

TESE DE  
MESTRADO

# Teoria de Landau-Zener para Sistemas Caóticos

LUIS ALBERTO PECHE PUERTAS

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS-CBPF

RIO DE JANEIRO, NOVEMBRO DE 1998

# Agradecimentos

À CAPES pela bolsa concedida

Ao meu orientador Caio Henrique Lewenkopf pela ajuda no trabalho desta tese.

Ao Alfredo Ozorio de Almeida por apresentar-me ao meu orientador

Ao Raul Vallejos.

À Myriam Simões Coutinho.

A meus amigos Rodolfo Casana Sifuentes, Guillermo Cuba Castillo, Juan Diaz Bulnes, Marco Flores Rivera, Rafael Pujada Bermúdez, Gabriel Flores Hidalgo, Onofre Rojas Santos, German Gomero Ferrer, Moises Rojas Leyva, Leny Carrion Salazar, Fernando Vizcarra Siguas, Armando Bernui, Gino Janampa Ananos, Vicente Atoche Espinoza.

A meus amigos da UERJ Edson Ribeiro dos Santos, Erica Renata de Paula Alves e André Trelles da Cunha Lima.

Aos professores do CBPF.

Ao pessoal do DMF e ao pessoal da biblioteca do CBPF.

# Resumo

Este estudo é dedicado aos mecanismos de violação da aproximação adiabática (Born-Oppenheimer) para sistemas cujos graus de liberdade rápidos exibem dinâmica caótica no limite clássico. Discutimos as dificuldades de se usar a teoria de Landau-Zener para se modelar sistemas com muitos níveis interagindo. A análise de um sistema realístico caótico mostra que a estrutura do espectro em geral não apresenta “avoided crossings” isolados. Outro ponto é a impossibilidade de obter uma boa parametrização dos “avoided crossings”. Eles não podem ser consideradas hipérbolas exatas. Estes dois fatos mostram que a fórmula de Zener leva a resultados errôneos quando aplicada a sistemas caóticos.

Além disto, a escala de tempo onde estão acontecendo as transições entre dois “avoided crossings” para um processo adiabático não necessariamente é muito maior que o tempo de tunelamento Zener  $\tau_Z$ . Pode-se, portanto, esperar que a dependência da razão de transição com a potência  $3/2$  da velocidade para o caso GOE obtida por Wilkinson, seja incorreta para o caso de um sistema realístico como o estudado.

Esta investigação sugere que é necessário desenvolver uma teoria estatística mais sofisticada que a de Wilkinson para tratarmos o problema. A mesma deve incluir termos de interferência. Do ponto de vista numérico é necessário fazermos estudos mais quantitativos analisando a evolução da matriz densidade.

# Abstract

This study is dedicated to the mechanism of violation of the adiabatic approximation for systems whose fast degrees of freedom exhibit chaotic dynamics in the classic limit. We discuss the difficulties of using the theory of Landau-Zener to model systems with many levels interacting. The analysis of a chaotic real system shows that the structure of the spectrum in general does not present isolated “avoided crossings”. Another point is the impossibility of obtaining a good parameterization of the “avoided crossings”. They can not be considered exact hyperbolas. These two facts show that the formula of Zener leads to wrong results when it is applied to chaotic systems.

Besides this, the scale of time where are happening the transitions between two “avoided crossings” for an adiabatic process not necessarily is much bigger than the tunneling time Zener  $\tau_Z$ . Therefore, it is expected that the dependence of the reason of transition with the power  $3/2$  of the speed for the case GOE obtained by Wilkinson, is incorrect for the case of a real system as the studied one.

This research suggests that it is necessary to develop a statistical theory more sophisticated than that of Wilkinson to deal with the problem. It must include terms of interference. From the numerical point of view it is necessary to carry out more quantitative studies analyzing the evolution of the density matrix.

# Índice

Dedicatória . . . . .	i
Agradecimentos . . . . .	ii
Resumo . . . . .	iii
Abstract . . . . .	iv
Índice . . . . .	v
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.0.1 Dissipação em um sistema de dois níveis . . . . .	1
<b>2 Modelo Dinâmico: o oscilador quártico acoplado</b>	<b>14</b>
2.1 Comportamento clássico . . . . .	15
2.1.1 Sumário teórico . . . . .	15
2.1.2 Análise da dinâmica clássica do oscilador quártico acoplado . . . . .	18
2.2 Comportamento quântico . . . . .	21
2.2.1 Resumo sobre a Teoria de Matrizes Aleatórias . . . . .	21
2.2.2 Considerações sobre a densidade média de níveis . . . . .	29
2.2.3 Análise das flutuações espectrais do oscilador quártico acoplado . . . . .	30
<b>3 Em busca de uma generalização para a teoria de Landau-Zener</b>	<b>37</b>
3.1 Introdução . . . . .	37

3.2	Revisão da teoria de Wilkinson . . . . .	38
3.3	Simulações Quânticas através da RMT . . . . .	42
3.4	Resultados para o oscilador quártico-OQA . . . . .	53
3.5	Crítica à teoria de Wilkinson . . . . .	67
3.6	Conclusões . . . . .	68
	Bibliografia . . . . .	69

# Capítulo 1

## Introdução

Em um sistema quântico é comum separar-se modos de movimento lentos dos rápidos e utilizar a aproximação adiabática de Born-Oppenheimer. Esta tese analisa situações onde esta aproximação não é adequada.

### 1.0.1 Dissipação em um sistema de dois níveis

O sistema quântico que ilustra com maior simplicidade o que se entende por dissipação quântica, preservando suas características essenciais, é o sistema estudado independentemente por Landau [1] e Zener [2]. Considerando um sistema de dois níveis, os últimos analisaram o processo dinâmico da probabilidade de transição do nível de energia mais baixa para o nível de energia mais alta como função de um parâmetro externo, como por exemplo o tempo.

O hamiltoniano do sistema pode ser representado pela matrix  $2 \times 2$  abaixo

$$\begin{cases} H\phi_1 = \epsilon_1\phi_1 + \epsilon_{12}\phi_2 \\ H\phi_2 = \epsilon_{12}\phi_1 + \epsilon_2\phi_2 \end{cases}, \quad (1.1)$$

onde  $\{|\phi_1\rangle, |\phi_2\rangle\}$  é uma base qualquer, tal base é chamada usualmente de diabática. Por

conveniência escolhemos tratar do problema  $H \equiv H(t)$ , onde a dependência temporal está apenas nos elementos da diagonal.

A solução da equação do Schrödinger,  $i\hbar(\partial/\partial t)|\Psi\rangle = H|\Psi\rangle$ , na base diabática pode ser obtida resolvendo o conjunto de equações:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{j=1}^2 c_j(t) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t \epsilon_j(t') dt'\right\} |\phi_j\rangle, \quad (1.2)$$

onde  $t_0$  é um instante arbitrário em que são conhecidas as condições iniciais do sistema e os coeficientes  $c_i(t)$  obedecem à condição padrão de normalização  $\sum_{j=1}^2 |c_j(t)|^2 = 1$ .

A probabilidade de encontrarmos o sistema no estado  $|\phi_1\rangle$  ou  $|\phi_2\rangle$  é então dada por:

$$P'_j(t) = |c_j(t)|^2, \quad j = 1, 2. \quad (1.3)$$

Por outro lado, também é possível expressar a solução da equação de Schrödinger para o sistema de dois níveis como uma combinação linear dos autovetores  $\{|\psi_1(t)\rangle, |\psi_2(t)\rangle\}$ , soluções instantâneas do hamiltoniano  $H$ , ou seja,

$$H(t)|\psi_j(t)\rangle = E_j(t)|\psi_j(t)\rangle, \quad (1.4)$$

onde  $E_j(t)$  são as autoenergias. Chamamos esta base formada pelos autovetores instantâneos de adiabática.

Segue que o estado do sistema ( $|\Psi(t)\rangle$ ) expresso na base adiabática é:

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{j=1}^2 a_j(t) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t E_j(t') dt'\right\} |\psi_j(t)\rangle \quad (1.5)$$

aqui, a condição de normalização é  $\sum_{j=1}^2 |a_j(t)|^2 = 1$ .

O sistema num instante  $t$  tem uma certa probabilidade,  $P_j(t)$ , de se encontrar em um dos autoestados instantâneos  $\{|\psi_1(t)\rangle, |\psi_2(t)\rangle\}$ , dependendo das condições iniciais do



problema. Assim, de (1.5) temos que

$$P_j(t) = |a_j(t)|^2. \quad (1.6)$$

Para obtermos a probabilidade de transição entre níveis precisamos de um método para calcular  $P(t)$ .

Sem perda de generalidade para a nossa análise podemos escolher uma forma simples para o Hamiltoniano  $H(t)$ :

$$H(t) = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & \epsilon_{12} \\ \epsilon_{12} & \epsilon_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -ct & V \\ V & ct \end{pmatrix} \quad (1.7)$$

onde  $c$  e  $V$  são escolhidos como positivos. O parâmetro  $c$  é interpretado como a velocidade com que se altera intrinsecamente o sistema e  $V$  é a distância mais próxima entre as duas auto-energias, como ilustrado na Fig.1.1. Para o sistema (1.7) estas autoenergias em um dado instante  $t$  são

$$E_{1,2} = \pm V \sqrt{\left(\frac{ct}{V}\right)^2 + 1}, \quad (1.8)$$

com os respectivos autovetores

$$\begin{aligned} |\psi_1(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{1+(\sqrt{\eta^2+1}+\eta)^2}} \left\{ |\phi_1\rangle + \left(\sqrt{\eta^2+1}+\eta\right) |\phi_2\rangle \right\} \\ |\psi_2(t)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{1+(\sqrt{\eta^2+1}-\eta)^2}} \left\{ |\phi_1\rangle + \left(-\sqrt{\eta^2+1}+\eta\right) |\phi_2\rangle \right\}, \end{aligned} \quad (1.9)$$

onde  $\eta = ct/V$ .

