \vec{r}_0; k) U(\vec{r}_0) \psi_k(\vec{r}_0)$. A etapa essencial do MCP [63] é então escrever $U(\vec{r})$ como um potencial δ -parede $U(\vec{r}) = \int_{\mathcal{C}} ds \gamma(s) \delta(\vec{r} - \vec{r}(s))$, onde s são os pontos parametrizados ao longo da curva \mathcal{C} , com $\vec{r}(s)$ sendo suas posições vetoriais. Aqui, $\gamma(s)$ fornece a permeabilidade das paredes de \mathcal{C} em cada ponto s . Na verdade, se assumirmos uma onda plana de número de onda k com incidência perpendicular ao ponto s em \mathcal{C} , então a onda tem probabilidade $P_t = 4k^2 / (4k^2 + \gamma(s)^2)$ de ser transmitida e $P_r = \gamma(s)^2 / (4k^2 + \gamma(s)^2)$ de ser refletida em s . No limite $\gamma \rightarrow \infty$ (de tal forma que $P_t = 0$) pode-se mostrar que ψ_k se anula em \mathcal{C} [63], correspondendo a usual condição de contorno de Dirichlet. Outras condições de

contorno, como Neumann e Robin, também são possíveis definindo outras expressões do tipo δ [124] para U . Neste trabalho nos concentramos apenas na permeabilidade uniforme (portanto com γ constante ao longo de \mathcal{C}) com condições de contorno de Dirichlet.

Ao inserir o potencial U dado acima na equação de Lippmann-Schwinger obtém-se

$$\psi_k(\vec{r}) = \phi_k(\vec{r}) + \gamma \int_{\mathcal{C}} ds G_0(\vec{r}, \vec{r}(s); k) \psi_k(\vec{r}(s)). \quad (5.1)$$

Em uma relação próxima com a matriz T padrão da teoria de espalhamento [125], no presente contexto pode-se definir $\psi_k(\vec{r}(s_b)) = \int_{\mathcal{C}} ds_a T_\gamma(s_b, s_a; k) \phi_k(\vec{r}(s_a))$, tal que

$$\psi_k(\vec{r}) = \phi_k(\vec{r}) + \gamma \int_{\mathcal{C}} \int_{\mathcal{C}} ds_b ds_a G_0(\vec{r}, \vec{r}(s_b); k) T_\gamma(s_b, s_a; k) \phi_k(\vec{r}(s_a)). \quad (5.2)$$

Uma representação em série para T_γ resulta [75]

$$T_\gamma(s_b, s_a; k) = \delta(s_b - s_a) + \sum_{j=1}^{\infty} T_\gamma^{(j)}(s_b, s_a; k), \quad (5.3)$$

onde

$$\begin{aligned} T_\gamma^{(j)}(s_b, s_a; k) &= \gamma^j \int ds_1 ds_2 \dots ds_{j-1} G_0(\vec{r}(s_b), \vec{r}(s_{j-1}); k) \\ &\quad \times G_0(\vec{r}(s_{j-1}), \vec{r}(s_{j-2}); k) \dots G_0(\vec{r}(s_1), \vec{r}(s_a); k). \end{aligned} \quad (5.4)$$

Para o caso particular de $\gamma \rightarrow \infty$ podemos proceder da seguinte forma. Definindo $T(s_b, s_a; k) = -\lim_{\gamma \rightarrow \infty} \gamma T_\gamma(s_b, s_a; k)$, obtém-se [65]

$$\begin{aligned} \delta(s_b - s_a) &= \int_{\mathcal{C}} ds T(s_b, s; k) G_0(\vec{r}(s), \vec{r}(s_a); k) \\ &= \int_{\mathcal{C}} ds G_0(\vec{r}(s_b), \vec{r}(s); k) T(s, s_a; k), \end{aligned} \quad (5.5)$$

e para todo $\vec{r} \in V$

$$\psi_k(\vec{r}) = \phi_k(\vec{r}) - \int_{\mathcal{C}} \int_{\mathcal{C}} ds_b ds_a G_0(\vec{r}, \vec{r}(s_b); k) T(s_b, s_a; k) \phi_k(\vec{r}(s_a)). \quad (5.6)$$

Considerando \vec{r} em $\psi_k(\vec{r})$ a posição do vetor $\vec{r}(s)$ de um s arbitrário sobre o contorno \mathcal{C} e substituindo (5.5) em (5.6), vemos que a função $\psi_k(\vec{r}(s))$ se anula, o que satisfaz as condições de contorno de Dirichlet como previamente antecipado.

Uma propriedade notável do MCP para um \mathcal{C} fechado é o chamado mecanismo de filtro [65]. Assumindo $\{k_n, \Psi_n\}$ o conjunto de soluções no interior de \mathcal{C} , resulta que para qualquer \vec{r} na região interna: (i) Se $k \neq k_n$, então $\psi_k(\vec{r}) = 0$ (embora na região externa ψ_k é a solução correta de espalhamento, com ϕ_k correspondendo à onda incidente); (ii) Se $k = k_n$ para algum n e para ϕ_k exibindo condições adequadas de simetria [65], temos $\psi(\vec{r}) = \Psi_n(\vec{r})$.

Como já apontado no capítulo 2, a formulação numérica do MCP é relativamente simples e bem discutida na literatura (por exemplo, uma descrição detalhada com as fórmulas explícitas necessárias é fornecida em [75]). Em suma, discretiza-se \mathcal{C} para que a função T configure uma matriz quadrada, calculada a partir de uma versão matricial da equação (5.5). Então, as equações (5.2) ou (5.6) podem ser resolvidas por meio de quadraturas diretas. O fundamental para nossos propósitos é que tal esboço seja independente da forma funcional real de G_0 , a menos, é claro, pelas particularidades de seu cálculo numérico. Portanto, para G_0 's distintos, os mesmos algoritmos numéricos existentes para o MCP podem ser usados sem modificações apreciáveis.

5.1.1 A escolha do domínio espacial V

Uma vez que se deve abordar o comportamento ondulatório específico associado as formas \mathcal{C} 's com condições de contorno adequadas, há grande flexibilidade na escolha de V , desde que seja consistente com o fenômeno investigado. Isso motiva a busca por geometrias de domínio que facilitem a análise. Apenas como ilustração, suponha que o objetivo seja discutir um processo como as ressonâncias de espalhamento de dois discos impermeáveis no plano [126, 127] (modelados como círculos com condições de contorno de Dirichlet). Usando o MCP, uma possível estratégia poderia ser considerar a função de Green para o espaço livre $2D$ — $G_0^{(+)}(\vec{r}, \vec{r}_0; k) = -\frac{i}{4} H_0^{(+)}(k|\vec{r} - \vec{r}_0|)$ — e então considerar \mathcal{C} como dois círculos. No entanto, além do tratamento numérico de G_0 , o trabalho numérico necessário (para obter T e realizar as integrais para ψ_k) nesta primeira abordagem seria reduzido se, em vez disso,

assumirmos como G_0 a função de Green para a região externa de um círculo em $2D^1$ e, portanto, \mathcal{C} como apenas o segundo círculo.

Um ponto chave mencionado acima diz respeito à compatibilidade entre as soluções procuradas ψ_k com o domínio V . Tal condição do MCP é de fácil compreensão se supormos que \mathcal{C} seja uma curva fechada, como \mathcal{C}_1 da Fig. 5.1, para a qual estamos tentando calcular os autoestados e autovalores. Se V também estiver fechado (ver Fig. 5.1), os possíveis k 's dos estados “sementes” ϕ_k são aqueles pertencentes ao espectro da equação de Helmholtz em V , $\{k_n\}_V$. Portanto, usando o MCP não podemos obter as soluções para o bilhar \mathcal{C} dentro de um V que também é fechado se $\{k_n\}_\mathcal{C}$ e $\{k_n\}_V$ forem distintos. Para evitar o problema deve-se definir V como uma região aberta, além de exibir simetrias em conformidade com as de \mathcal{C} .

No entanto, a seleção adequada de V 's deve ampliar a aplicabilidade do MCP, por exemplo, permitindo discutir \mathcal{C} 's muito mais longos, em casos particulares simplificando as soluções numéricas para formas fechadas (bilhar) e finalmente abrindo a possibilidade de resultados analíticos, atualmente limitados para poucas situações, uma vez que a prática usual na literatura é considerar $V = \mathbb{R}^N$. Assim, entre os potenciais candidatos para V , além do espaço livre, mencionamos as guias de ondas semi-infinitas ou infinitas. De um modo geral, são estruturas finitas em todas as direções, exceto uma (extendendo-se por \mathbb{R}_+ ou \mathbb{R}). Na próxima seção, derivamos um método geral para obter a função de Green exata para guias de ondas semi-infinitas, resolvendo um exemplo particular, a forma retangular. A seção 5.3 é então dedicada a explorar esse domínio.

¹A função de Green exata para a região externa de um círculo de raio R centrado na origem e satisfazendo as condições de Dirichlet é $G_0^{(+)}(\vec{r}, \vec{r}_0; k) = -\frac{i}{4} H_0^{(+)}(k|\vec{r} - \vec{r}_0|) + \frac{i}{4} \frac{J_0(kR)}{H_0^{(+)}(kR)} H_0^{(+)}(kr) H_0^{(+)}(kr_0) + \frac{i}{2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_n(kR)}{H_n^{(+)}(kR)} H_n^{(+)}(kr) H_n^{(+)}(kr_0) \cos[n(\theta - \theta_0)]$, onde J_n e $H_n^{(+)}$ são as funções de Bessel e Hankel de primeiro ordem n . A série infinita pode ser calculada numericamente com a ajuda de expansões assintóticas no parâmetro de ordem n (ver, por exemplo, [75]).

5.2 A função de Green para guias de ondas

semi-infinitas

Aqui, abordamos a função de Green $G^{(\pm)}$ de saída (+) e de entrada (-) para o operador de Helmholtz $\hat{\mathcal{L}}_k^V \equiv \nabla_{\vec{r}}^2 + k^2$ definido em $V \in \mathbb{R}^N$. Nos concentramos apenas nas condições de contorno de Dirichlet nas fronteiras \mathcal{C}_V de V . O procedimento a seguir visa guias de ondas semi-infinitas para as quais $V = (0, \infty) \times \Omega$, com Ω sendo uma região limitada (finita) de \mathbb{R}^{N-1} . Devido à estrutura particular de V , assumimos que existe um sistema de coordenadas que permite escrever $(0 < \xi < \infty, \vec{\eta} = (\eta_1, \eta_2, \dots, \eta_{N-1}), a_n < \eta_n < b_n$ para $a_n < b_n$ finitos $\forall n$, e $\vec{r} = (\xi, \vec{\eta})$)

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{L}}_k^V G(\xi, \vec{\eta}; \xi_0, \vec{\eta}_0; k) &= \left(\hat{\mathcal{O}}_\xi + f(\xi) \nabla_{\vec{\eta}}^2 + k^2 \right) G(\xi, \vec{\eta}; \xi_0, \vec{\eta}_0; k) = \delta(\vec{r} - \vec{r}_0) \\ &= s(\xi) \delta(\xi - \xi_0) \delta(\vec{\eta} - \vec{\eta}_0), \end{aligned} \quad (5.7)$$

onde $\hat{\mathcal{O}}_\xi = f_2(\xi) \partial^2 / \partial \xi^2 + f_1(\xi) \partial / \partial \xi + f_0(\xi)$. É importante ressaltar que $\hat{\mathcal{O}}_\xi$ deve estar relacionado as soluções do tipo onda, uma vez que é o “componente” da equação de Helmholtz ao longo da direção semi-infinita ξ .

Temos $G(\xi, \vec{\eta} \in \mathcal{C}_\Omega; \xi_0, \vec{\eta}_0; k) = 0$ e dependendo de cada \mathcal{C}_V particular, uma condição específica para $G(0, \vec{\eta}; \xi_0, \vec{\eta}_0; k)$ também deve ser observada (ver exemplo a seguir). Além disso, dado que $\hat{\mathcal{L}}_k$ é um operador diferencial de segunda ordem, G é contínua em $\vec{r} = \vec{r}_0$, entretanto, ao cruzar \vec{r}_0 , a função de Green apresenta saltos na primeira derivada e divergências do tipo delta de Dirac na segunda derivada (ver, por exemplo, [128]). Estamos buscando soluções \pm (com + correspondendo à condição de Sommerfeld), portanto, $G^{(\pm)}(\xi \rightarrow \infty) \sim (1/\sqrt{\xi^{(N-1)d}}) \exp[\pm i k \xi]$ com d relacionado ao grau de separabilidade de ξ e $\vec{\eta}$ (por exemplo, se $f(\xi) = 1$ então $d = 0$).