O espectro como função de  $t$  apresenta um “avoided crossing”ilustrado na Figura 1.1. Note que as autoenergias tendem assintoticamente para as retas  $ct$  e  $-ct$ , quando  $|t| \rightarrow \infty$ , o que é fácil de obter da Eq.(1.8). Da Eq.(1.9), para  $|t| \rightarrow \infty$ , obtemos as

relações assintóticas entre a base adiabática e a base diabática:

$$\begin{aligned}
 |\phi_2\rangle &= |\psi_2(t \rightarrow -\infty)\rangle \\
 |\phi_2\rangle &= |\psi_1(t \rightarrow +\infty)\rangle \\
 |\phi_1\rangle &= |\psi_1(t \rightarrow -\infty)\rangle \\
 |\phi_1\rangle &= |\psi_2(t \rightarrow +\infty)\rangle .
 \end{aligned}
 \tag{1.10}$$

Tomando como estado inicial do sistema:  $|\Psi(t \rightarrow -\infty)\rangle = |\psi_2(t \rightarrow -\infty)\rangle$  da Eq.(1.10) concluimos que condições iniciais (na base adiabática):

$$\begin{aligned}
 |a_1(t \rightarrow -\infty)| &= 0 \\
 |a_2(t \rightarrow -\infty)| &= 1
 \end{aligned}
 \tag{1.11}$$

são equivalentes às condições iniciais (na base diabática):

$$\begin{aligned}
 |c_1(t \rightarrow -\infty)| &= 0 \\
 |c_2(t \rightarrow -\infty)| &= 1 .
 \end{aligned}
 \tag{1.12}$$

Da Fig.1.1 e da Eq.(1.10) podemos afirmar que a probabilidade de transição do estado inicial de energia mais baixa para o estado final de energia mais alta é dado na base adiabática por:

$$P(t) = |\langle \psi_1(t) | \Psi \rangle|^2 = |a_1(t)|^2 .
 \tag{1.13}$$

Já no caso do estado  $|\Psi(t)\rangle$  ser expresso na base diabática, a probabilidade de transição  $P(t)$  do nível de energia mais baixo para o mais alto é dada por:

$$P(t) = |\langle \phi_2(t) | \Psi \rangle|^2 = |c_2(t)|^2 = 1 - |c_1(t)|^2 .
 \tag{1.14}$$

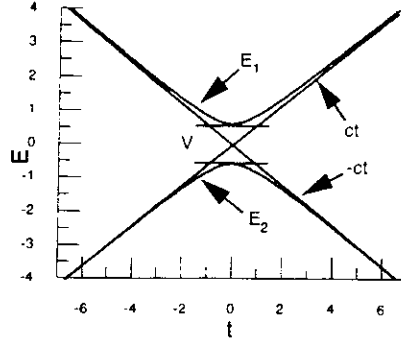


Fig.1.1

É possível obter resultados analíticos para a probabilidade de transição  $P(t)$ . Veremos ainda que se tomarmos o limite de  $t \rightarrow \infty$  [1, 2],  $P(t)$  toma uma forma bastante simples. Para demonstrarmos esta afirmação usaremos a base diabática. Substituindo a Eq.(1.2) na equação de Schrödinger, chegamos ao sistema de equações:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}c_1(t) &= \frac{i}{\hbar}\epsilon_{12} \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int dt' (\epsilon_1 - \epsilon_2)\right\} c_2 \\ \frac{d}{dt}c_2(t) &= \frac{i}{\hbar}\epsilon_{12} \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \int dt' (\epsilon_1 - \epsilon_2)\right\} c_1, \end{aligned} \quad (1.15)$$

onde as condições iniciais são dadas pela Eq. (1.12).

O sistema de equações (1.15) pode ser reduzido a uma equação diferencial de segunda ordem, a qual só depende de  $c_1$ :

$$\frac{d^2}{dt^2}c_1 + \left\{ \frac{i}{\hbar}(\epsilon_1 - \epsilon_2) - \frac{\epsilon_{12}}{\epsilon_{12}} \right\} \frac{d}{dt}c_1 + \left( \frac{\epsilon_{12}}{\hbar} \right)^2 c_1 = 0, \quad (1.16)$$

com condições iniciais

$$c_1(t \rightarrow -\infty) = 0 \quad (1.17)$$

$$\frac{d}{dt}c_1(t \rightarrow -\infty) = \frac{i}{\hbar}\epsilon_{12} \lim_{t \rightarrow -\infty} \left\{ \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' (\epsilon_1 - \epsilon_2)\right] \right\}. \quad (1.18)$$

Fazendo as mudanças de variáveis:

$$f = \epsilon_{12}/\hbar, \quad c_1 = e^{\frac{-\pi i}{\hbar} \int (\epsilon_1 - \epsilon_2) dt} U_1 \quad \text{e} \quad t\alpha = (\epsilon_1 - \epsilon_2)/\hbar$$

[com a escolha de  $\alpha < 0$  para garantir a consistência com o Hamiltoniano da Eq. (1.7)], encontramos a seguinte equação diferencial ordinária de segunda ordem

$$\frac{d^2}{dt^2}U_1 + \left(f^2 - \frac{i\alpha}{2} + \frac{\alpha^2}{4}t^2\right)U_1 = 0, \quad (1.19)$$

conhecida como equação de Weber [3]. Para escrevê-la sua forma padrão introduzimos a variável complexa  $z = \alpha^{\frac{1}{2}}e^{-i\pi/4}t$  e ainda  $\nu = if^2/\alpha$ , obtendo

$$\frac{d^2}{dz^2}U_1 + \left(\nu + \frac{1}{2} - \frac{z^2}{4}\right)U_1 = 0. \quad (1.20)$$

Uma solução particular da Eq. (1.20) é a função de Weber,  $D_{-\nu-1}(iz)$ . (ver [3, 4]), cujo limite assintótico na direção  $-\frac{3}{4}\pi$  é :

$$\lim_{R \rightarrow \infty} D_{-\nu-1}(iRe^{-\frac{3}{4}\pi i}) \approx e^{\frac{\pi}{4}(\nu+1)i} e^{iR^2/4} R^{-\nu-1}, \quad (1.21)$$

onde  $R = \alpha^{\frac{1}{2}}t$ , e na qual  $D_{-\nu-1}(R \rightarrow \infty)$  satisfaz a condição inicial da Eq.(1.17), portanto a solução  $U_1(z)$  será proporcional à função de Weber:

$$U_1(z) = AD_{-\nu-1}(iz), \quad \alpha < 0. \quad (1.22)$$

Desta relação obtemos o limite assintótico para  $c_1$  quando  $R \rightarrow \infty$  :

$$c_1(R \rightarrow \infty) = Ae^{\frac{\pi}{4}(\nu+1)i} e^{iR^2/2} R^{-\nu-1}, \quad (1.23)$$

utilizando este resultado na condição inicial Eq.(1.18), achamos o valor da constante  $A$ :

$$|A| = \gamma^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{1}{4}\pi\gamma}, \quad (1.24)$$

onde  $\gamma = f^2/|\alpha|$ .

De forma análoga, obtemos a solução para  $t \rightarrow \infty$  lembrando que  $z = \alpha^{\frac{1}{2}}e^{-i\pi/4}t$  e parametrizado-o como  $z = Re^{i\pi/4}$ ,  $t \rightarrow \infty$  equivale a  $R \rightarrow \infty$ . Tal limite nos fornece:

$$\begin{aligned} \lim_{R \rightarrow \infty} D_{-\nu-1}(iRe^{\frac{1}{4}\pi i}) &= e^{\frac{3}{4}(\nu+1)i} e^{iR^2/4} R^{-\nu-1} + \frac{\sqrt{2}}{\Gamma(\nu+1)} e^{\frac{1}{4}\pi i} e^{iR^2/4} R^\nu \\ &\approx \frac{\sqrt{2}}{\Gamma(\nu+1)} e^{\frac{1}{4}\pi\nu i} e^{iR^2/4} R^\nu, \end{aligned} \quad (1.25)$$

e o valor de  $c_1(t \rightarrow \infty)$  e  $c_1^*(t \rightarrow \infty)$ :

$$\begin{aligned} c_1(t \rightarrow \infty) &= \frac{\sqrt{2}\gamma^{\frac{1}{2}}e^{-\pi\gamma/2}}{\Gamma(\nu+1)}e^{-iR^2/4}R^\nu \\ c_1^*(t \rightarrow \infty) &= \frac{\sqrt{2}\gamma^{\frac{1}{2}}e^{-\pi\gamma/2}}{\Gamma(\nu^*+1)}e^{iR^2/4}R^{\nu^*}, \end{aligned} \quad (1.26)$$

como  $\nu = i\gamma$  e utilizando a identidade  $\Gamma(i\gamma+1)\Gamma(-i\gamma+1) = \pi/\sinh(\pi\gamma)$  encontramos:

$$|c_1(t \rightarrow \infty)|^2 = 2e^{-\pi\gamma} \sinh(\pi\gamma) = 1 - e^{-2\pi\gamma}. \quad (1.27)$$

Comparando este último resultado com a Eq.(1.14) encontramos a probabilidade de transição  $P(t \rightarrow \infty)$ :

$$P(t \rightarrow \infty) = e^{-2\pi\gamma}, \quad (1.28)$$

onde  $\gamma$  é dada pela seguinte relação :

$$\gamma = \frac{\frac{\epsilon_{12}^2}{\hbar}}{\frac{d}{dt}(\epsilon_1 - \epsilon_2)}. \quad (1.29)$$

O processo de transição do sistema é governado pelo expoente  $\gamma$ . Para uma melhor análise do resultado, identificamos o expoente  $\gamma$  com os parâmetros  $c$  e  $V$  através da seguinte relação:

$$\gamma = \frac{V^2}{\hbar c}. \quad (1.30)$$

Podemos observar que a probabilidade de transição depende da velocidade paramétrica do sistema e da menor distância entre os níveis de energia,  $2V$ . Dependendo da escolha dos parâmetros  $c$  e  $V$  a transição será favorecida ou não. Os casos limites são:

$$\frac{\pi V^2}{\hbar c} \ll 1 \Rightarrow P \rightarrow 1 \quad (\text{processo não adiabático}) \quad (1.31)$$

$$\frac{\pi V^2}{\hbar c} \gg 1 \Rightarrow P \rightarrow 0 \quad (\text{processo adiabático}). \quad (1.32)$$

Uma conclusão que se tira do resultado acima é a diferença na definição de um processo adiabático entre um sistema quântico e um clássico. Classicamente o processo adiabático

depende unicamente da velocidade com a qual o sistema se move. No regime quântico além da velocidade, o espaçamento de níveis é relevante para garantir o limite adiabático.

Para obtermos uma solução numérica deste problema é conveniente usarmos a base adiabática definida na Eq.(1.5) para resolvermos a equação de Schrödinger. Deste procedimento obtemos o sistema de equações diferenciais:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}a_1 &= \frac{-c}{2V(\eta^2+1)} \exp\left(\frac{2iV}{\hbar} \int \sqrt{\eta^2+1} dt\right) a_2 \\ \frac{d}{dt}a_2 &= \frac{c}{2V(\eta^2+1)} \exp\left(\frac{-2iV}{\hbar} \int \sqrt{\eta^2+1} dt\right) a_1, \end{aligned} \quad (1.33)$$

onde  $\eta = ct/V$ . Como o sistema se encontra inicialmente no estado  $|\psi_2(t \rightarrow -\infty)\rangle$ , a solução da Eq.(1.33) dará a evolução temporal da probabilidade de transição  $P(t) = |a_1(t)|^2$ . Obtivemos a solução numérica do sistema (1.33) utilizando o método de Runge-Kutta de quarta ordem com passo ajustável [5]. Ilustramos os resultados apresentando para valores de  $c = 1.5$  e  $V = 0.6$ , a função  $P(t)$ , é ilustrada na Fig.1.2.

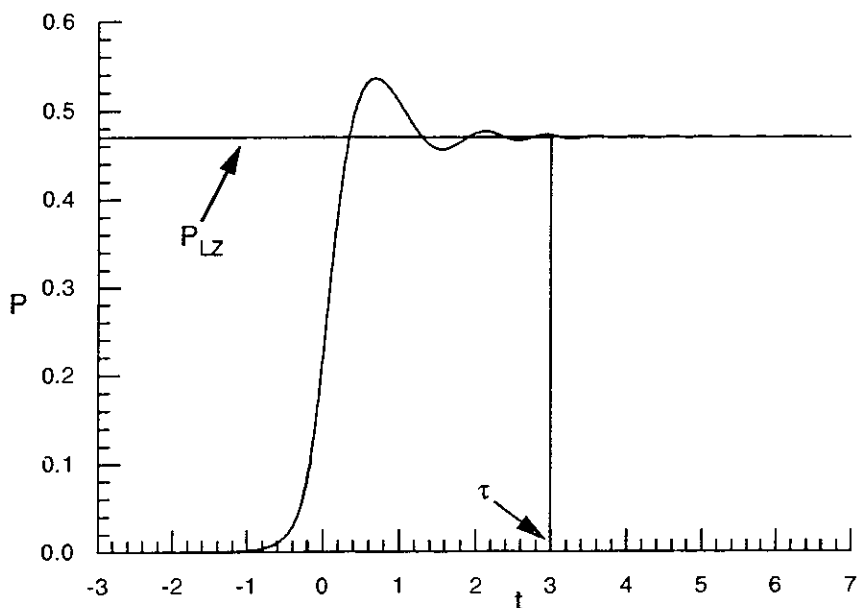


Fig.1.2

Pode-se notar que a probabilidade de transição para grandes valores do tempo coincide com a encontrada analiticamente pela fórmula da Eq.(1.28). O tempo a partir do qual tem validade a Eq.(1.28) chamaremos de tempo característico,  $\tau$ . Portanto a condição de aplicabilidade da Eq.(1.28) pode ser descrita pela relação:

$$t \gg \tau, \quad (1.34)$$

de modo que  $\tau$  define o limite entre tempos longos e curtos. Baseando-nos no artigo [6], o tempo característico  $\tau$ , serve como valor de escala das transições do sistema. Chamaremos esta escala de tempo de tempo de tunelamento de Zener  $\tau_Z$ . Ela depende explicitamente da velocidade com a qual o sistema se move. Um processo adiabático foi definido anteriormente pela condição

$$\frac{\hbar c}{V^2} \ll 1, \quad (1.35)$$

a qual é escalada segundo o tempo de Zener  $\tau_Z$ :

$$\tau_Z = \frac{V}{c} \quad (1.36)$$

Para o caso não adiabático com a condição:

$$\frac{\hbar c}{V^2} \gg 1, \quad (1.37)$$

é escalada

$$\tau_z = \sqrt{\frac{\hbar}{V}} \quad (1.38)$$

Com isto podemos reescrever as probabilidades de transição para sistemas adiabáticos e não adiabáticos. A seguir damos alguns exemplos para o caso não adiabático, obedecendo a relação da Eq.(1.37):

1.  $c = 100, V = 1$ , o resultado com o tempo escalado segundo a Eq.(1.38) é apresentado na Fig.1.3:

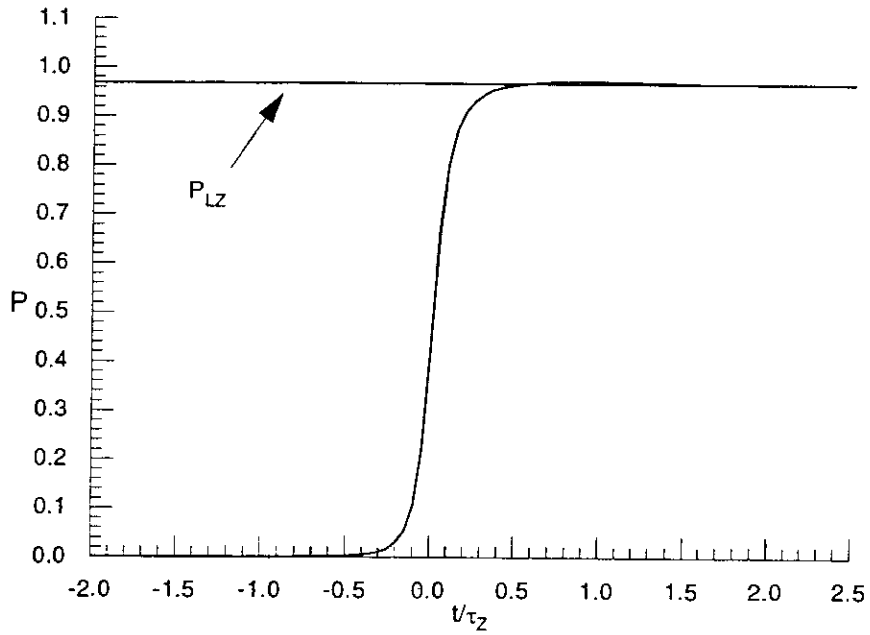


Fig.1.3

2.  $c = 50, V = 1$ , Fig.1.4:

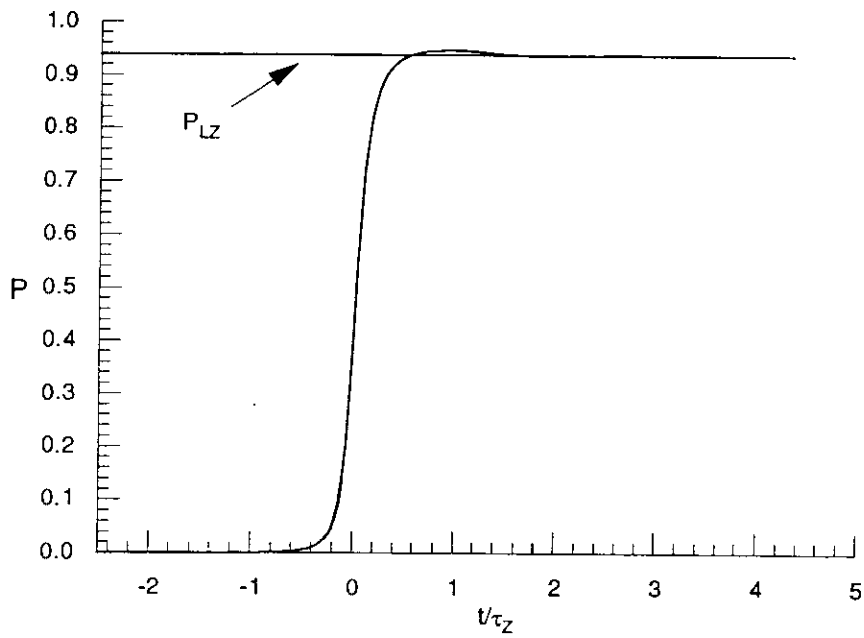


Fig.1.4



3.  $c = 1.0, V = 0.5$ , Fig.1.5:

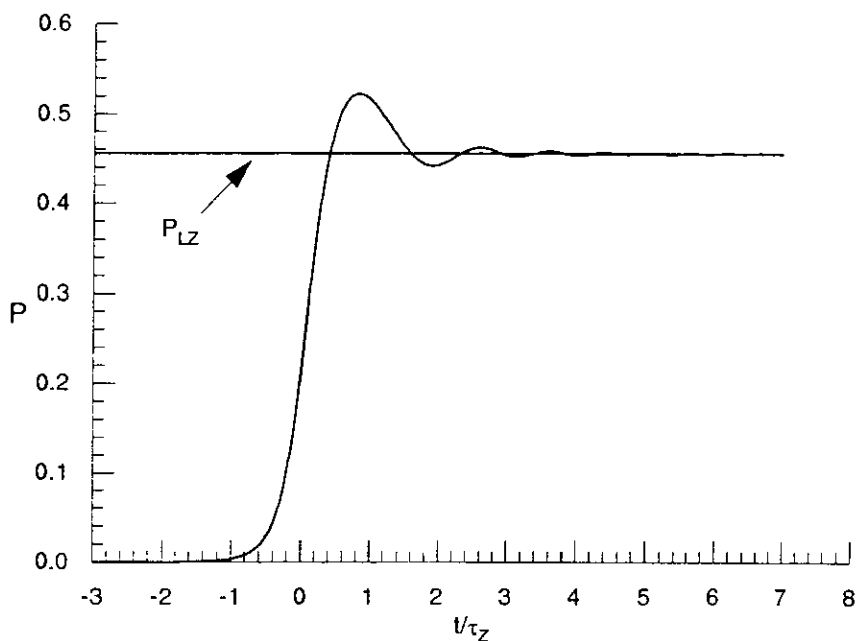


Fig.1.5

As Figuras 1.3 e 1.4 apresentam uma transição quase total, (devido à combinação dos parâmetros  $V$  e  $c$ , estes sistemas são extremamente não adiabáticos. O tempo não precisa ser muito maior que  $\tau_Z$ , para que o sistema atinja que a probabilidade de transição alcance o valor assintótico dado pela fórmula de Landau-Zener. No primeiro caso é suficiente que o tempo seja aproximadamente igual a  $\tau_Z$ , enquanto que é aproximadamente  $2\tau_Z$  para o segundo. Para o terceiro caso, a transição é apenas parcial, sendo o valor assintótico alcançado para valores do tempo maiores que  $4\tau_Z$ .