Para a região limitada Ω , o operador de Helmholtz $\hat{\mathcal{L}}_k^\Omega = \nabla_{\vec{\eta}}^2 + \tilde{k}^2$ representa um problema de autovalor, tal que [129] (com $n = 1, 2, \dots$, identificando os diferentes automodos)

$$\begin{aligned} \left(\nabla_{\vec{\eta}}^2 + k_n^2 \right) w_n(\vec{\eta}) &= 0, \quad w_n(\vec{\eta} \in \mathcal{C}_\Omega) = 0, \quad \int_{\Omega} d\vec{\eta} w_{n_2}(\vec{\eta}) w_{n_1}^*(\vec{\eta}) = \delta_{n_2 n_1}, \\ \sum_n w_n(\vec{\eta}_2) w_n^*(\vec{\eta}_1) &= \delta(\vec{\eta}_2 - \vec{\eta}_1), \end{aligned} \quad (5.8)$$

com a última identidade acima representando a relação de completude dos w_n 's em Ω [129].

Devido a forma de $\hat{\mathcal{L}}_k^V$ nas equações (5.7) e (5.8), é natural tentar o ansatz

$$G(\xi, \vec{\eta}; \xi_0, \vec{\eta}_0; k) = \sum_n w_n(\vec{\eta}) w_n^*(\vec{\eta}_0) F_n(\xi; \xi_0; k), \quad (5.9)$$

exigindo este para qualquer n

$$\left(\hat{\mathcal{O}}_\xi - f(\xi) k_n^2 + k^2 \right) F_n(\xi; \xi_0; k) = s(\xi) \delta(\xi - \xi_0). \quad (5.10)$$

Quando $\xi \neq \xi_0$ (então $\delta(\xi - \xi_0) = 0$), a equação diferencial homogênea de segunda ordem resultante — $(\hat{\mathcal{O}}_\xi - f(\xi) k_n^2 + k^2) \mathcal{F}_n(\xi; k) = 0$ — admite duas soluções fundamentais [129], $\mathcal{F}_n = u_n(\xi; k)$ e $\mathcal{F}_n = v_n(\xi; k)$. É concebível que as corretas combinações lineares dessas funções — ou seja, $h_n^{(\pm)}(\xi; k) = \alpha_n u_n(\xi; k) \pm i\beta_n v_n(\xi; k)$ — também representem assintoticamente as ondas de saída e de entrada adequadas.

Dessa forma, supondo que $u_n(\xi; k)$ resulta na condição desejada para $G^{(\pm)}$ em $\xi = 0$, podemos tomar $F_n^{(\pm)} \propto u_n(\xi; k)$ para $\xi < \xi_0$ e $F_n^{(\pm)} \propto h_n^{(\pm)}(\xi; k)$ para $\xi > \xi_0$. Então, é simples notar que um F em $\xi = \xi_0$, mas apresentando um “salto” em sua primeira derivada, temos (para $C_n^{(\pm)}$ uma constante e $\xi_>$ ($\xi_<$) o maior (menor) entre ξ e ξ_0)

$$F_n^{(\pm)}(\xi; \xi_0; k) = C_n^{(\pm)} u_n(\xi_<; k) h_n^{(\pm)}(\xi_>; k). \quad (5.11)$$

A última etapa é determinar $C_n^{(\pm)}$ para estar em conformidade com a equação (5.10). Com este objetivo, dividimos a equação (5.10) por $f_2(\xi)$, integramos a expressão resultante em ξ de $\xi_0 - \epsilon$ a $\xi_0 + \epsilon$ e tomamos o limite $\epsilon \rightarrow 0$. Usando o fato de que F é contínuo e empregando a integração por partes para o termo $\hat{\mathcal{O}}_\xi$ envolvendo $\partial/\partial\xi$, temos (com $g'(\xi) \equiv df(\xi)/d\xi$ e $W[g_2(\xi), g_1(\xi)] \equiv g_2'(\xi) g_1(\xi) - g_2(\xi) g_1'(\xi)$ o Wronskian de g_2 e g_1)

$$C_n^{(\pm)} = \frac{s(\xi_0)}{f_2(\xi_0)} \frac{1}{W[h_n^{(\pm)}(\xi_0; \xi_0; k), u_n(\xi_0; \xi_0; k)]}. \quad (5.12)$$

Finalmente, observamos que das discussões acima, as condições de contorno para G também são obedecidas na variável \vec{r}_0 , como deveria ser o caso devido a simetria $\vec{r} \leftrightarrow \vec{r}_0$ na

equação que define a função de Green [128].

5.2.1 A guia de onda retangular semi-infinita

Para ilustrar a descrição anterior, consideramos a geometria representada na Fig. 5.2a. Esta corresponde a uma região retangular semi-infinita de guias de ondas $0 < y < L_y$, $x > 0$, para a qual impomos condições de contorno de Dirichlet em $y = 0$, $y = L_y$ e $x = 0$. Então podemos usar coordenadas cartesianas, com $\nabla_{\vec{r}}^2 = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2$ e $\delta(\vec{r} - \vec{r}_0) = \delta(x - x_0) \delta(y - y_0)$. Também, $G(0, y; x_0; y_0; k) = G(x, 0; x_0; y_0; k) = G(x, L_y; x_0; y_0; k) = 0$. Para a direção limite y ($n = 1, 2, \dots$)

$$\varphi_n^{(L_y)}(y) = \sqrt{\frac{2}{L_y}} \text{sen}\left[\frac{n\pi y}{L_y}\right], \quad \frac{d^2}{dy^2} \varphi_n^{(L_y)}(y) + \frac{n^2\pi^2}{L_y^2} \varphi_n^{(L_y)}(y) = 0, \quad (5.13)$$

onde $\varphi_n^{(L_y)}(0) = \varphi_n^{(L_y)}(L_y) = 0$. Neste caso, as soluções para a versão homogênea da equação (5.10) são $\text{sen}[k_n x]$, $\cos[k_n x]$, e $\exp[\pm i k_n x]$, com $k_n^2 = k^2 - n^2\pi^2/L_y^2$. Assim, para observar a condição de contorno em $x = 0$ definimos $u_n(x) = \text{sen}[k_n x]$ (obviamente $h_n^{(\pm)}(x) = \exp[\pm i k_n x]$). Por último, $W[\exp[\pm i k_n x_0], \text{sen}[k_n x_0]] = -k_n$ e a exata função de Green resulta

$$G_{\text{ret}}^{(\pm)}(x, y; x_0, y_0; k) = \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n^{(L_y)}(y) \varphi_n^{(L_y)}(y_0) \frac{(-1)}{k_n} \text{sen}[k_n x_{<}] \exp[\pm i k_n x_{>}], \quad (5.14)$$

onde $k_n = \sqrt{k^2 - n^2\pi^2/L_y^2}$, $\varphi_n^{(L_y)}(z) = \sqrt{2/L_y} \text{sen}[n\pi z/L_y]$ e $x_{>}$ ($x_{<}$) é o maior (menor) entre x e x_0 . O sobrescrito + (−) representa o caso de saída (entrada). Como um exercício adicional muito instrutivo, no apêndice B mostramos como obter a função de Green usual para uma caixa 2D a partir das soluções $G^{(\pm)}$.

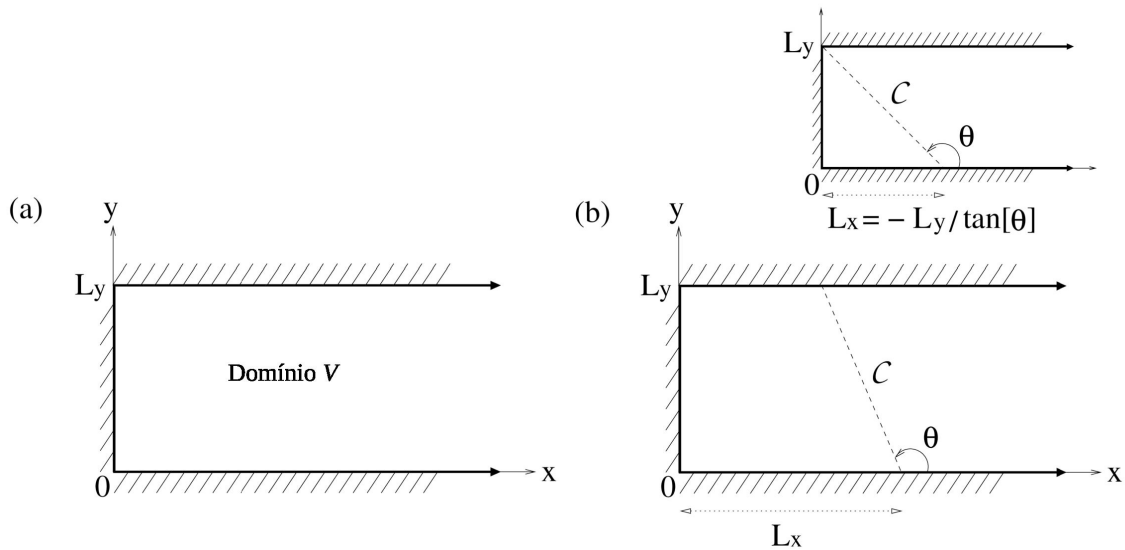


Figura 5.2: (a) O guia de onda retangular semi-infinito em 2D constituindo o domínio V . (b) A linha reta \mathcal{C} , quando considerada junto com as partes das paredes de V , pode formar bilhares distintos, como um trapézio, um retângulo (se $\theta = \pi/2$), e um triângulo retângulo se L_x estiver corretamente definido (em detalhes no canto superior direito).

5.3 Aplicações para o domínio V como guia de ondas semi-infinito retangular

Suponhamos um segmento da reta \mathcal{C} dentro da região V , Fig. 5.2b), cuja equação paramétrica é (para $0 \leq t \leq 1$)

$$x(t) = L_x + \frac{L_y}{\tan[\theta]} t, \quad y(t) = L_y t. \quad (5.15)$$

Observe que para \mathcal{C} único, quando considerado junto com as partes da borda V , pode formar algum bilhar poligonal simples. Na verdade, para um arbitrário L_x , \mathcal{C} resulta — com as paredes da guia de onda — a uma forma trapezoidal, ao passo que ao definir $L_x = -L_y / \tan[\theta]$, temos um triângulo retângulo (como ilustrado na Fig. 5.2b). Finalmente, uma estrutura retangular surge quando $\theta = \pi/2$ de modo que $\tan[\theta] \rightarrow \infty$ e então $x(t) = L_x$ e $y(t) = L_y t$.

Na seção 5.3.2 calculamos numericamente $\psi_k(\vec{r})$ para os sistemas da Fig. 5.2b), assumindo diferentes permeabilidades γ e parâmetros geométricos L_x e θ para \mathcal{C} . Mas antes disso, apresentamos a seguir alguns exemplos analiticamente solucionáveis.