Para um processo adiabático o sistema expresso na base adiabática quase não muda de estado. Neste caso é mais instrutivo mostrar a solução para a probabilidade de transição na base diabática. Isto implica em resolver o sistemas de equações Eq.(1.15) na dita base. Na base diabática um processo adiabático o sistema exhibe a transição como ilustrado na Fig.1.6, para  $c = 5.0, V = 10.0$ , escalado por Eq.(1.36).

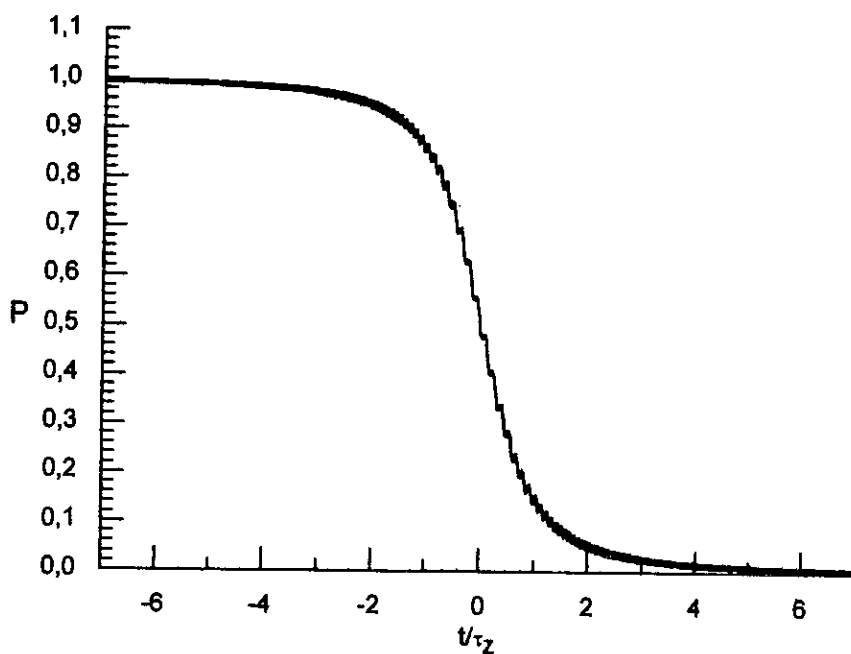


Fig.1.6

Para um sistema realístico como o da Fig. 1.7, apresentando muitos “avoided crossings”, aplicar o resultado de Landau-Zener, Eq.(1.28), para cada um deles isoladamente pode ser temerário. O motivo é que dependendo da magnitude da tempo de Zener,  $\tau_Z$ , em relação ao tempo típico que o sistema leva para ir de um “avoided crossings” para outro, pode haver interferência entre amplitudes de transição de níveis. Voltaremos a este assunto no capítulo 3.

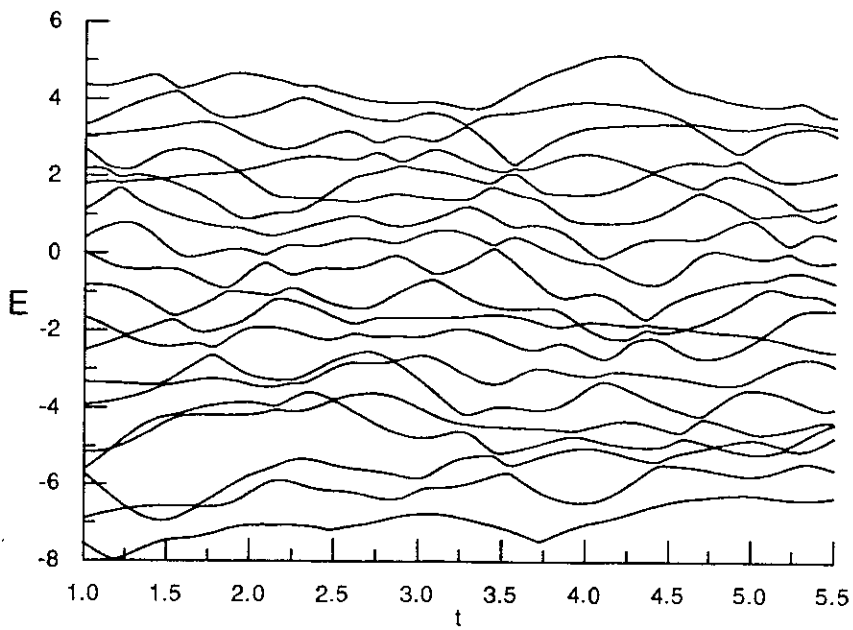


Fig.1.7

# Capítulo 2

## Modelo Dinâmico: o oscilador quártico acoplado

O modelo estudado neste trabalho é o oscilador quártico bidimensional com acoplamento  $x^2y^2$

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \alpha x^2 y^2 + \beta(x^4 + y^4). \quad (2.1)$$

A escolha deste sistema é devida a sua simplicidade e a riqueza de sua dinâmica clássica. Vários estudos anteriores [8, 7, 12] estabeleceram os melhores métodos numéricos para se obter o espectro quântico, bem como analisaram a dinâmica clássica como função do parâmetro de acoplamento do sistema. Como este estudo trata apenas da evolução temporal de sistemas cujo limite clássico é caótico, necessitamos estabelecer uma janela de parâmetros  $(\alpha, \beta)$  onde o sistema seja caótico. Na secção 2.1.2 discutimos como isto foi feito. Conhecendo-se esta janela paramétrica, procedemos a análise espectral para confirmar a conjectura de Bohigas [16] neste sistema. Isto será discutido na secção 2.2.3. Esta análise basicamente encerra o trabalho preparatório para analisarmos a evolução temporal - assunto a ser tratado no Capítulo 3.

## 2.1 Comportamento clássico

O estudo clássico do hamiltoniano dado pela Eq. (2.1) foi feito analisando trajetórias obtidas integrando numericamente as equações de movimento abaixo:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}x &= \frac{p_x}{m} \\ \frac{d}{dt}y &= \frac{p_y}{m} \\ \frac{d}{dt}p_x &= -2\alpha xy^2 - 4\beta x^3 \\ \frac{d}{dt}p_y &= -2\alpha x^2 y - 4\beta y^3 .\end{aligned}\tag{2.2}$$

Por conveniência fixamos  $m = 1$ .

Os resultados deste sistema de equações diferenciais, que são apresentados a seguir foram obtidos através do método de Runge-Kutta de 4ª-ordem com passo adaptável automaticamente em precisão dupla. Desenvolvemos nosso código de computador de modo a usar a subrotina RKQS dada em *Numerical Recipes* [5], ou ainda o DVERK do pacote *IMSL*, tal método nos permite manter a imprecisão da integração tão pequena quanto quisermos- sob o preço de aumentar o tempo de processamento. Devido ao caráter caótico do sistema, pequenos erros de arredondamento na solução numérica podem ter efeito muito grande à medida em que propagamos uma trajetória, razão pela qual a subrotina que utilizamos é a mais adequada para estes casos.

Essencialmente consideramos uma trajetória como sendo precisa enquanto esta mantiver sua energia em uma faixa de erro em torno de  $10^{-6}$  da energia com que foi iniciada. Trata-se de um critério arbitrário, mas bastante eficiente numericamente.

### 2.1.1 Sumário teórico

Dois dos critérios mais simples para determinar se um sistema dinâmico é caótico ou não são o cálculo dos seus expoentes de Lyapunov e a análise de suas seções de Poincaré.

Qualitativamente os expoentes de Lyapunov medem a sensibilidade associada à evolução temporal de um sistema mediante variações das condições iniciais. Definindo  $\Delta X(t)$  como a distância entre dois pontos  $X_1(t)$  e  $X_2(t)$  no espaço de fases como função de  $t$ , a relação que nos permite calcular o maior expoente de Lyapunov  $\lambda$  de um fluxo hamiltoniano é dada por:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \frac{\Delta X(t)}{\Delta X(0)} = e^{\lambda t}, \quad (2.3)$$

onde  $\Delta X(t)$  é a distância entre pontos  $X_1(t)$  e  $X_2(t)$  para um instante  $t$  e  $\Delta X(0)$  para um tempo arbitrário  $t = 0$ . As regiões do espaço de fases correspondentes a  $\lambda > 0$ , são ditas caóticas. Nessas regiões duas órbitas se afastam exponencialmente com o tempo.

Outro critério que permite observar o comportamento caótico clássico do sistema é a observação da evolução temporal de uma órbita no espaço de fases. Para isto introduziremos o conceito de seção de Poincaré. Porém é conveniente antes se definir o mapa como o sistema dinâmico que evolui com o tempo discretamente. Um sistema dinâmico contínuo não linear (como o da Eq.(2.2) tem um fluxo  $\varphi_t$  associado, o qual dá origem a um mapa da forma:

$$\vec{X}_{i+1} = \vec{F}_\lambda(\vec{X}_i) \quad (2.4)$$

onde  $\vec{X}$  é um vetor  $n$ -dimensional,  $\vec{F}_\lambda$  uma função não linear com  $\lambda$  como parâmetro de controle, e  $i$  representa os passos temporais fixos e discretos ou passagens sucessivas por uma superfície de seção do fluxo. A Eq.(2.4) é uma equação de diferenças, cuja solução é uma seqüência de pontos, que determinam a órbita do mapa. O sistema dinâmico descrito pela Eq.(2.2) descreve um fluxo no espaço de fases, ela pode ser expressa na sua forma vetorial.

$$\dot{\vec{X}} = \vec{F}(\vec{X}), \quad (2.5)$$

onde  $\vec{X}$  é um ponto no espaço de fases e  $\vec{F}$  uma função vetorial desse ponto, portanto

a ela estará associada um fluxo assim como um mapa, a Eq.(2.5) representará um sistema dinâmico autônomo  $n$ -dimensional para  $\vec{X} = (X_1, X_2, \dots, X_n)$ .

Uma das maneiras pelas quais um fluxo contínuo dá origem a um mapa discreto é pela utilização da seção de Poincaré. A seção de Poincaré é uma maneira de reduzir o estudo de um fluxo num espaço de fase com  $n$  dimensões a uma aplicação chamada mapa de Poincaré ou mapa de retorno num espaço de fases com  $(n - 1)$  dimensões.

Seja  $\vec{X}_0$  uma órbita periódica, como período  $T$ , associada ao fluxo  $\varphi$  gerado pela Eq.(2.5), e tomamos uma hipersuperfície  $\Omega \subset \mathbb{R}^n$  de dimensão  $(n - 1)$  tal que o fluxo seja perpendicular a ela. Seja  $\vec{X}_0^*$  o ponto onde a órbita  $\vec{X}_0$  intercepta  $\Omega$  (ver Fig.(2.1)) e  $U \subseteq \Omega$  uma vizinhança de  $\vec{X}_0^*$ . Com isto o mapa de Poincaré  $P : U \rightarrow \Omega$  será definido para um ponto  $\vec{X}'_1 \in U$  por:

$$\vec{P}(\vec{X}'_1) = \varphi(X'_1, \tau), \tag{2.6}$$

onde  $\tau$  é o tempo de retorno pela primeira vez, da órbita  $\varphi(X'_1, \tau)$  a  $\Omega$ , partindo de  $\vec{X}'_1$ .

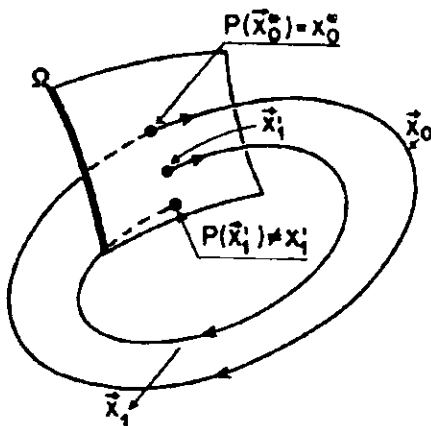


Fig. 2.1

A hipersuperfície  $\Omega$  é chamada de seção de Poincaré. Pode-se observar que a órbita

periódica  $X_0$  corresponde um ponto fixo na seção de Poincaré e  $\varphi(X'_1)$  é uma órbita não periódica que corta a seção de Poincaré  $\Omega$  em  $P(X'_1) \neq X'_1$ . Na Fig.(2.2) mostramos a seção de Poincaré unidimensional (a) e bidimensional (b).

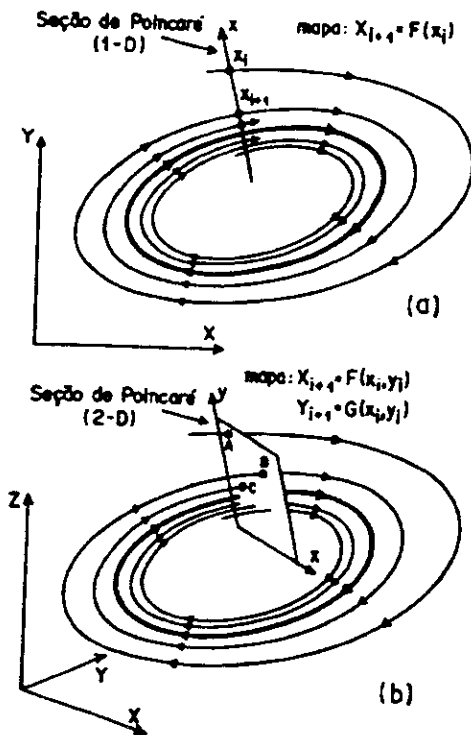


Fig. 2.2

Os pontos na seção de Poincaré descrevem órbitas que caracterizaram o comportamento clássico do sistema para determinadas condições iniciais. Isto será observado quando calculamos a seção de Poincaré para o oscilador quártico acoplado.

### 2.1.2 Análise da dinâmica clássica do oscilador quártico acoplado

A idéia central da seção anterior é que ante a impossibilidade de fazer uma análise da trajetória do sistema no espaço de fases, para o caso quando a dimensão é maior que três,



o estudo da seção de Poincaré, dará uma boa informação de seu comportamento.

As equações de movimento do sistema dinâmico Eq.(2.2) pode ser resolvidas numericamente, para muitas condições iniciais. Encontramos assim várias trajetórias do sistema. Para reduzir a dimensão do espaço de fases, utilizamos o fato do que a energia  $E$  é constante, portanto da Eq.(2.1) podemos obter  $p_x$ :

$$p_x = \sqrt{2m(E - \frac{p_y^2}{2m} - \alpha x^2 y^2 - \beta(x^4 + y^4))} \quad (2.7)$$

interceptando com o plano  $x = 0$ , obtemos a seção de Poincaré para o oscilador quártico acoplado em duas dimensões, no plano  $y - P_y$ .

O comportamento das trajetórias na seção de Poincaré depende dos valores que tomam os parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$ . Observaremos este comportamento para diferentes valores dos parâmetros.

Para  $\alpha = 10^{-5}$  e  $\beta = 0.9$ , ou seja quando se tem acoplamento fraco, obtemos a seção de Poincaré mostrada na Fig.2.3

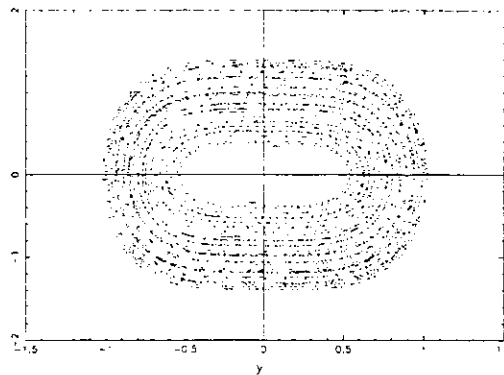


Fig. 2.3

Do gráfico podemos observar toros invariantes próprios de um sistema integravel, reflexo do acoplamento muito fraco, uma pequena mudança nas condições iniciais termina em outra trajetoria não muito diferente da anterior.

Agora se aumentamos o valor do parâmetro do acoplamento  $\alpha$ , isto é,  $\alpha = 0.9$  e  $\beta = 0.9$ , é de se esperar que o sistema não seja totalmente integrável. A seção de Poincaré para este caso é dada pela Fig.2.4.

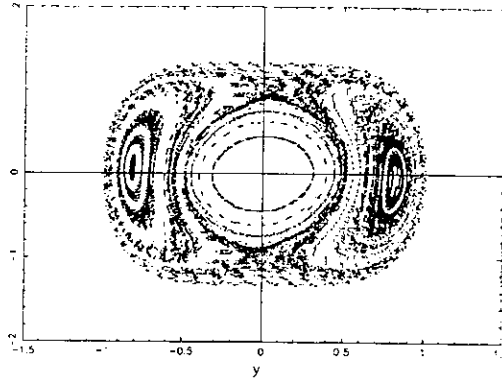


Fig. 2.4

Nela aparecem regiões integráveis, determinadas por órbitas periódicas estáveis fechadas. Porém há também regiões onde aparecem órbitas instáveis, criando-se na vizinhança delas os primeiros indícios de comportamento caótico do sistema. Órbitas caóticas preenchem ergodicamente essas regiões. Um aumento relativo do parâmetro de acoplamento ( $\alpha$ ) com respeito ao  $\beta$ , aumentará o tamanho da região caótica, assim para  $\alpha = 0.9$  e  $\beta = 0.5$  a seção de Poincaré é:

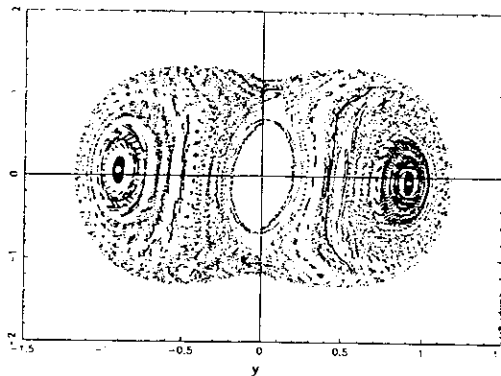


Fig. 2.5

Neste caso uma maior quantidade de órbitas instáveis se tornam órbitas caóticas, aumentando dita região, a estes chamaremos sistemas mistos, por apresentar tanto regiões integráveis como não integráveis(caóticas).

O sistema será totalmente caótico quando o acoplamento  $\alpha$  for muito maior que  $\beta$ , como ilustrado pela Fig.2.6 para o caso  $\alpha = 0.8$  e  $\beta = 0.0025$ .

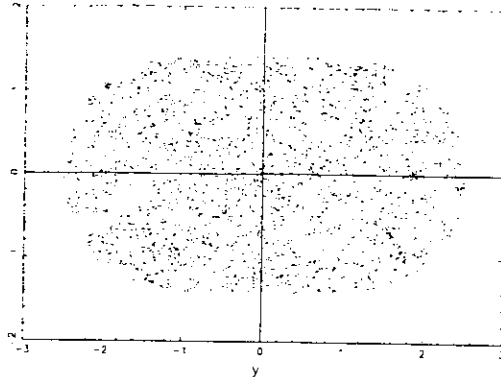


Fig. 2.6

Nela não vemos nenhuma órbita estável, tanto quanto o método numérico nos permite afirmar. Uma trajetória arbitrária é ergódica e preenche totalmente a seção de Poincaré com pontos distribuídos aleatoriamente, como se pode observar na Fig.(2.6).

Como estamos interessados em investigar fenômenos relacionados à dinâmica caótica, trabalharemos com parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$  adequados. Após uma cuidadosa investigação de superfícies de Poincaré, concluímos que a dinâmica clássica é preponderantemente caótica na região paramétrica determinada por  $0.8 \leq \alpha$  e fixando o valor de  $\beta = 0.0025$ .

## 2.2 Comportamento quântico

### 2.2.1 Resumo sobre a Teoria de Matrizes Aleatórias

As manifestações quânticas de caos clássico podem ser detectadas nas flutuações espectrais dos sistemas em consideração. Em outras palavras, um sistema classicamente caótico quando quantizado apresenta, em geral, estatística de níveis compatível com os obtidos através da Teoria de Matrizes Aleatórias, daqui para frente abreviada por RMT (do inglês Random Matrix Theory) Esta afirmação atualmente ainda é uma conjectura (proposta

originalmente por Bohigas e colaboradores [16]). Embora hajam numerosos estudos computacionais que dão suporte a esta conjectura, uma demonstração analítica ainda não é conhecida. No que segue apresentaremos alguns elementos básicos da teoria das matrizes aleatórias.