5.3.1 O bilhar retangular ($\theta = \pi/2$)

As matrizes T e T_γ

Vamos considerar $\theta = \pi/2$ e assumir as condições de contorno de Dirichlet em \mathcal{C} . Então, a expressão para a matriz T , segundo a relação da equação (5.5), com G_0 dado por $G_{\text{ret}}^{(\pm)}$ na equação (5.14), resulta (para $0 \leq t_b, t_a \leq 1$)

$$\begin{aligned} \delta(t_b - t_a) &= \int_0^1 dt \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n(L_y t_b) \varphi_n(L_y t) \frac{(-1)^n}{k_n} \text{sen}[k_n L_x] \exp[\pm i k_n L_x] \\ &\times T^{(\pm)}(t, t_a; k). \end{aligned} \quad (5.16)$$

Anteriormente eliminamos o sobrescrito (L_y) em φ para simplificar a notação. Relembrando

$$\begin{aligned} \int_0^1 dt \varphi_n(L_y t) \varphi_m(L_y t) &= \frac{1}{L_y} \delta_{nm}, \\ \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n(L_y t_b) \varphi_n(L_y t_a) &= \frac{1}{L_y} \delta(t_b - t_a), \end{aligned} \quad (5.17)$$

em seguida, por uma inspeção direta da equação (5.16), encontramos

$$T^{(\pm)}(t_b, t_a; k) = -L_y^2 \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n(L_y t_b) \varphi_n(L_y t_a) \frac{k_n \exp[\mp i k_n L_x]}{\text{sen}[k_n L_x]}. \quad (5.18)$$

Para o caso mais geral de um \mathcal{C} permeável, de constante de permeabilidade γ , também podemos obter $T_\gamma^{(\pm)}$ em uma exata forma fechada. De fato, no presente caso em que $\theta = \pi/2$ temos para a equação (5.4)

$$\begin{aligned} T_\gamma^{(\pm, j)}(t_b, t_a; k) &= \gamma^j \int dt_1 dt_2 \dots dt_{j-1} \sum_{n_j n_{j-1} \dots n_2 n_1} \frac{(-1)^j}{k_{n_j} k_{n_{j-1}} \dots k_{n_1}} \\ &\times \varphi_{n_j}(L_y t_b) \varphi_{n_j}(L_y t_{j-1}) \varphi_{n_{j-1}}(L_y t_{j-1}) \varphi_{n_{j-1}}(L_y t_{j-2}) \\ &\times \varphi_{n_{j-2}}(L_y t_{j-2}) \varphi_{n_{j-2}}(L_y t_{j-3}) \dots \varphi_{n_3}(L_y t_3) \varphi_{n_3}(L_y t_2) \\ &\times \varphi_{n_2}(L_y t_2) \varphi_{n_2}(L_y t_1) \varphi_{n_1}(L_y t_1) \varphi_{n_1}(L_y t_a) \\ &\times \prod_{l=1}^{l=j} \text{sen}[k_{n_l} L_x] \exp[\pm i k_{n_l} L_x]. \end{aligned} \quad (5.19)$$

A seguir, considerando a primeira relação na equação (5.17) para as integrais sucessivas na equação (5.19), temos

$$T_\gamma^{(\pm, j)}(t_b, t_a; k) = \sum_{n=1}^{\infty} L_y \left(-\gamma \frac{\text{sen}[k_n L_x] \exp[\pm i k_n L_x]}{L_y k_n} \right)^j \times \varphi_n(L_y t_b) \varphi_n(L_y t_a). \quad (5.20)$$

Por último, reescrevemos a função δ na equação (5.3) em termos da segunda relação na equação (5.17), encontramos para $T_\gamma^{(\pm)}$

$$\begin{aligned} T_\gamma^{(\pm)}(t_b, t_a; k) &= L_y \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{j=0}^{\infty} \left(-\gamma \frac{\text{sen}[k_n L_x] \exp[\pm i k_n L_x]}{L_y k_n} \right)^j \\ &\quad \times \varphi_n(L_y t_b) \varphi_n(L_y t_a) \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{L_y^2 k_n \varphi_n(L_y t_b) \varphi_n(L_y t_a)}{L_y k_n + \gamma \text{sen}[k_n L_x] \exp[\pm i k_n L_x]}. \end{aligned} \quad (5.21)$$

Observe que, conforme discutido na Seção 5.1, obtemos prontamente T na equação (5.18) a partir de T_γ na equação (5.21) como $T = -\lim_{\gamma \rightarrow \infty} T_\gamma$.

A solução ψ_k para as condições de contorno de Dirichlet

Uma função $\phi_k(\vec{r})$ que resolve a guia de onda semi-infinita (ou seja, na ausência de \mathcal{C}) é dado por

$$\phi_k(\vec{r}) = C_l \text{sen}[l\pi y/L_y] \text{sen}[k_l x], \quad (5.22)$$

onde l é um inteiro positivo, $k^2 = k_l^2 + l^2\pi^2/L_y^2$ e C_l é uma constante de normalização.

Para calcular ψ_k satisfazendo as condições de contorno de Dirichlet em \mathcal{C} consideramos a equação (5.6) com T tomando a forma a partir da equação (5.18). Temos dois casos, as

regiões interna ($x < L_x$) e a externa ($x > L_x$). Para o primeiro ($\vec{r} = (x < L_x, y)$)

$$\begin{aligned}
\psi_k(\vec{r}) &= C_l \operatorname{sen}\left[\frac{l\pi y}{L_y}\right] \operatorname{sen}[k_l x] \\
&\quad - \left\{ C_l \sum_{n,m=1}^{\infty} \operatorname{sen}\left[\frac{n\pi y}{L_y}\right] \operatorname{sen}[k_n x] \frac{k_m \exp[\pm i(k_n - k_m)L_x]}{k_n \operatorname{sen}[k_m L_x]} L_y^2 \right. \\
&\quad \left. \times \int_0^1 \int_0^1 dt_b dt_a \varphi_n(L_y t_b) \varphi_m(L_y t_b) \varphi_m(L_y t_a) \varphi_l(L_y t_a) \right\} \operatorname{sen}[k_l L_x] \\
&= C_l \operatorname{sen}\left[\frac{l\pi y}{L_y}\right] \operatorname{sen}[k_l x] - \left\{ C_l \sum_{n,m=1}^{\infty} \operatorname{sen}\left[\frac{n\pi y}{L_y}\right] \operatorname{sen}[k_n x] \right. \\
&\quad \left. \times \frac{k_m \exp[\pm i(k_n - k_m)L_x]}{k_n \operatorname{sen}[k_m L_x]} \delta_{nm} \delta_{ml} \right\} \operatorname{sen}[k_l L_x]. \tag{5.23}
\end{aligned}$$

Aqui, o mecanismo de filtro mencionado na seção 5.1 torna-se explícito. Suponha um número de onda k tal que $k_l L_x = j \pi$ para algum $j = 1, 2, \dots$ (portanto $k^2 = \pi^2 (l^2/L_y^2 + j^2/L_x^2)$). Assim $\operatorname{sen}[k_l L_x] = 0$, o segundo termo da última relação na equação (5.23) desaparece e

$$\psi_k(\vec{r}) = C_l \operatorname{sen}[l\pi y/L_y] \operatorname{sen}[j\pi x/L_x] = \phi_k(\vec{r}), \tag{5.24}$$

que é o autoestado exato para uma caixa retangular 2D. Por outro lado, se $k_l \neq j \pi/L_x$ (j inteiro) a equação (5.23) resulta

$$\psi_k(\vec{r}) = C_l \operatorname{sen}\left[\frac{l\pi y}{L_y}\right] \operatorname{sen}[k_l x] - C_l \operatorname{sen}\left[\frac{l\pi y}{L_y}\right] \operatorname{sen}[k_l x] = 0. \tag{5.25}$$

A solução é nula, uma vez que k não corresponde a um autovalor do problema interno.

Para a região externa

$$\begin{aligned}
\psi_k(\vec{r}) &= C_l \operatorname{sen}\left[\frac{l\pi y}{L_y}\right] \operatorname{sen}[k_l x] \\
&\quad - \left\{ C_l \sum_{n,m=1}^{\infty} \operatorname{sen}\left[\frac{n\pi y}{L_y}\right] \exp[\pm i k_n x] \frac{k_m \operatorname{sen}[k_n L_x]}{k_n \operatorname{sen}[k_m L_x]} \exp[\mp i k_m L_x] L_y^2 \right. \\
&\quad \left. \times \int_0^1 \int_0^1 dt_b dt_a \varphi_n(L_y t_b) \varphi_m(L_y t_b) \varphi_m(L_y t_a) \varphi_l(L_y t_a) \right\} \operatorname{sen}[k_l L_x] \\
&= C_l \operatorname{sen}\left[\frac{l\pi y}{L_y}\right] \operatorname{sen}[k_l x] - \left\{ C_l \sum_{n,m=1}^{\infty} \operatorname{sen}\left[\frac{n\pi y}{L_y}\right] \exp[\pm i k_n x] \right. \\
&\quad \left. \times \frac{k_m \operatorname{sen}[k_n L_x]}{k_n \operatorname{sen}[k_m L_x]} \exp[\mp i k_m L_x] \delta_{nm} \delta_{ml} \right\} \operatorname{sen}[k_l L_x]. \tag{5.26}
\end{aligned}$$

Se escolhermos k_l tal que $\operatorname{sen}[k_l L_x] = 0$, a anterior solução para a região externa $\psi_k(\vec{r})$ exhibe a mesma forma funcional exata da solução interna $\psi_k(\vec{r})$, a equação (5.24). Este é um bom exemplo do princípio da transparência (TP) para o bilhar [130–132], o qual ocorre sempre que exista uma perfeita correspondência de simetria entre os autoestados internos e as soluções de espalhamento externas. No presente exemplo, o TP é intuitivo de se entender. Na verdade, \mathcal{C} é uma barreira de δ -parede vertical infinitamente repulsiva dentro da guia de onda (localizada em $x = L_x$). No entanto, tem largura zero e, como a onda incidente desaparece exatamente em $x = L_x$, então ϕ_k não “sente” tal potencial de barreira. Portanto, a equação (5.24) se estende por toda parte na guia de onda retangular semi-infinita.

Finalmente, quando $\operatorname{sen}[k_l L_x] \neq 0$, temos da equação (5.26)

$$\begin{aligned}
\psi_k(\vec{r}) &= C_l \operatorname{sen}\left[\frac{l\pi y}{L_y}\right] \left(\operatorname{sen}[k_l x] - \exp[\pm i k_l (x - L_x)] \operatorname{sen}[k_l L_x] \right) \\
&= D_l^{(\pm)} \operatorname{sen}\left[\frac{l\pi y}{L_y}\right] \operatorname{sen}[k_l (x - L_x)]. \tag{5.27}
\end{aligned}$$

Que é a solução esperada para o guia de onda semi-infinito, apenas com a extremidade fechada movida de $x = 0$ para $x = L_x$ ($D_l^{(\pm)}$ é simplesmente uma constante de normalização redefinida).

A solução ψ_k para um \mathcal{C} permeável

Agora, para ψ_k consideremos a equação (5.2) com T_γ da equação (5.21). Para ϕ_k , assumimos a forma da equação (5.22). Para a região interna ($x < L_x$)

$$\begin{aligned}
\psi_k(\vec{r}) &= C_l \operatorname{sen}\left[\frac{l\pi y}{L_y}\right] \operatorname{sen}[k_l x] - \gamma C_l \\
&\times \left\{ \sum_{n,m=1}^{\infty} \operatorname{sen}\left[\frac{n\pi y}{L_y}\right] \operatorname{sen}[k_n x] \frac{(k_m/k_n) \exp[\pm i k_n L_x] L_y^2}{k_m L_y + \gamma \operatorname{sen}[k_m L_x] \exp[\pm i k_m L_x]} \right. \\
&\times \left. \int_0^1 \int_0^1 dt_b dt_a \varphi_n(L_y t_b) \varphi_m(L_y t_b) \varphi_m(L_y t_a) \varphi_l(L_y t_a) \right\} \operatorname{sen}[k_l L_x] \\
&= C_l \operatorname{sen}\left[\frac{l\pi y}{L_y}\right] \operatorname{sen}[k_l x] - \left\{ \gamma C_l \sum_{n,m=1}^{\infty} \operatorname{sen}\left[\frac{n\pi y}{L_y}\right] \operatorname{sen}[k_n x] \right. \\
&\times \left. \frac{(k_m/k_n) \exp[\pm i k_n L_x]}{k_m L_y + \gamma \operatorname{sen}[k_m L_x] \exp[\pm i k_m L_x]} \delta_{nm} \delta_{ml} \right\} \operatorname{sen}[k_l L_x], \tag{5.28}
\end{aligned}$$

enquanto para a região externa ($x > L_x$)

$$\begin{aligned}
\psi_k(\vec{r}) &= C_l \operatorname{sen}\left[\frac{l\pi y}{L_y}\right] \operatorname{sen}[k_l x] - \gamma C_l \\
&\times \left\{ \sum_{n,m=1}^{\infty} \operatorname{sen}\left[\frac{n\pi y}{L_y}\right] \exp[\pm i k_n x] \frac{(k_m/k_n) \operatorname{sen}[k_n L_x] L_y^2}{k_m L_y + \gamma \operatorname{sen}[k_m L_x] \exp[\pm i k_m L_x]} \right. \\
&\times \left. \int_0^1 \int_0^1 dt_b dt_a \varphi_n(L_y t_b) \varphi_m(L_y t_b) \varphi_m(L_y t_a) \varphi_l(L_y t_a) \right\} \operatorname{sen}[k_l L_x] \\
&= C_l \operatorname{sen}\left[\frac{l\pi y}{L_y}\right] \operatorname{sen}[k_l x] - \left\{ \gamma C_l \sum_{n,m=1}^{\infty} \operatorname{sen}\left[\frac{n\pi y}{L_y}\right] \exp[\pm i k_n x] \right. \\
&\times \left. \frac{(k_m/k_n) \operatorname{sen}[k_n L_x]}{k_m L_y + \gamma \operatorname{sen}[k_m L_x] \exp[\pm i k_m L_x]} \delta_{nm} \delta_{ml} \right\} \operatorname{sen}[k_l L_x]. \tag{5.29}
\end{aligned}$$

Se k é tal que $k_l L_x = j \pi$ ($j = 1, 2, \dots$) então $\operatorname{sen}[k_l L_x] = 0$ e tanto da equação (5.28) ou da equação (5.29) encontramos que $\psi_k(\vec{r}) = \phi_k(\vec{r})$ independe do parâmetro de permeabilidade γ . Isso novamente é devido ao TP (ver discussão após a equação (5.26)).