Já em 1951 Wigner propôs que o espectro de sistemas “complexos” na região de alta densidade de níveis (por exemplo, o núcleo atômico na energia limiar de ressonâncias de neutrons) teria as mesmas propriedades estatísticas que um conjunto de matrizes com elementos gaussianamente distribuídos. Em geral, dependendo do tipo de hamiltoniana a ser tratada, pode-se classificar o sistema em três distintos conjuntos de matrizes. Hamiltonianos que apresentam reversão temporal e são invariantes por rotação são representados por matrizes reais e simétricas, as quais podem ser modeladas estatisticamente pelo conjunto ortogonal gaussiano (usualmente abreviado por GOE, de Gaussian Orthogonal Ensemble). Os hamiltonianos que não possuem invariância por reversão temporal são representados por matrizes unitárias: este grupo pertence ao conjunto unitário gaussiano (GUE). Finalmente, aqueles hamiltonianos que são invariantes por reversão temporal, mas não por rotações são descritos por matrizes reais e quaterniônicas. Tais sistemas são modelados pelo conjunto simplético gaussiano (GSE). A teoria estatística das flutuações espectrais para qualquer dos conjuntos acima é chamada de teoria das matrizes aleatórias (RMT) [15].

O hamiltoniano estudado, Eq.(2.1) é invariante por reversão temporal, portanto ele corresponde, na teoria estatística, ao primeiro conjunto. Neste estudo, a estatística do espectro de níveis correspondente ao oscilador quártico, cujo limite clássico é caótico, será modelada pelo ensemble ortogonal gaussiano (GOE).

Os membros do conjunto de matrizes ortogonais gaussianas, daqui para frente abreviado por GOE, satisfazem duas condições fundamentais que determinam o ensemble:

1.  $P(H)$  é invariante por transformações ortogonais, ou seja em qualquer base que seja representado  $H$ , com dimensão arbitrária  $N$ , vale:

$$P_N(H)dH = P_N(\tilde{H})d\tilde{H} . \quad (2.8)$$

2. Assumiremos que os elementos de matriz que caracterizam o hamiltoniano,  $H_{ij}$  não estão correlacionados, portanto a distribuição de elementos de matriz será dada pela expressão:

$$P(H) = \prod_{ij} P_{ij}(H_{ij}) . \quad (2.9)$$

Estes dois requerimentos determinam univocamente  $P(H)$ , o qual tem forma gaussiana, (para maiores detalhes [15]). Sem perda de generalidade podemos escrever:

$$P_N(H) = C_N \exp(-\text{Tr}H^2/4v^2) , \quad (2.10)$$

onde  $C_N$  é a constante de normalização e  $v$  é a variância dos elementos de matriz. Neste caso os elementos de matriz  $H_{ij}$  estão distribuídos gaussianamente com média zero, ou seja

$$\overline{H_{ij}} = 0, \quad i \leq j , \quad (2.11)$$

e com variância:

$$\overline{H_{ij}^2} = (1 + \delta_{ij})v^2, \quad i \leq j . \quad (2.12)$$

A Eq. (2.10) para uma matriz de dimensão  $N$  pode ser reescrita em termos de seus autovetores [parametrizados pelo conjunto de ângulos  $\{\theta_i\}$ , onde  $1 \leq i \leq N(N-1)/2$ ] e de seus autovalores  $\{E_i\}$ , onde  $1 \leq i \leq N$ . A relação entre os elementos de volume  $dH$  e  $d\tilde{H}$  é :

$$dH_{1,1} \cdots dH_{N,N} dH_{1,2} \cdots dH_{N-1,N} = J_N dE_1 \cdots dE_N d\theta_1 \cdots d\theta_{N(N-1)/2} . \quad (2.13)$$

e o jacobiano  $J_N$  :

$$J_N = \left| \frac{\partial(H_{1,1}H_{2,2} \cdots H_{N,N}H_{1,2} \cdots H_{N,N-1})}{\partial(E_1 \cdots E_N \theta_1 \cdots \theta_{N(N-1)/2})} \right| \quad (2.14)$$

Da equação acima, por dimensionalidade, podemos inferir que o jacobiano contém um polinômio de grau  $N(N-1)/2$  nas energias  $\{E_i\}$  e daí:

$$J_N = \prod_{j>i} |E_i - E_j| f(\theta_1, \cdots, \theta_{N(N-1)/2}) . \quad (2.15)$$

Usando a Eq. (2.13), fazendo a mudança de variáveis e integrando sobre todos os ângulos  $\theta_i$ , obtem-se a distribuição conjunta de autoenergias:

$$P_N(E_1, \cdots, E_N) = C_N \prod_{j>i} |E_i - E_j| \exp \left\{ -\frac{1}{4v^2} \sum_i E_i^2 \right\} . \quad (2.16)$$

A utilidade deste último resultado é evidente:

1. O fator  $|E_i - E_j|$  na Eq.(2.16) faz com que a probabilidade de que dois níveis estejam perto um do outro seja baixa, chamaremos a este efeito de “repulsão de níveis”, sendo esta uma manifestação dos níveis de energia estarem correlacionados.
2. Integrando a Eq.(2.16) sobre todas as variáveis de energia menos uma, obtem-se a densidade média de níveis  $\bar{\rho}(E)$ .

Para uma melhor ilustração das idéias acima expostas podemos facilmente da Eq.(2.10) obter distribuição de elementos de matriz para o caso simples de uma matriz  $2 \times 2$ :

$$P(H) = C_2 \exp \left\{ -\frac{1}{4v^2} (H_{11}^2 + 2H_{12}^2 + H_{22}^2) \right\} , \quad (2.17)$$

e a partir desta expressão a respectiva distribuição de autoenergias, Eq.(2.16):

$$P(E_1, E_2) = C_2 |E_1 - E_2| \exp \left\{ -\frac{1}{4v^2} (E_1^2 + E_2^2) \right\} . \quad (2.18)$$

A condição de normalização de  $P(E_1, E_2)$  determina a relação entre  $C_2$  e  $v$ , mais especificamente  $C_2 = 2/(2\pi v^2)^{3/2}$ .

Uma das medidas estatísticas de maior sucesso para determinar as correlações de curto alcance do espectro é a distribuição de espaçamentos de níveis vizinhos,  $P(S)$ . Tal quantidade exhibe manifestamente a repulsão de níveis característica do GOE acima mencionada. Para  $N = 2$  o cálculo de  $P(S)$  é simples. Definindo  $S = |E_1 - E_2|$ , escreve-se:

$$P(S) = \int P(E_1, E_2) \delta(S - |E_1 - E_2|) dE_1 dE_2, \quad (2.19)$$

e obtém-se:

$$P(S) = \frac{S}{4v^2} \exp\left\{-\frac{S^2}{8v^2}\right\}, \quad \text{com } 0 \leq S < \infty. \quad (2.20)$$

Para relacionarmos a distribuição acima com situações físicas reais, precisamos fixar o valor de  $v$ . Isto é feito relacionando  $v$  ao espaçamento médio de níveis  $D$ :

$$D = \int_0^\infty sP(s)ds = \sqrt[2]{\pi}v. \quad (2.21)$$

Pode-se agora reescalar a distribuição de espaçamento de níveis  $P(S)$  introduzindo  $s = S/D$ . A nova distribuição é dita universal, pois pode ser comparada com diferentes sistemas hamiltonianos com diferentes espaçamentos médios de níveis. A distribuição  $P(s)$  tem a forma:

$$P(s) = \frac{\pi}{2}s \exp\left\{-\frac{s^2}{4}\right\}, \quad (2.22)$$

A Fig.(2.7) mostra a função  $P(s)$ , conhecida como a distribuição de Wigner para o caso GOE.

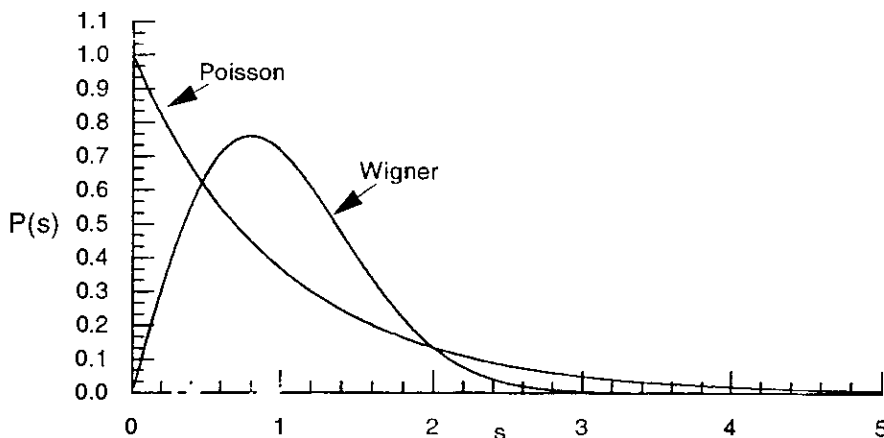


Fig.2.7

Em geral, para um sistema complexo de muitos níveis ( $N \gg 1$ ) pode-se também definir outros tipos de espaçamento de níveis, como por exemplo  $S_{i,k} \equiv E_{i+k+1} - E_i$ , onde  $k$  denota o número de níveis entre  $E_i$  e  $E_{i+k+1}$ . A distribuição dos  $\{S_{i,k}\}$  nos dá a distribuição generalizada  $P(k; S)$ . A distribuição de espaçamentos de níveis vizinhos, usualmente abreviada como NND (do inglês Nearest Neighbor level Distribution), discutida nos parágrafos anteriores, relaciona-se com a distribuição generalizada através da relação:  $P(0, s) = P(s)$ .

Bohigas e colaboradores [16] conjecturaram que todos os sistemas com limite clássico caótico exibem flutuações espectrais universais e equivalentes ao GOE. Destas flutuações universais uma das mais salientes é a repulsão de níveis. (Outras medidas das flutuações espectrais serão discutidas abaixo.) Em contraposição, em sistemas hamiltonianos classicamente integráveis os níveis de energia não exibem correlações. Isto é, o espaçamento de níveis segue uma distribuição de Poisson

$$P(s) = \exp(-s) , \quad (2.23)$$

ilustrada pela Fig.(2.7). Note que neste caso os níveis tem alta probabilidade de estarem muito próximos na escala de  $D$ . Vale lembrar que, para sistemas integráveis, a distribuição de Poisson foi obtida analiticamente por Berry e Tabor [17].

Além da distribuição de espaçamento de níveis vizinhos, há outras medidas estatísticas para caracterizar flutuações espectrais universais. Apresentaremos abaixo duas das mais populares na literatura, ambas funções de dois pontos.