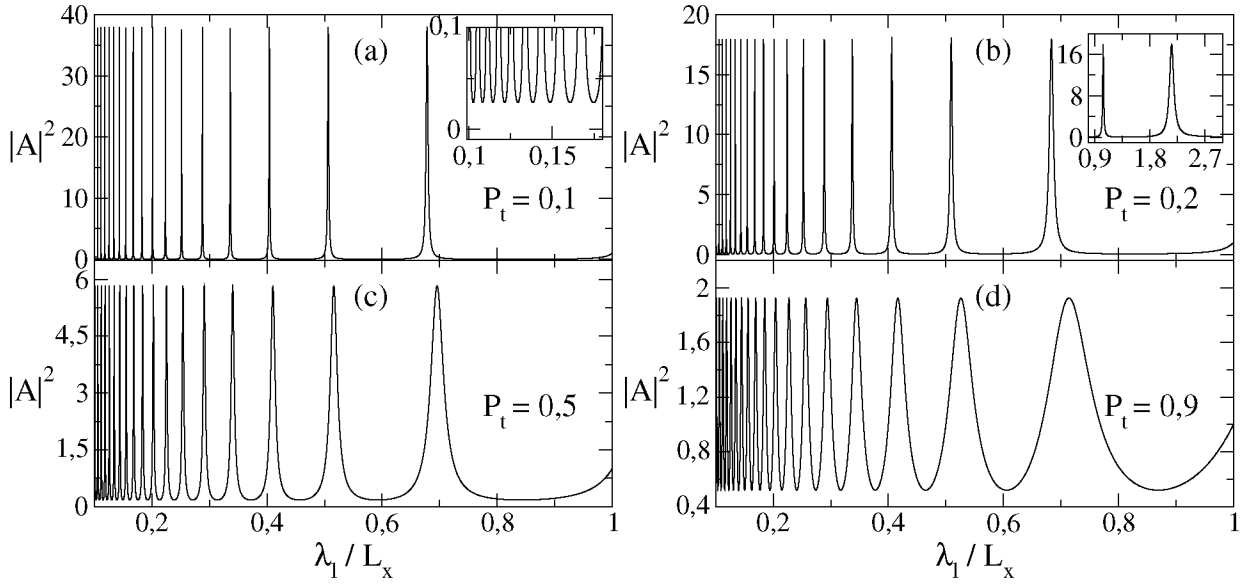


Figura 5.3: O quadrado do módulo de A , equação (5.32), como função de λ_l/L_x (com λ_l o comprimento de onda incidente ao longo de x) para quatro valores distintos da transmissão de probabilidade P_t através de \mathcal{C} . Aqui $l = 1$ e $L_x = 1$. Os picos representam os estados quase-ligados associados à existência de um lado permeável da estrutura retangular, quando a amplitude da onda possui considerável aumento. A inserção em (a) ilustra que para $P_t > 0$, A não desaparece completamente para qualquer valor de λ_l/L_x se $P_t > 0$. A inserção em (b) exemplifica uma tendência, as ressonâncias tendem a desaparecer para λ_l/L_x sendo poucas unidades (em (b) não são mais observados picos para $\lambda_l/L_x > 2,7$).

Para $\text{sen}[k_l L_x] \neq 0$, temos para $x < L_x$

$$\psi_{\mathbf{k}}(\vec{r}) = A(k_l; \gamma) \phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \mathcal{A}(k_l; \gamma) C_l \text{sen}\left[\frac{l\pi y}{L_y}\right] \text{sen}[k_l x] \quad (5.30)$$

e para $x > L_x$

$$\psi_{\mathbf{k}}(\vec{r}) = A(k_l; \gamma) C_l \text{sen}\left[\frac{l\pi y}{L_y}\right] \left\{ \text{sen}[k_l x] + \frac{\gamma \text{sen}[k_l L_x]}{k_l L_x} \text{sen}[k_l (x - L_x)] \right\}, \quad (5.31)$$

onde

$$A(k_l; \gamma) = \frac{k_l L_x}{k_l L_x + \gamma \text{sen}[k_l L_x] \exp[\pm i k_l L_x]}. \quad (5.32)$$

Observe que, como se espera, $\psi_{\mathbf{k}}(\vec{r})$ é contínuo em $x = L_x$.

Uma consequência interessante da configuração geométrica acima é a geração de estados

quase-ligados associados à existência de um lado permeável (localizado numa das extremidades) da estrutura retangular formando a guia de onda semi-infinita. Na verdade, existem diferentes procedimentos [133, 134] para gerar ressonâncias em cavidades e guias de ondas fechadas [65], por exemplo, visando o aumento da intensidade de ondas eletromagnéticas estacionárias [133]. Embora esteja longe de ser uma realização prática, nosso sistema atual representa uma ideia viável para tal objetivo. De fato, para $x < L_x$ (equação (5.30)) a presença de \mathcal{C} leva a um fator de amplitude $A(k_l; \gamma)$ (equação (5.32)) para o autoestado natural da guia de onda ϕ_k . Reescrevendo γ em termos de transmissão de probabilidade P_t e k_l (ver Sec. 5.1), e para o comprimento de onda incidente $\lambda_l = 2\pi/k_l$, plotamos na Fig. 5.3 a quantidade $|A|^2$ como função λ_l/L_x para quatro valores de P_t , assumindo o primeiro modo $l = 1$ na direção y . Para cada P_t claramente existem valores de λ_l/L_x para o quais $|A|^2$ é muito maior que 1, caracterizando um grande ganho de amplitude dentro do guia de ondas. Este fenômeno é consideravelmente mais destacado para uma transmissividade baixa da parede \mathcal{C} , mas então com as larguras das ressonâncias de quase-estados se tornando muito mais estreitas.

5.3.2 Resultados numéricos para \mathcal{C} 's distintos

Nesta seção, vamos aplicar o MCP para alguns casos particulares: o bilhar quadrado, os bilhares triangulares ($45^\circ, 45^\circ, 90^\circ$) e ($30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$) e o bilhar trapezoidal (na união do quadrado com o triângulo ($45^\circ, 45^\circ, 90^\circ$)). As guias são construídas de acordo parâmetros descritos na Fig. 5.4. Os comprimentos $L_x + l_x$ e L_y definem a base e altura da guia, respectivamente,

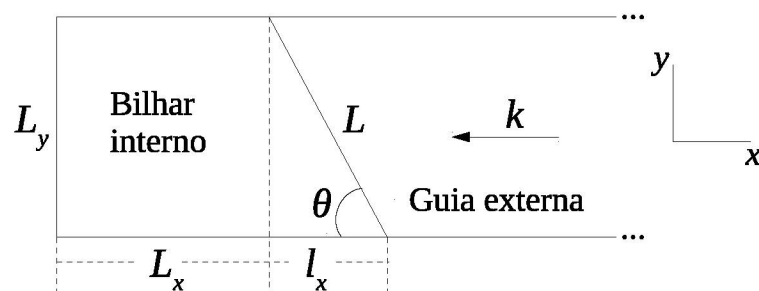


Figura 5.4: Geometria geral da guia de onda. As dimensões $L_x + l_x$ e L_y definem a base e altura da guia, respectivamente. Ajustando a posição l_x e o ângulo de inclinação θ da parede L , são obtidos diferentes bilhares.

enquanto o ângulo θ define a inclinação da parede L (ou \mathcal{C}) com a base $L_x + l_x$. Em todos as simulações, a dimensão N da matriz T na parede L é $T(i, j) = [T_{ij}]_{100 \times 100}$, dessa forma a razão $\mu < 0,04$ para todos os bilhares.

Para a onda incidente, adotamos a forma da equação dada por (5.22). Aqui, vamos reescrevê-la como

$$\phi(x, y) = \sum_{n=1}^{N_\phi} \phi_n = \sum_{n=1}^{N_\phi} \text{sen}(k_n x) \text{sen}\left(\frac{n\pi y}{L_y}\right), \quad (5.33)$$

com $k_n = \sqrt{k^2 - (n\pi/L_y)^2}$ e a soma se estende até N_ϕ , a qual fornece k_n real ($k > n\pi/L_y$).

O desafio numérico que a função de Green (equação 5.14) impõe se concentra na escolha do número de estados evanescentes, N_E , de tal forma que este resulte em uma matriz T e uma função de onda ψ bem definidas. Ondas evanescentes são modos não propagantes em um certo meio. Em vários métodos de soluções de equações de ondas (principalmente quando se usa técnicas de expansão em uma certa base), modos evanescentes podem aparecer. Talvez a situação mais simples seja justamente aquela que surge em nosso trabalho. Suponha que temos um modo oscilatório $\text{sen}[k(\gamma)x]$ definido para $x \geq 0$. Aqui, o número de onda k é dependente de um parâmetro γ . Eventualmente γ pode assumir valores para tornar k imaginário, ou seja, $k = i\kappa$. Neste caso, teremos $\text{sen}[i\kappa x] = i\text{senh}[\kappa x]$ que obviamente tem um comportamento exponencial, ao invés de periódico. Quando estamos fazendo expansões envolvendo modos evanescentes, precisamos tomar cuidado para incluir um número suficiente de tais modos para garantir convergência dos cálculos.

Das observações feitas até agora, no geral, com N_E maior que N já se obtém um estado definido. Sendo que, quanto maior o número de estados evanescentes, maior a precisão da simulação, ou seja, mais precisa é a determinação da posição das ressonâncias e morfologia dos autoestados. No entanto, não é preciso N_E muito grande para se ter resultados satisfatórios. Com $N_E \approx 2N$, já se observa boa concordância com o caso analítico. Por isso, em todos os casos, vamos atribuir $N_E = 200$ em todas as simulações que seguem. Observamos também que variações nestes parâmetros $N_E \gg N$ permitem maior precisão nas energias ressonantes, influenciando pouco na morfologia dos autoestados. Para o cálculo da função de onda, identificamos os k 's ressonantes de modo idêntico ao MCP tradicional, analisando a variação da média dos módulos quadrados dos elementos da matriz T em função de k .