1. Variância  $\Sigma^2(L)$ , definida na faixa de energia  $L \equiv \Delta E/D$ :

$$\Sigma^2(L) = \overline{[N(L) - \bar{N}(L)]^2} , \quad (2.24)$$

onde  $N(L)$  é o número de níveis contidos na janela de energia rescalada  $L$ . Desta definição, segue que  $\bar{N}(L) = L$ . Em teoria de matrizes aleatórias  $\overline{\quad}$  representa



a média sobre o ensemble. Quando analisamos espectros devemos comparar esta média com médias sobre energias,  $\langle \dots \rangle_E$ .

2. A rigidez espectral  $\Delta_3(L)$  é a medida de correlações de longo alcance mais robusta e eficiente do ponto de vista prático. Ela é definida como o desvio quadrático médio da melhor reta ajustada a  $N(E)$  no intervalo  $L = E/D$ .

$$\Delta_3(E, L) = \min_{(A,B)} \frac{\bar{\rho}(E)}{L} \int_{E-L/2\bar{\rho}(E)}^{E+L/2\bar{\rho}(E)} [N(E + \epsilon) - (A + B\epsilon)]^2 d\epsilon, \quad (2.25)$$

onde  $\bar{\rho}(E)$  é a densidade média de estados, definida numa faixa de energia  $\delta$ :

$$\bar{\rho}(E) = \frac{1}{2\delta} \int_{E-\delta}^{E+\delta} \rho(E) dE \quad (2.26)$$

sendo  $\rho(E)$  a densidade de estados:  $\rho(E) = \sum_i \delta(E - E_i)$ .

A teoria de matrizes aleatórias (RMT) [15] nos fornece resultados exatos para as funções de correlação  $\Sigma^2(L)$  e  $\Delta_3(L)$  discutidas acima. Em particular, para o ensemble ortogonal gaussiano, GOE, sabe-se que assintoticamente:

$$\Sigma^2(L) \approx \frac{2}{\pi^2} [\ln(2\pi L) + \gamma + 1 - \pi^2/8] \quad \text{para} \quad L \gg 1, \quad (2.27)$$

$$\Delta_3(L) \approx \frac{1}{\pi^2} [\ln L + \gamma - 5/4 - \pi^2/8] \quad \text{para} \quad L \gg 1. \quad (2.28)$$

Por outro lado, se o sistema é integrável, ou seja se ele segue a estatística de Poisson, teremos:

$$\Sigma^2(L) = L. \quad (2.29)$$

$$\Delta(L) = L/15. \quad (2.30)$$

As Figuras (2.8) e (2.9) ilustram as curvas exatas para  $\Sigma^2(L)$  e  $\Delta_3(L)$ , respectivamente, tanto para o caso integrável quanto para o caótico.

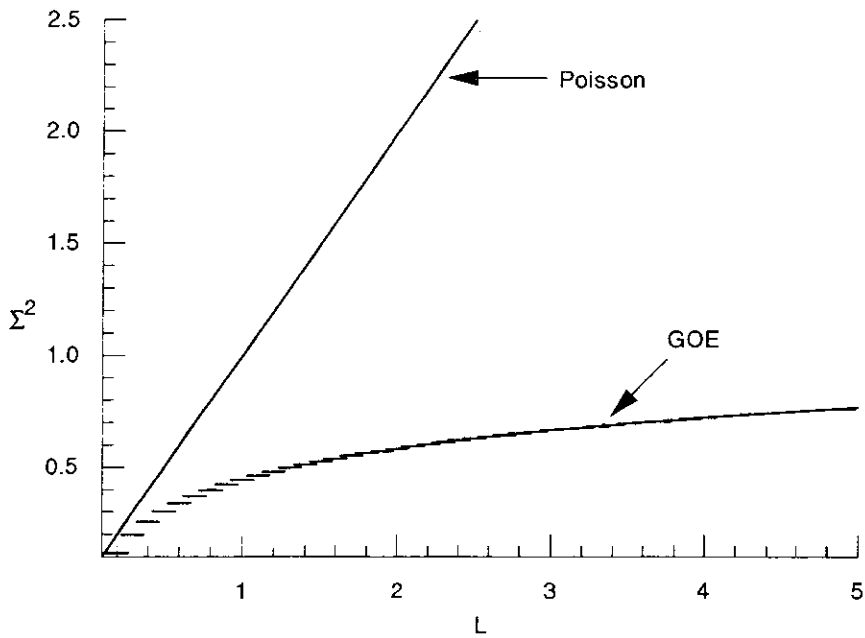


Fig.2.8

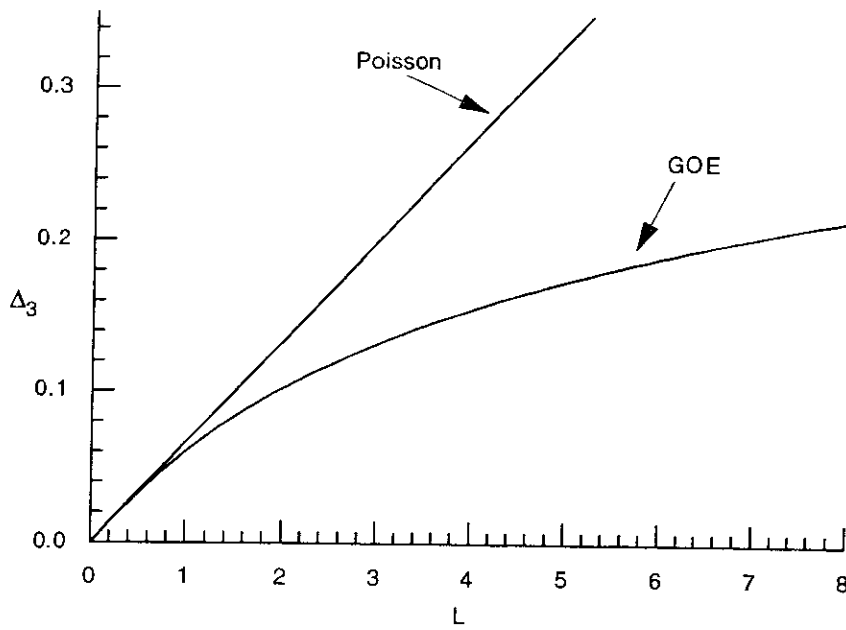


Fig.2.9

## 2.2.2 Considerações sobre a densidade média de níveis

Até agora discutimos apenas as flutuações espectrais em torno de um espaçamento médio  $D$ . A teoria estatística não é capaz de fornecer qualquer previsão para  $D$ . Isto nos obriga a buscar esta informação em outro formalismo. O método mais adequado é fazer um tratamento semiclássico.

Se  $(E_1 \leq E_2 \leq \dots \leq E_i \leq \dots)$  é o espectro do operador  $\hat{H}$  de um determinado sistema, o número de estados com energia menor que  $E$  é:

$$N(E) = \sum_i \Theta(E - E_i) \quad (2.31)$$

onde  $\Theta$  é a função de Heaviside. Portanto a densidade de estados  $\rho(E)$ :

$$\rho(E) = \frac{dN}{dE} = \sum_{i=1}^{\infty} \delta(E - E_i), \quad (2.32)$$

é dada por uma soma de funções  $\delta$  de Dirac. Podemos separar  $N(E)$  em uma parte média (suavizada) e outra parte flutuante (ou oscilante):

$$N(E) \equiv \bar{N}(E) + N_{fl}(E), \quad (2.33)$$

conseqüentemente a densidade média  $\bar{\rho}(E) = d\bar{N}(E)/dE$  também será separada:

$$\rho(E) = \bar{\rho}(E) + \rho_{fl}(E). \quad (2.34)$$

Por hora estamos interessados no comportamento das partes médias  $\bar{\rho}(E)$  e  $\bar{N}(E)$ . Uma simples estimativa de  $\bar{N}(E)$  pode ser obtida aplicando a regra semiclássica, que diz: “Cada estado quântico está associado a um volume  $h^d$  do espaço de fase, onde  $d$  é a dimensão do espaço de fase”. Portanto podemos dizer que o número de estados  $\bar{N}(E)$  é uma relação entre o volume  $v(E)$  ocupado por todos os estados com energia menores que  $E$  e o volume ocupado por um estado  $h^d$ :

$$\bar{N}(E) = \frac{v(E)}{(2\pi\hbar)^d}; \quad (2.35)$$

esta expressão é conhecida na literatura como fórmula de Weyl ou Thomas-Fermi.

O valor de  $v(E)$  pode ser calculado pela expressão:

$$v(E) = \int \Theta(E - H(\bar{p}, \bar{q})) d^d \bar{p} d^d \bar{q}. \quad (2.36)$$

Para uma hamiltoniana do tipo:  $H(\bar{p}, \bar{q}) = \bar{p}^2/2m + V(\bar{q})$  obtem-se:

$$v(E) = \frac{(2\pi m)^{d/2}}{\Gamma(d/2 + 1)} \int_{E > V(\bar{q})} [E - V(\bar{q})]^{d/2} d\bar{q} \quad (2.37)$$

e o número de estados  $\bar{N}(E)$  é:

$$\bar{N}(E) = \frac{1}{\Gamma(d/2 + 1)} \left( \frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^{d/2} \int_{E > V(\bar{q})} [E - V(\bar{q})]^{d/2} d\bar{q}. \quad (2.38)$$

Se o sistema estudado é representado por uma hamiltoniana  $H$  que apresenta  $\nu$  simetrias, podemos obter o número de estados médio para cada simetria, os quais serão iguais em primeira aproximação (ver Ref.[12]):

$$\bar{N}_1(E) \approx \bar{N}_2(E) \approx \dots \approx \bar{N}_\nu(E) \approx \bar{N}(E)/\nu, \quad (2.39)$$

onde  $\sum_i \bar{N}_i(E) = \bar{N}(E)$ .

### 2.2.3 Análise das flutuações espectrais do oscilador quártico acoplado

Com os resultados obtidos a partir da análise clássica da hamiltoniana dada pela Eq. (2.1) determinamos uma janela paramétrica em  $(\alpha, \beta)$  onde o sistema é caótico. O hamiltoniano dado pela Eq. (2.1) possui invariância por reversão temporal, pela conjectura de Bohigas o comportamento a nível quântico do sistema pode ser modelado pela teoria de matrizes aleatórias desenvolvida acima. Nesta secção verificaremos se a estatística das flutuações espectrais do sistema na janela paramétrica  $(\alpha, \beta)$  segue a previsão da RMT.