Para o primeiro caso, analisamos os primeiros estados quânticos do bilhar quadrado. As dimensões adotadas são $L_x = L_y = 1$ e $\theta = 90^\circ$, formando um quadrado de lado unitário L como mostrado na Fig. 5.5a. As figuras 5.5b-g mostram a função de onda associada aos números quânticos $(m \times n)$ em b) (1×1) , c) (2×2) , d) (3×3) , f) (3×5) e (5×3) , estes dois últimos são estados degenerados. O autoestado e) representa uma energia fora da

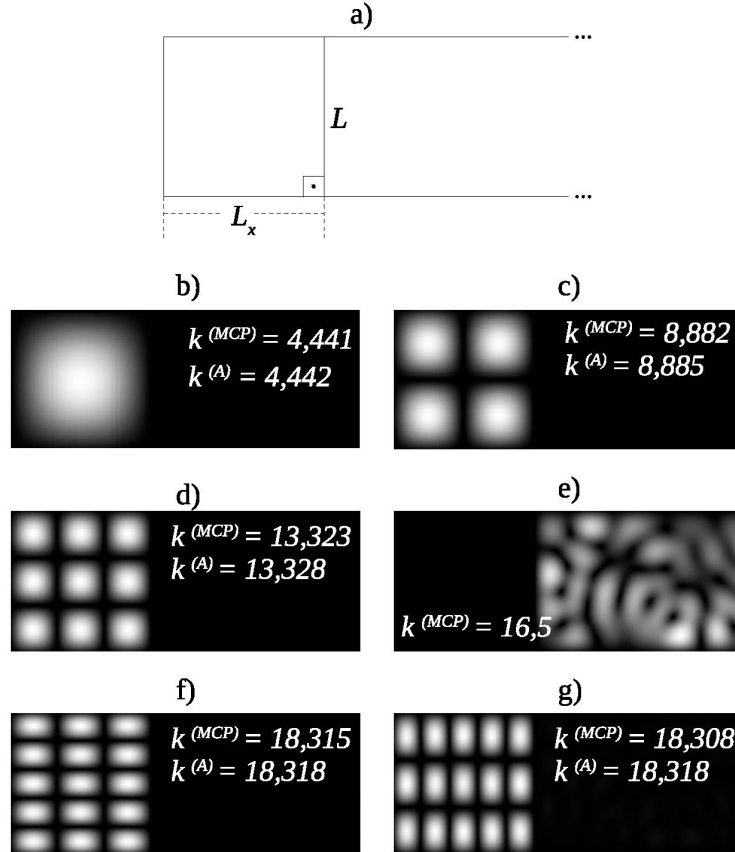


Figura 5.5: a) guia de onda formando o bilhar quadrado de lado $L_x = L = 1$, com $l_x = 0$ e $\theta = 90^\circ$. b), c), d), f) e g) são funções de onda associadas as energias $k^{(MCP)}$. $k^{(A)}$ são autovalores analíticos via equação (2.65). A Fig. e) representa uma energia fora da ressonância.

ressonância, por isso a função de onda no interior do bilhar é nula. Descrevemos também em cada autoestado as energias $k^{(MCP)}$ obtidas pelo MCP para comparar com o caso analítico $k^{(A)}$. Os autovalores $k^{(A)}$ são fornecidos pela equação (2.65).

Como mencionamos no início desta seção, podemos impor maior precisão aos cálculos atribuindo N_E cada vez maior. Tal aspecto se revela influente também em regiões do espectro com degenerescências como visto, por exemplo, em f) e g). Para $N_E = 100$, a simulação

exibe apenas uma energia ressonante. Ao atribuímos $N_E = 200$ mantendo $N = 100$, vemos uma “quebra” da energia inicial em duas, também ressonantes e que representam uma degenerescência do quadrado. Observamos também que o espaçamento entre estas energias diminui com o aumento de N_E .

A Fig. 5.6a exibe o bilhar triangular ($45^\circ, 45^\circ, 90^\circ$) com $L_x = 0$, $L_y = \sqrt{2}$, $l_x = \sqrt{2}$ e $\theta = 45^\circ$. Nas figuras 5.6b-f são plotadas funções de onda para diferentes números de onda

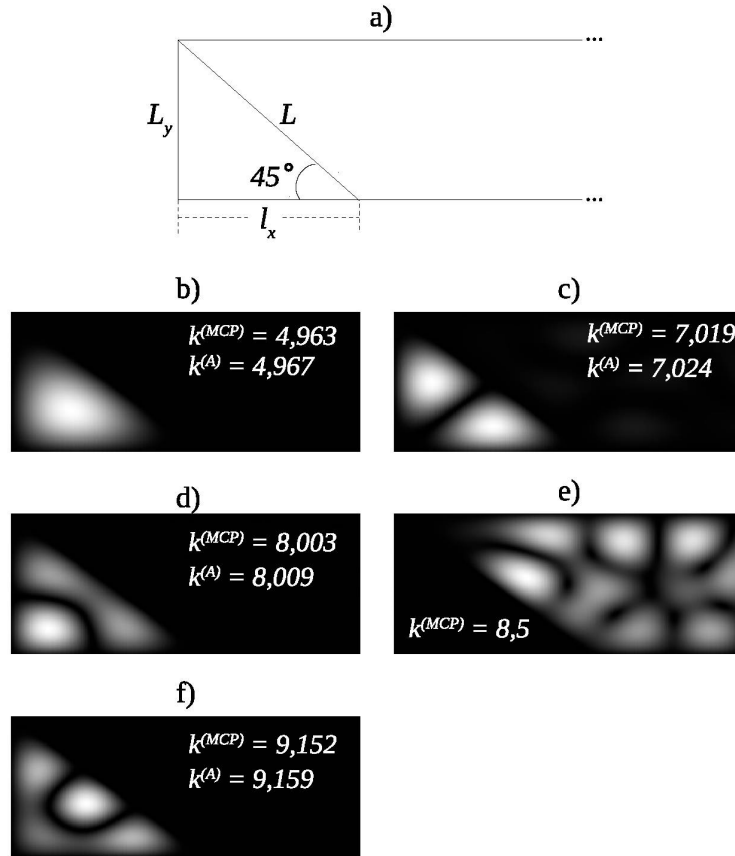


Figura 5.6: a) guia de onda formando o bilhar triangular ($45^\circ, 45^\circ, 90^\circ$) com $l_x = \sqrt{2}$, obtido com $L_x = 0$, e $\theta = 45^\circ$. Para estes parâmetros $L_y = \sqrt{2}$. b), c), d) e f) autofunções associadas as energias $k^{(MCP)}$. $k^{(A)}$ são autovalores analíticos via equação (3.2) com $l_1 = l_x = \sqrt{2}$ e $l_2 = L_y = \sqrt{2}$. A Fig. e) representa uma energia fora da ressonância.

$k^{(MCP)}$. A Fig. e) representa um número de onda fora da ressonância. Os demais autoestados possuem números quânticos ($m \times n$) em b) (2×1), c) (3×1), d) (3×2) e f) (4×1). O espectro analítico $k^{(A)}$ são obtidos via equação (3.2) com $l_1 = l_x = \sqrt{2}$ e $l_2 = L_y = \sqrt{2}$.

Na Fig. 5.7 apresentamos a guia de onda para o bilhar triangular ($30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$). Em 5.7a

é exibida a geometria do bilhar cujas dimensões são $l_x = 1$, $L_x = 0$, $\theta = 30^\circ$ e $L_y = \tan[30^\circ]$. Em 5.7b-g plotamos os estados construídos para diferentes números de onda $k^{(MCP)}$ obtidos via MCP. Os espectro de autovalores $k^{(A)}$ são obtidos via equação (2.69) com as mesmas dimensões adotadas na seção 2.5.2. As funções de onda b), c), e), f) e g) são geradas por

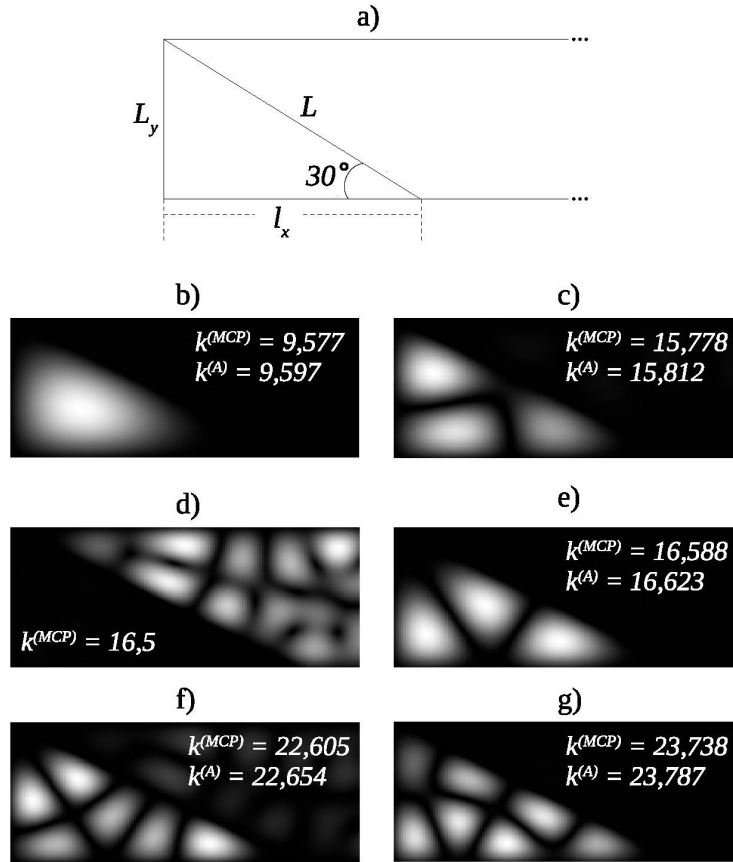


Figura 5.7: a) guia de onda formando o bilhar triangular ($30^\circ, 60^\circ, 90^\circ$) com $l_x = 1$, obtido com $L_x = 0$, e $\theta = 30^\circ$. Para estes parâmetros $L_y = \tan[30^\circ]$. b), c), e), f) e g) são autofunções associadas as energias $k^{(MCP)}$. $k^{(A)}$ são autovalores analíticos via equação (2.69). A Fig. e) representa uma energia fora da ressonância.

energias ressonantes, enquanto o estado e) é calculado com uma energia fora da ressonância. Os números quânticos associados são em b) (3×1), c) (5×2), e) (5×1), f) (7×2) e g) (7×1). É importante destacar que a posição da origem do sistema de coordenadas do bilhar não interfere no módulo do vetor de onda, pois a geometria do triângulo desta seção difere do triângulo da Seç. 2.5.2 apenas mediante as trocas $x \rightarrow -x$.

Por fim, mostramos na Fig. 5.8a a guia de onda para bilhar trapezoidal. Com a atribuição

dos parâmetros de geometria $L_y = 1$, $L_x = 1$, $l_x = 1$ e $\theta = 45^\circ$, o trapézio é construído pela junção das geometrias do quadrado com o triângulo $(45^\circ, 45^\circ, 90^\circ)$. Nas figuras 5.8b-g, apenas a função de onda em g) possui energia fora da ressonância. Os demais autoestados são obtidos para valores de $k^{(MCP)}$'s ressonantes. Obviamente todos os autoestados representam soluções do trapézio, porém, há casos interessantes como visto nos gráficos c), e) e f). Em $x < 1$, vemos as soluções do quadrado constituído de uma diagonal impermeável descrito pelo segmento $(x, y = x)$, enquanto que, em $x > 1$, vemos as soluções do triângulo $(45^\circ, 45^\circ, 90^\circ)$. Em c), por exemplo, temos a solução do triângulo (2×1) com a solução do quadrado (1×1) , em d) temos (3×1) para o triângulo com (1×2) do quadrado, e em f) temos a solução (4×3) do triângulo com a solução (3×3) do quadrado [135].

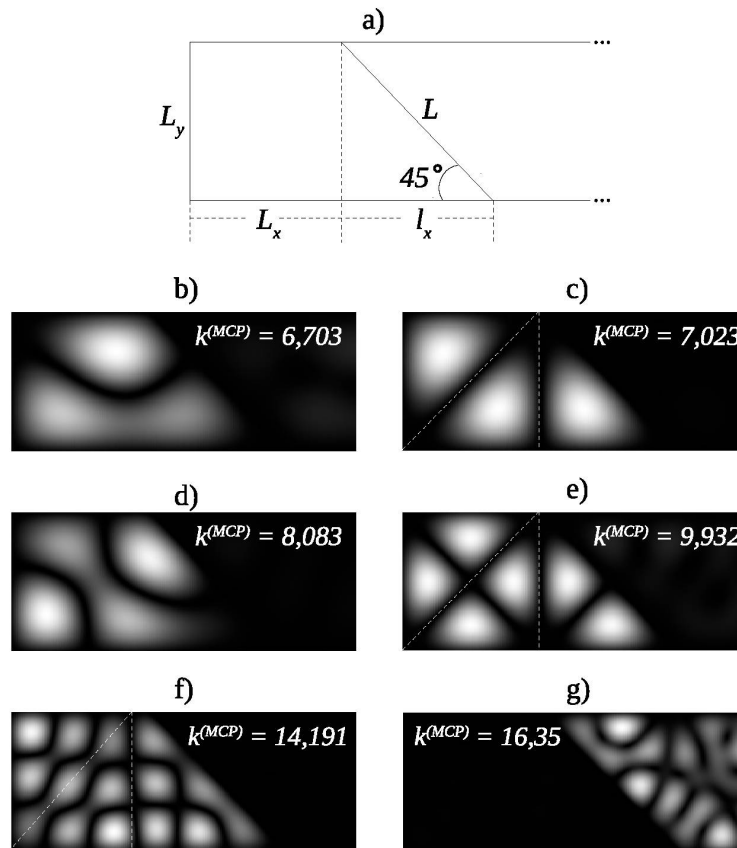


Figura 5.8: a) guia de onda formando o trapézio, sendo a junção das geometrias do quadrado e do triângulo $(45^\circ, 45^\circ, 90^\circ)$ com $l_x = 1$, obtido com $L_x = 1$, e $\theta = 45^\circ$. Para estes parâmetros $L_y = 1$. b), c), d), e) e f) são autofunções associadas as energias $k^{(MCP)}$. A Fig. g) representa uma energia fora da ressonância.

5.4 Conclusões parciais

No presente capítulo propusemos uma alteração na formulação original do MCP. Isto é possível pois o MCP não restringe qual deve ser a região “livre” V no qual estará inserida as estruturas a serem estudadas. A única condição é que se a estrutura for fechada, a região livre deve ser aberta pois então os k 's para a função de Green G_0 formam um contínuo, o que nos permite buscar pelos autovalores discretos k_n (ressonantes) da estrutura. Obviamente que então as funções de onda iniciais φ devem satisfazer as condições de contorno apropriadas para a equação de Helmholtz em V .

A forma natural de garantir que k seja contínuo em V é considerar guias de ondas semi-infinitas. Ou seja, a região “livre” é fechada em todas as direções, menos uma que pode se estender por exemplo de 0 a $+\infty$. Para uma certa classe especial de guias de ondas chamadas de semi-infinitas, propusemos uma forma geral de obter a função de Green G_0 . Estas guias então podem ser usadas como V para o MCP.

Uma vantagem deste procedimento é que por exemplo as bordas de V podem servir como parte das “paredes” das estruturas que queremos calcular. Assim, dependendo da geometria de V e da estrutura analisada, cálculos analíticos fechados podem ser possíveis. Demonstramos tal vantagem considerando uma guia de onda semi-infinita retangular e então calculamos os estados analíticos exatos para o problema de um bilhar retangular, com todas as paredes infinitas, ou uma delas semi-permeável.

Esta nova abordagem traz também significativas vantagens em relação ao cálculo numérico. Como descrito na Sec. 2.5, a dimensão da matriz de espalhamento cresce proporcionalmente com a energia. Então, limitações surgem quando queremos obter estados quânticos de altas energias ou queremos descrever estruturas que são espacialmente muito grandes (por exemplo, um dos lados de tal estrutura sendo uma linha infinita).

No método tradicional, a discretização do bilhar é feita sobre todo o contorno como, por exemplo, no caso do triângulo a discretização é realizada para os três lados, e no caso do retângulo com uma parede semi-permeável, para os quatro lados mais a diagonal.

Nesta nova formulação no entanto, usando a vantagem das paredes previamente existentes de V , a definição da matriz T pode ser feita somente para uma das paredes do bilhar, em

nossos exemplos para o bilhar triangular apenas a hipotenusa (ver Fig. 5.2) e para o bilhar retangular usual apenas uma parede (no caso do bilhar retangular com uma parede semi-permeável, a parede vertical direita e a diagonal).

Logo, drasticamente diminuímos o número de elementos da matriz T . Portanto o custo computacional também diminui e para um mesmo modo k_n , o trabalho será muito menor no novo caso. Por outro lado, se temos que calcular estados com energias muito grandes, naturalmente temos que trabalhar com matrizes T maiores, mas isto agora é possível pois a discretização se dá por exemplo em uma única parede ao invés de quatro paredes (no caso do bilhar retangular usual). Os exemplos numéricos estudados neste capítulo, a saber bilhares quadrado, triangular e trapezoidal, ilustraram a vantagem deste procedimento e esperamos que isto possa abrir mais ainda a possibilidade de utilização do Método do Contorno de Paredes.

Capítulo 6

Conclusão

O presente trabalho consistiu na busca de informações das soluções de espalhamento para diferentes sistemas submetidos a variações de algum parâmetro específico. Consideramos elementos específicos que provocam alterações na morfologia da função de onda quando uma determinada estrutura é sujeita a variações de geometria ou de permeabilidade. Para o primeiro caso, analisamos as soluções do bilhar triangular quando a sua geometria é perturbada, mediante modificações dos ângulos internos, na região de transição entre as dinâmicas regular e não-regular.

Usando as propriedades da matriz T como função da energia e da geometria do triângulo, a função de onda mostrou comportamento semelhante para baixas e altas energias no que diz respeito a variações na sua distribuição espacial, ou seja, observa-se que a morfologia dos autoestados está intimamente ligada a maneira como determinada família desenvolve-se no espaço de fase. Famílias cuja evolução ocorre em linha reta, tendem a manter a função de onda sob invariância da sua morfologia. Tal comportamento retilíneo ocorre frequentemente para baixas energias e com variações de geometria suficientemente pequenas, logo, em regiões mais baixas do espectro, os autoestados apresentam evolução paralela ao eixo da geometria do espaço de fase, resultando em funções de onda com alterações espaciais imperceptíveis. Para regiões mais altas do espectro, a função de onda mantém a mesma tendência de evolução mantendo constante a sua morfologia numa mesma família enquanto esta evolui em linha reta. No entanto, sendo menor o comprimento da onda que incide no bilhar, a matriz T passa a adquirir maior sensibilidade a variações dos ângulos internos, e assim os autoestados

de famílias vizinhas passam a interagir e a se repelir em regiões de convergência.

A função de onda mostrou forte tendência em manter a sua morfologia constante dando “saltos” entre famílias que interagem e se repelem, em um comportamento conhecido como *avoided crossing*, o qual ocorre em sistemas cuja dinâmica descreve níveis caóticos de energia. Também sob altas energias, identificamos as cicatrizes, as quais comumente aparecem em autoestados cuja evolução se dá em estreitos intervalos de geometria, ou seja, em evolução diagonal. Mostramos que o número de órbitas em uma determinada cicatriz depende de qual grupo um autoestado é construído, e que a densidade da função de onda é tão localizada em uma área específica do bilhar quanto menor for a inclinação da família.

Para o segundo caso, abordamos o bilhar retangular cujas paredes externas mantêm transmissão nula (permeabilidade infinita), enquanto a parede diagonal possui transmissão variável dentro dos limites zero a um. A partir das propriedades da matriz T , mostramos como os autoestados evoluem no espaço de fase $k \times T_d$, identificando regiões de convergência e analisando a função de onda mediante variações destes parâmetros. Originalmente, no limite inferior de transmissão, as energias de ressonância são características do bilhar triangular. Com o aumento da transmissão na diagonal, viu-se uma transição de estados quânticos do bilhar triangular para o bilhar retangular, cujas soluções deste último são geradas no limite superior onde a transmissão é máxima. Em todos os casos, a função de onda mantém certa suavidade na transição entre os dois limites, exceto em regiões de repulsão, na qual a morfologia associada aos autoestados é invertida. Tal aspecto pode ser encarado quando fizemos um paralelo com a evolução das famílias. Observa-se que estas evoluem sem bruscas variações na dinâmica, e isso favorece a suavidade mencionada. Porém, quando determinado autoestado de uma família passa a interagir com outro de outra família, a repulsão ocorre, e as famílias nas quais cada autoestado é construído sofrem bruscas variações na morfologia.

O Método de Contorno de Paredes mostrou em todas as situações uma poderosa via para o cálculo de problemas de fronteira. A partir do conhecimento de apenas uma quantidade, a matriz T , podemos identificar diversos elementos que constituem um sistema quântico como, por exemplo, *avoided crossings*, degenerescências, cicatrizes, etc. Sendo estes obtidos mediante cálculos precisos da densidade de probabilidade da função de onda. Mostramos ainda no capítulo 5 como podemos facilitar consideravelmente o estudo de diferentes formas

de contornos através de maneiras alternativas de se obter a função de Green, facilitando a implementação do método. Muito ainda pode ser feito, e o MCP oferece uma gama de possibilidades que podem permitir a ampliação da sua versatilidade com o objetivo de simplificá-lo e torná-lo cada vez mais eficiente na abordagem de diferentes problemas que exigem soluções por espalhamento.

Trabalhos futuros

Os resultados obtidos neste trabalho mostram que a função de onda é um elemento chave na construção de sistemas quânticos. Devido ao avanço exponencial da engenharia quântica, levar em conta aspectos morfológicos da função de onda é crucial para obter bons resultados experimentais. Embora este trabalho tenha consistido em bilhares poligonais de estrutura simples, vê-se a possibilidade de ampliar os estudos para estruturas mais complexas com diferentes parâmetros variacionais.

A nova técnica apresentada pelo MCP torna o estudo de problemas de fronteira mais apropriado para sistemas sob altas energias. Pois, a partir de novas formas de implementar a função de Green, passamos a discretizar somente a parede \mathcal{C} , assim, as simulações numéricas tornam-se menos exigentes em termos computacionais. Viu-se também características interessantes na construção dos autoestados do trapézio. De acordo com o que foi observado, algumas soluções indicam a presença de soluções do quadrado com diagonal impermeável. Estudos posteriores podem ser feitos levando em conta a inserção de uma parede com permeabilidade variável em diferentes partes da guia, para que seja possível observar possíveis transições entre estados quânticos.

Apêndice A

Bilhares quânticos de dinâmica regular e não-regular

A determinação mediante análise quantitativa da dinâmica de um bilhar, seja ela regular, caótica ou intermediária, pode ser feita através da teoria de distribuição do espaçamento de níveis de energias vizinhos $P(s)$ [62]. Em particular, esta teoria fornece resultados em que é possível identificar a dinâmica mais apropriada para um determinado sistema quântico [55]. Por definição, a distribuição $P(s)$ é definida de tal forma que $P(s)ds$ é a probabilidade de que s , a separação entre valores vizinhos de energia, esteja entre $s + ds$ [111]. Bilhares com pelo menos uma linha de simetria possuem uma distribuição descrita pela equação de Poisson [136–138], isto é

$$P^{(P)}(s) = e^{-s}. \quad (\text{A.1})$$

Por outro lado, espectros quânticos de sistemas caóticos nos levam a distribuição de níveis do tipo Wigner ou GOE [138–140]

$$P^{(W)}(s) = \frac{\pi}{2} s e^{-\frac{\pi}{4} s^2}. \quad (\text{A.2})$$

De acordo com as expressões (A.1) e (A.2), no limite em que o espaçamento $s \rightarrow 0$, a distribuição de Poisson é máxima, $P^{(P)}(0) \rightarrow 1$, e temos a ocorrência de estados degenerados. No mesmo limite $s \rightarrow 0$, a distribuição de Wigner é mínima, ou seja, $P^{(W)}(0) \rightarrow 0$, e assim temos uma repulsão entre os níveis de energia [141].

Diferentes investigações propõem distribuições estatísticas intermediárias entre os limites de Poisson e Wigner [142–148]. Estas distribuições dependem de um parâmetro (ou mais), que pode ser ajustado para interpolar entre os casos limites de espectros regulares e caóticos. Uma das mais populares, e que será utilizada neste trabalho, é a distribuição de Brody [146, 149, 150],

$$P^{(B)}(s) = (\lambda + 1)bs^\lambda e^{(-bs^{\lambda+1})} \quad (\text{A.3})$$

onde $b = [\Gamma(1 + (\lambda + 1)^{-1})]^{\lambda+1}$. A equação (A.3) assume que para $\lambda = 0$ e $\lambda = 1$ temos os dois limites estatísticos Poisson e Wigner, respectivamente. Logo, para uma distribuição intermediária, λ está contido no intervalo $0 < \lambda < 1$.

A segunda, também intermediária entre as distribuições de Poisson e Wigner, e que também será aqui discutida, é a distribuição de Berry-Robnik (BR), dada pela relação [138]

$$P^{(BR)}(s) = e^{-\rho_1 s} \left[e^{-\frac{\pi \rho_2^2 s^2}{4}} \left(2\rho_1 \rho_2 + \frac{\pi \rho_2^3 s}{2} \right) + \rho_1^2 \operatorname{erfc} \left(\frac{\sqrt{\pi} \rho_2 s}{2} \right) \right] \quad (\text{A.4})$$

onde $\operatorname{erf}(x) = 2/\sqrt{\pi} \int_0^x e^{-u^2} du$ é a integral erro e $\operatorname{erfc}(x)$ o seu complemento, isto é, $\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x)$. ρ_1 e ρ_2 são parâmetros que ajustam $P^{(BR)}(s)$ para uma distribuição entre Poisson onde $\rho_1 = 1$ e $\rho_2 = 0$, e Wigner com $\rho_1 = 0$ e $\rho_2 = 1$ [151].

Apêndice B

A função de Green para a caixa retangular

Como complemento, mostramos como obter a função de Green G^{ret} para uma caixa 2D (33) a partir de $G_{ret}^{(\pm)}$. Assim, assumimos $0 < x < L_x$ com uma extra condição de contorno de Dirichlet em $x = L_x$, ou $G^{ret}(L_x, y; x_0, y_0; k) = 0$. Pois $x > x_0$, $G_{ret}^{(\pm)}$ representa uma partícula se propagando para a direita (+) (esquerda (-)) ao longo de x . Como estamos procurando por uma função de Green “estacionária”, é muito razoável escrever G^{ret} como uma combinação linear desses dois G 's, mas com mudanças necessárias nas fases de cada modo n compondo $G_{ret}^{(\pm)}$. Para que isso seja possível, implementamos o reescalonamento $F_n^{(\pm)} \rightarrow c_n^{(\pm)}(k_n; L_x) F_n^{(\pm)}$ — portanto, não alterando a ação dos derivativos sobre F_n — nas expressões para $G_{ret}^{(\pm)}$ (daqui em diante denominado $G_{ret,c}^{(\pm)}$) e considerando $G_{ret,c}^{(+)} - G_{ret,c}^{(-)}$. Se para $c_n^{(\pm)}$ tomarmos $(i/2) \exp[\mp i k_n L_x]$, diretamente mostramos que $x_>$ dependente de $G_{ret,c}^{(+)} - G_{ret,c}^{(-)}$ se torna $\text{sen}[k_n(L_x - x_>)]$, portanto $G_{ret,c}^{(+)} - G_{ret,c}^{(-)}$ é nulo tanto para $x = L_x$ quanto para $x_0 = L_x$. No entanto, a partir dos procedimentos anteriores, descobrimos que, neste caso, $(\nabla^2 + k^2)(G_{ret,c}^{(+)} - G_{ret,c}^{(-)}) = \text{sen}[k_n L_x] \delta(x - x_0) \delta(y - y_0)$. Finalmente, para nos livrarmos desse prefator para o δ 's, apenas redefinimos $c_n^{(\pm)} = (i/2) \exp[\mp i k_n L_x] / \text{sen}[k_n L_x]$. Então, $G^{ret} = G_{ret,c}^{(+)} - G_{ret,c}^{(-)}$ resulta

$$G^{ret} = \sum_{n=1}^{\infty} \varphi_n^{(L_y)}(y) \varphi_n^{(L_y)}(y_0) \frac{(-1)}{k_n \text{sen}[k_n L_x]} \text{sen}[k_n x_<] \text{sen}[k_n (L_x - x_>)]. \quad (\text{B.1})$$

Resta provar que a expressão acima é na verdade a função de Green correta bem conhecida para uma partícula em uma caixa 2D [128, 129]. Para tanto, seguimos o protocolo

desenvolvido em [152]. Como $\text{sen}[u]\text{sen}[v] = (\cos[u-v] - \cos[u+v])/2$ e de 1.445-6 em [153], ou seja, $\sum_{m=1}^{\infty} \cos[mz]/(m^2 - \alpha^2) = 1/(2\alpha^2) - \pi \cos[\alpha(\pi - z)]/(\alpha \text{sen}[\alpha\pi])$, podemos escrever (identificando $\alpha = k_n L_x/\pi$)

$$\begin{aligned}
-\text{sen}[k_n x_<]\text{sen}[k_n(L_x - x_>)] &= \frac{1}{2} \left(\cos[k_n(L_x - |x - x_0|)] \right. \\
&\quad \left. - \cos[k_n(L_x - (x + x_0))] \right) \\
&= \frac{1}{L_x} \sum_{m=1}^{\infty} (k_n^2 - m^2 \pi^2/L_x^2)^{-1} \\
&\quad \times \left(\cos[m\pi(x - x_0)/L_x] \right. \\
&\quad \left. - \cos[m\pi(x + x_0)/L_x] \right) \\
&= \frac{2}{L_x} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\text{sen}[m\pi x/L_x] \text{sen}[m\pi x_0/L_x]}{(k^2 - n^2 \pi^2/L_y^2 - m^2 \pi^2/L_x^2)}, \tag{B.2}
\end{aligned}$$

tal que

$$G_{2D}^{ret} = \sum_{n,m=1}^{\infty} \frac{\varphi_n^{(L_y)}(y) \varphi_n^{(L_y)}(y_0) \varphi_m^{(L_x)}(x) \varphi_m^{(L_x)}(x_0)}{k^2 - n^2 \pi^2/L_y^2 - m^2 \pi^2/L_x^2}, \tag{B.3}$$

que é a função de Green exata para o problema [128, 129].

Referências

- [1] A. G. Macedo, F. Zanetti, A. Mikowski, J. C. Hummelen, C. M. Lepienski, M. G. E. da Luz, and L. S. Roman, “Improving light harvesting in polymer photodetector devices through nanoindented metal mask films,” *Journal of Applied Physics*, vol. 104, no. 3, p. 033714, 2008.
- [2] A. Nunes, F. M. Zanetti, and M. L. Lyra, “Switching of transmission resonances in a two-channels coupler: A boundary wall method scattering study,” *Annals of Physics*, vol. 373, pp. 707–716, 2016.
- [3] T. A. Lima and F. M. de Aguiar, “Classical billiards and quantum fluids,” *Physical Review E*, vol. 91, p. 012923, 2015.
- [4] F. M. Zanetti and M. G. E. da Luz, “Eigensolutions and wave function morphology in coupled quantum billiards: Quarter bunimovich stadium as limit of the square and quarter disk coupling.” Unpublished, Apr. 2018.
- [5] S. Das, A. J. Gates, H. A. Abdu, G. S. Rose, C. A. Picconatto, and J. Ellenbogen, “Designs for ultra-tiny, special-purpose nanoelectronic circuits,” *IEEE Transactions on Circuits and Systems I*, vol. 54, no. 11, pp. 2528–2540, 2007.
- [6] R. Röder and C. Ronning, “Review on the dynamics of semiconductor nanowire lasers,” *Semiconductor Science and Technology*, vol. 33, no. 3, p. 033001, 2018.
- [7] L. Pavesi, L. D. Negro, C. Mazzoleni, G. Franzò, and F. Priolo, “Optical gain in silicon nanocrystals,” *Nature*, vol. 408, pp. 440–444, 2000.

- [8] K. L. Ekinici and M. L. Rouke, “Nanoelectromechanical systems,” *Review of Scientific Instruments*, vol. 76, p. 061101, 2005.
- [9] G. Rapenne, J. P. Launay, and C. Joachim, “Design and synthesis of mono-molecular machines,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 18, no. 33, p. 1797, 2006.
- [10] D. Culcer, A. L. Saraiva, B. Koiller, X. Hu, and S. D. Sarma, “Valley-based noise-resistant quantum computation using si quantum dots,” *Physical Review Letters*, vol. 108, p. 126804, 2012.
- [11] B.-C. Ren and F.-G. Deng, “Hyper-parallel photonic quantum computation with coupled quantum dots,” *Scientific Reports*, vol. 4, p. 4623, 2014.
- [12] M. Veldhorst, C. H. Yang, J. C. C. Hwang, W. Huang, J. P. Dehollain, J. T. Muhonen, S. Simmons, A. Laucht, F. E. Hudson, K. M. Itoh, A. Morello, and A. S. Dzurak, “A two-qubit logic gate in silicon,” *Nature*, vol. 526, p. 410–414, 2015.
- [13] G. Shambat, S.-R. Kothapalli, J. Provineŧ, T. Sarmiento, J. Harris, S. S. Gambhir, and J. Vučković, “Single-cell photonic nanocavity probes,” *Nano Lett*, vol. 13, no. 11, p. 4999–5005, 2013.
- [14] Q. Sun, Y. A. Wang, L. S. Li, D. Wang, T. Zhu, J. Xu, C. Yang, and Y. Li, “Bright, multicoloured light-emitting diodes based on quantum dots,” *Nature Photonics*, vol. 1, pp. 717–722, 2007.
- [15] T. Jamieson, R. Bakhshi, D. Petrova, R. Pockock, M. Imani, and A. M. Seifalian, “Biological applications of quantum dots,” *Biomaterials*, vol. 28, pp. 4717–4732, 2007.
- [16] J. A. Smydera and T. D. Krauss, “Coming attractions for semiconductor quantum dots,” *Materials Today*, vol. 14, pp. 382–387, 2011.
- [17] O. E. Semonin, J. M. Luther, and M. C. Beard, “Quantum dots for nextgeneration photovoltaics,” *Materials Today*, vol. 15, pp. 508–515, 2012.

- [18] W. H. Lim, F. A. Zwanenburg, H. Huebl, M. Möttönen, K. W. Chan, A. Morello, and A. S. Dzurak, “Observation of the single-electron regime in a highly tunable silicon quantum dot,” *Applied Physics Letters*, vol. 95, p. 242102, 2009.
- [19] Z. X. Li, “Quantum transition of an electron in an asymmetric quantum dot,” *Journal of Low Temperature Physics*, vol. 181, pp. 30–37, 2015.
- [20] I. Y. Chestnov, V. A. Shakhnazaryan, I. A. Shelykh, and A. P. Alodjants, “Ensemble of asymmetric quantum dots in a cavity as a terahertz laser source,” *JETP Letters*, vol. 104, no. 3, pp. 169–174, 2016.
- [21] Y. H. Kim, M. Barth, H. J. Stöckmann, and J. P. Bird, “Wave function scarring in open quantum dots: A microwave-billiard analog study,” *Physical Review B*, vol. 65, no. 16, p. 165317, 2002.
- [22] R. Akis, D. K. Ferry, and J. P. Bird, “Wave function scarring effects in open stadium shaped quantum dots,” *Physical Review Letters*, vol. 79, no. 1, p. 123, 1997.
- [23] J. P. Bird, A. Shailos, M. Elhassan, C. Prasad, D. K. Ferry, L. H. Lin, N. Aoki, Y. Ochiai, K. Ishibashi, and Y. Aoyagi, “Signatures of coherent electron transport in open quantum dot arrays,” *Nanotechnology*, vol. 11, pp. 365–369, 2000.
- [24] W. Li, “Highly enhanced fluorescence of fluorophores inside a metallic nanocavity,” *Chemical Communications*, vol. 47, p. 5834–5836, 2011.
- [25] S. Kim, H. Ko, C. Lee, M. Kim, K. S. Kim, Y.-H. Lee, K. Shin, and Y.-H. Cho, “Semiconductor photonic nanocavity on a paper substrate,” *Advanced Materials*, vol. 28, pp. 9765–9769, 2016.
- [26] K. Ashida, M. Okano, M. Ohtsuka, M. Seki, N. Yokoyama, K. Koshino, M. Mori, T. Asano, S. Noda, and Y. Takahashi, “Ultrahigh-q photonic crystal nanocavities fabricated by cmos process technologies,” *Optics Express*, vol. 25, pp. 18165–18174, 2017.
- [27] K. V. Sreekanth, S. Sreejith, S. Han, A. Mishra, X. Chen, H. Sun, C. T. Lim, and R. Singh, “Biosensing with the singular phase of an ultrathin metal-dielectric nanophotonic cavity,” *Nature Communications*, vol. 9, no. 369, 2018.

- [28] S. R. Jain and R. Samajdar, “Nodal portraits of quantum billiards: Domains, lines, and statistics,” *Review of Modern Physics*, vol. 89, no. 4, p. 045005, 2017.
- [29] A. Saa and R. de Sá Teles, *Bilhares: Aspectos Físicos e Matemáticos*. Instituto de Matemática Pura e Aplicada, 2013.
- [30] R. Markarian, *Bilhares: A hipótese ergódica de Boltzmann*. Matemática Universitária, 2000.
- [31] V. Milner, J. L. Hanssen, W. C. Campbell, and M. G. Raizen, “Optical billiards for atoms,” *Physical Review Letters*, vol. 86, no. 8, p. 1514, 2001.
- [32] D. Biswas, “Periodic orbits in polygonal billiards,” *Pramana - Journal of Physics*, vol. 48, no. 2, pp. 487–501, 1997.
- [33] E. Gutkin, “Billiards in polygons,” *Physica D: Nonlinear Phenomena*, vol. 19, no. 3, pp. 311–333, 1986.
- [34] G. M. Zaslavsky, “Chaotic dynamics and the origin of statistical laws,” *Physics Today*, vol. 52(8), pp. 39–45, 1999.
- [35] Y. Hlushchuk and S. Russ, “Level statistics and eigenfunctions of pseudointegrable systems: Dependence on energy and genus number,” *Physical Review E*, vol. 68, p. 016203, 2003.
- [36] L. Couchman, E. Ott, and T. M. Antonsen, “Quantum chaos in systems with ray splitting,” *Physical Review A*, vol. 46, no. 10, p. 6193, 1992.
- [37] B. Li and M. Robnik, “Sensitivity of the eigenfunctions and the level curvature distribution in quantum billiards,” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. 29, no. 15, p. 4387, 1996.
- [38] M. A. Doncheski and R. W. Robinett, “Quantum mechanical analysis of the equilateral triangle billiard: Periodic orbit theory and wave packet revivals,” *Annals of Physics*, vol. 299, p. 208–227, 2002.

- [39] F. Haake, G. Lenz, P. Seba, J. Stein, H.-J. Stöckmann, and K. Życzkowski, “Manifestation of wave chaos in pseudointegrable microwave resonators,” *Physical Review A*, vol. 44, no. 10, p. R6161(R), 1991.
- [40] T. H. Seligman, J. J. M. Verbaarschot, and M. R. Zirnbauer, “Spectral fluctuation properties of hamiltonian systems: the transition region between order and chaos,” *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. 18, no. 14, p. 2751, 1985.
- [41] T. Zimmermann, H. D. Meyer, H. Köppel, and L. S. Cederbaum, “Manifestation of classical chaos in the statistics of quantum energy levels,” *Physical Review A*, vol. 33, p. 4334, 1986.
- [42] R. U. Haq, A. Pandey, and O. Bohigas, “Fluctuation properties of nuclear energy levels: Do theory and experiment agree?,” *Physical Review Letters*, vol. 48, p. 1086, 1982.
- [43] W. W. III and E. G. Bilpuch, “Statistical tests applied to proton resonances in co-57,” *Z. Physics A*, vol. 300, pp. 89–95, 1981.
- [44] A. Y. Abul-Magd and H. A. Weidenmüller, “Regular versus chaotic dynamics in nuclear spectra near the ground state,” *Physics Letters B*, vol. 162, no. 14, pp. 223–226, 1985.
- [45] J. F. Shriner, G. E. Mitchell, and T. von Egidy, “Fluctuation properties of spacings of low-lying nuclear levels,” *Z. Physics A - Hadrons and Nuclei*, vol. 338, pp. 309–318, 1991.
- [46] H. Friedrich and H. Wintgen, “The hydrogen atom in a uniform magnetic field — an example of chaos,” *Physics Reports*, vol. 183, pp. 37–79, 1989.
- [47] M. J. Davis, “Phase space structure in classically chaotic regions and the nature of quantum eigenstates,” *The Journal of Physical Chemistry*, vol. 92, no. 11, pp. 3124–3144, 1988.
- [48] G. Datslerisa, L. Hupeb), and R. Fleischmann, “Estimating lyapunov exponents in billiards,” *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, vol. 29, p. 093115, 2019.

- [49] R. Eisberg and R. Resnick, *Física Quântica: Átomos, Moléculas, Sólidos, Núcleos e Partículas*. Elsevier, 1979.
- [50] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics (Revised Edition)*. Addison-Wesley Publishing Company, 1994.
- [51] I. V. Zozoulenko and K. F. Berggren, “Quantum scattering, resonant states, and conductance fluctuations in an open square electron billiard,” *Physical Review B*, vol. 56, no. 11, p. 6931, 1997.
- [52] H. C. Schachner and G. M. Obermair, “Quantum billiards in the shape of right triangles,” *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, vol. 95, p. 113–119, 1994.
- [53] H. J. Stöckmann, *Quantum Chaos: An Introduction*. Cambridge University Press, 1999.
- [54] E. Bogomolny and C. Schmit, “Structure of wave functions of pseudointegrable billiards,” *Physical Review Letters*, vol. 92, no. 24, p. 244102, 2004.
- [55] M. Feingold, “Energy-level statistics of integrable quantum systems,” *Physical Review Letters*, vol. 55, no. 13, p. 2626, 1985.
- [56] A. G. M. T. W. Ruijgrok, “Quantum aspects of triangular billiards,” *Physica A*, vol. 210, pp. 476–488, 1994.
- [57] C. Jung, “An exactly soluble three-body problem in one dimension,” *Canadian Journal of Physics*, vol. 58, no. 6, p. 719, 1980.
- [58] I. Kosztin and K. Schulten, “Boundary integral method for stationary states of two-dimensional quantum systems,” *International Journal of Modern Physics C*, vol. 8, no. 2, pp. 293–325, 1997.
- [59] D. L. Kaufman, I. Kosztin, and K. Schultena, “Expansion method for stationary states of quantum billiards,” *American Journal of Physics*, vol. 67, p. 133, 1998.
- [60] G. Hackenbroich, E. Narimanov, and A. D. Stone, “Quantum perturbation theory for the level splitting in billiards,” *Physical Review E*, vol. 57, no. 1, p. R5(R), 1998.

- [61] S. Tasaki, T. Harayama, and A. Shudo, “Interior dirichlet eigenvalue problem, exterior neumann scattering problem, and boundary element method for quantum billiards,” *Physical Review E*, vol. 56, no. 1, p. R13(R), 1997.
- [62] E. Vergini and M. Saraceno, “Calculation by scaling of highly excited states of billiards,” *Physical Review E*, vol. 52, no. 3, p. 2204, 1995.
- [63] M. G. E. da Luz, A. S. Lupu-Sax, and E. J. Heller, “Quantum scattering from arbitrary boundaries,” *Physical Review E*, vol. 56, no. 3, p. 2496, 1997.
- [64] J. Nagler, M. Krieger, M. Linke, J. Schönke, and J. Wiersig, “Leaking billiards,” *Physical Review E*, vol. 75, p. 046204, 2007.
- [65] F. M. Zanetti and M. G. E. da Luz, “Determining and characterizing families of electronic resonance states in open and closed coupled cavities,” *The European Physical Journal B*, vol. 85, no. 6, p. 202, 2012.
- [66] F. M. Zanetti, M. L. Lyra, F. A. B. F. de Moura, and M. G. E. da Luz, “Resonant scattering states in 2d nanostructured waveguides: a boundary wall approach,” *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, vol. 42, no. 2, p. 025402, 2009.
- [67] J. A. Katine, M. A. Eriksson, A. S. Adourian, R. M. Westervelt, J. D. Edwards, A. Lupu-Sax, E. J. Heller, K. L. Campman, and A. C. Gossard, “Point contact conductance of an open resonator,” *Physical Review Letters*, vol. 79, no. 24, p. 4806, 1997.
- [68] J. Y. Vaishnav, A. Itsara, and E. J. Heller, “Hall of mirrors scattering from an impurity in a quantum wire,” *Physical Review B*, vol. 73, p. 115331, 2006.
- [69] J. Y. Vaishnav, J. D. Walls, M. Apratim, and E. J. Heller, “Matter-wave scattering and guiding by atomic arrays,” *Physical Review A*, vol. 76, p. 013620, 2007.
- [70] P. V. Parimi, W. T. Lu, P. Vodo, J. Sokoloff, J. S. Derov, and S. Sridhar, “Negative refraction and left-handed electromagnetism in microwave photonic crystals,” *Physical Review Letters*, vol. 92, no. 12, p. 127401, 2004.

- [71] H. Garcia-Gracia and J. C. Gutiérrez-Vega, “Scalar wave scattering in spherical cavity resonator with conical channels,” *Journal of the Optical Society of America A*, vol. 31, pp. 246–252, 2014.
- [72] H. Garcia-Gracia and J. C. Gutierrez-Vega, “Tunneling phenomena in the open elliptic quantum billiard,” *Physical Review E*, vol. 86, p. 016210, 2012.
- [73] M. Berry and M. Wilkinson, “Diabolical points in the spectra of triangles,” *Soc. Lond. A*, vol. 392, pp. 15–43, 1984.
- [74] F. M. Zanetti, *Aplicações do Método do Contorno de Paredes a alguns problemas de espalhamento quântico*. PhD thesis, Universidade Federal do Paraná, 2008.
- [75] F. M. Zanetti, E. Vicentini, and M. G. E. da Luz, “Eigenstates and scattering solutions for billiard problems: A boundary wall approach,” *Annals of Physics*, vol. 323, no. 7, pp. 1644–1676, 2008.
- [76] E. Butkov, *Física Matemática*. Guanabara Koogan S.A, 1988.
- [77] G. B. Arfken, *Mathematical Methods for Physicists*. Academic Press, 2012.
- [78] F. W. Byrona and R. W. Fuller, *Mathematics of Classical and Quantum Physics*. Dover Publication, 1992.
- [79] R. L. Liboff and J. Liu, “The sinai billiard, square torus, and field chaos,” *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, vol. 10, p. 756, 2000.
- [80] D. J. Griffiths, *Introduction to Quantum Mechanics*. Prentice Hall, Inc., 1995.
- [81] P. A. M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*. Oxford University Press, 1948.
- [82] R. L. Liboff, *Introductory Quantum Mechanics*. Addison-Wesley Publishing Company, 1980.
- [83] P. Pedram and M. Vahabi, “Exact solutions of a particle in a box with a delta function potential: The factorization method,” *American Journal of Physics*, vol. 78, pp. 839–841, 2010.

- [84] M. F. C. M. Quintela and J. M. B. L. dos Santos, “A polynomial approach to the spectrum of dirac-weyl polygonal billiards,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 33, no. 3, p. 035901, 2020.
- [85] R. Samajdar and S. R. Jain, “Exact eigenfunction amplitude distributions of integrable quantum billiards,” *Journal of Mathematical Physics*, vol. 59, p. 012103, 2019.
- [86] L. Xiang-Long, Z. Man-Zuo, and L. Lu, “Two-dimensional quantum spectra and classical orbits of isosceles- right triangular billiards,” *Acta Physica Sinica - Chinese Edition*, vol. 61, p. 220301, 2012.
- [87] W.-K. Li, “A particle in an isosceles right triangle,” *Journal of Chemical Education*, vol. 61, 1984.
- [88] W. K. Li and S. M. Blinder, “Solution of the schrödinger equation for a particle in an equilateral triangle,” *Journal of Mathematical Physics*, vol. 26, no. 11, p. 2784, 1985.
- [89] P. N. Gorley, Y. V. Vorobiev, J. González-Hernández, and P. P. Horley, “Analytical solution of the schrodinger equation for an electron confined in a triangle-shaped quantum well,” *Microelectronic Engineering*, vol. 66, pp. 39–45, 2003.
- [90] W.-K. Li and S. M. Blinder, “Particle in an equilateral triangle: Exact solution of a nonseparable problem,” *Journal of Chemical Education*, vol. 64, no. 2, p. 130, 1987.
- [91] R. Artuso, G. Casati, and I. Guarneri, “Numerical study on ergodic properties of triangular billiards,” *Physical Review E*, vol. 55, no. 6, p. 6384, 1996.
- [92] T. A. Lima, S. Rodríguez-Pérez, and F. M. de Aguiar, “Ergodicity and quantum correlations in irrational triangular billiards,” *Physical Review E*, vol. 87, p. 062902, 2013.
- [93] M. V. Berry and M. Tabor, “Level clustering in the regular spectrum,” *The Royal Society*, vol. 356, pp. 375–394, 1977.
- [94] M. Tomiya, S. Sakamoto, and E. J. Heller, “Periodic orbit scar in wavepacket propagation,” *International Journal of Modern Physics C*, vol. 30, no. 4, p. 1950026, 2019.