Calculamos o espectro de  $H$  resolvendo a equação de Schrödinger estacionária por diagonalização. Escolhemos como base o conjunto completo de autofunções de oscilador harmônico (OH) nas direções  $x$  e  $y$ . Em outras palavras, nossos estados de base de oscilador harmônico  $|\mu\rangle$  são definidos como:

$$\langle \mathbf{r} | \mu \rangle \equiv \Phi_m^{OH}(x) \Phi_n^{OH}(y), \quad (2.40)$$

onde  $\Phi_k^{OH}(z)$  é a  $k$ -ésima autofunção do oscilador harmônico. É importante notar que cada estado da base  $\mu$  está associado a dois números quânticos  $m$  e  $n$ . Assim, para resolvermos por diagonalização

$$H|\mu\rangle = E_\mu|\mu\rangle, \quad (2.41)$$

onde

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{\hat{p}_y^2}{2m} + \alpha x^2 y^2 + \beta(x^4 + y^4) \quad (2.42)$$

é necessário conhecermos os elementos de matriz  $H_{\mu\nu}$ . Estes são dados por:

$$H_{\mu,\nu} = \frac{(p_x^2)_{\mu,\nu}}{2m} + \frac{(p_y^2)_{\mu,\nu}}{2m} + \alpha(x^2 y^2)_{\mu,\nu} + \beta[(x^4)_{\mu,\nu} + (y^4)_{\mu,\nu}], \quad (2.43)$$

onde

$$\begin{aligned} (p_x^2)_{\mu,\nu} &= \sqrt{(\nu+1)(\nu+2)}\delta_{\mu,\nu} - (2\nu+1)\delta_{\mu,\nu} + \sqrt{\nu(\nu-1)}\delta_{\mu,\nu} \\ (\zeta^2)_{\mu,\nu} &= \sqrt{(\nu+1)(\nu+2)}\delta_{\mu,\nu+2} + (2\nu+1)\delta_{\mu,\nu} + \sqrt{\nu(\nu-1)}\delta_{\mu,\nu-2} \\ (x^2 y^2)_{\mu,\nu} &= (x^2)_{\mu_x, \nu_x} (y^2)_{\mu_y, \nu_y} \\ (\zeta^4)_{\mu,\nu} &= \sqrt{(\nu+1)(\nu+2)(\nu+3)(\nu+4)}\delta_{\mu,\nu+4} + \\ &\quad \sqrt{(\nu+1)(\nu+2)}(2\nu+5)\delta_{\mu,\nu+2} + \\ &\quad (6\nu^2 + 6\nu + 4)\delta_{\mu,\nu} + (2\nu-3)\sqrt{\nu(\nu-1)}\delta_{\mu,\nu-2} + \\ &\quad (2\nu+1)\sqrt{(\nu)(\nu-1)}\delta_{\mu,\nu-2} + \sqrt{(\nu)(\nu-1)(\nu-2)(\nu-3)}\delta_{\mu,\nu-4} \\ &\quad + (2\nu+1)\sqrt{(\nu+1)(\nu+2)}\delta_{\mu,\nu+2}. \end{aligned}$$

onde  $\zeta$  é a coordenada  $x$  ou  $y$ .

O potencial  $\alpha x^2 y^2 + \beta(x^4 + y^4)$  apresenta quatro simetrias discretas - correspondendo ao grupo pontual  $C_4$ , conforme ilustrado pela Figura (2.10) para o caso com acoplamento fraco,  $\alpha = 10^{-5}$  e  $\beta = 0.8$  e na Fig.(2.11) com acoplamento forte, para  $\alpha = 0.8$  e  $\beta = 0.0025$ , potencial para o qual o sistema se comporta caoticamente.

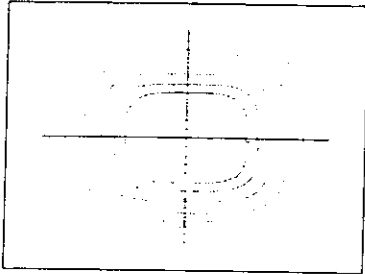


Fig. 2.10

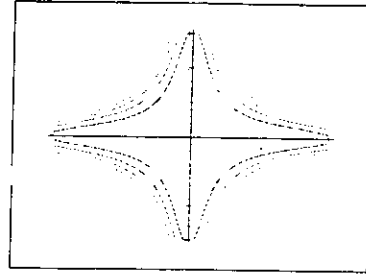


Fig. 2.11

Escolhemos arbitrariamente uma das simetria para nossa análise (ímpar-ímpar). Acreditamos que as outras simetrias exibam aproximadamente as mesmas propriedades estatísticas. Como o sistema é ligado, seu espectro de energia é discreto, ou ainda, ele pertence a um conjunto infinito enumerável. Assim, de fato, a dimensão da matriz secular  $H$  é infinita. No entanto, temos que nos restringir a uma dimensão da ordem de  $10^3$ , por causa de limitações computacionais. Como consequência do truncamento do espaço de Hilbert, apenas uma fração dos autovalores e autovetores calculados a partir da Eq.(2.41). No que segue, faremos uma avaliação quantitativa do número de estados convergidos.

Um modo de testar a convergência do espectro ao resolver a equação de autovalores próprios Eq.(2.41), é através da comparação do número médio de níveis  $\bar{N}(E)$ , dada pela Eq.(2.38) com a densidade cumulativa encontrada numericamente.

Resolvendo a Eq.(2.38), para o oscilador quártico acoplado Eq.(2.1) obtemos:

$$\bar{N}(E) = \frac{m}{6\pi} I E^{3/2} \quad (2.44)$$

onde  $I = \int_0^{2\pi} d\varphi (1/\sqrt{\beta + \frac{1}{2}(\alpha/2 - \beta) \sin^2(2\varphi)})$ , e para uma das simetrias temos

$$\bar{N}_1(E) = \bar{N}(E)/4. \quad (2.45)$$

Elaboramos um programa em Fortran para resolver a Eq.(2.41) para uma escolha arbitrária dos parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$ . Trabalhamos em unidades onde  $m = 1$  e  $\hbar = 1$ . Para a maioria dos casos estudados tomamos a representação matricial de  $H$  de  $800 \times 800$ ,  $400 \times 400$  e  $100 \times 100$ . Obtido o espectro discreto de energia  $\{E_i\}$ , com  $i = 1, \dots, n$  ( $n$  dimensão da matriz), para cada caso, construímos a densidade cumulativa de níveis  $N(E)$ , determinada pela Eq.(2.31):  $N(E) = \sum_i \Theta(E - E_i)$ . Os resultados para  $N(E)$  são comparados com a expressão semiclássica  $\bar{N}_1(E)$  na Fig.(2.12), para um conjunto arbitrário de valores parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$  da janela paramétrica onde o sistema é caótico (neste caso,  $\alpha = 0.8$  e  $\beta = 0.0025$ ).

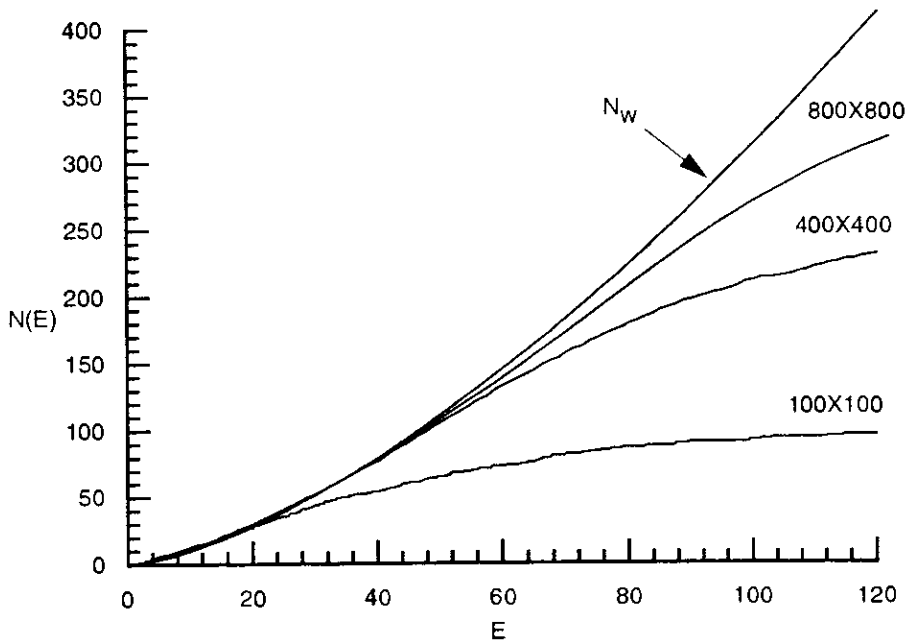


Fig.2.12

Pode-se notar a oscilação de  $N(E)$  em torno de  $\bar{N}_1(E)$ , até certo valor da energia  $E_0$ , para cada caso ( $800 \times 800$ ,  $400 \times 400$  e  $100 \times 100$ ), acima do qual ambas curvas se

afastam uma da outra. O motivo é o fato de ter eleito um número finito para a dimensão da representação matricial de  $H$ . Esta comparação entre o resultado semiclássico e o valor numérico dá uma boa idéia sobre a convergência numérica das autoenergias do sistema para os parâmetros escolhidos. Observa-se da Fig.(2.12), que  $E_0$  para a matriz escolhida de  $100 \times 100$ , é um valor muito baixo, tal que só se tem poucos níveis convergentes, mas para os casos  $800 \times 800$  e  $400 \times 400$  a quantidade de níveis convergentes aumenta, Outro critério para a convergência que pode ser observado da Fig.(2.12),é comparando as curvas  $N(E)$  entre as obtidas das matrizes  $800 \times 800$  e  $400 \times 400$ , estas convergem até determinada energia  $E_0$ , o que significa que para níveis de energia menores que  $E_0$ , está assegurada a convergência destes. Este valor de  $E_0$  corresponde ao 125º nível que determina o limite superior para a convergência. Os níveis com energias acima de  $E_0$  serão descartados. Um aumento do tamanho da faixa de “bons valores das autoenergias” implicaria um aumento da dimensão de  $H$ .

Uma vez determinado o espectro de energia para o sistema descrito pelo hamiltoniano Eq.(2.1) com os parâmetros já mencionados acima, podemos fazer uma análise estatística. O primeiro passo é usar a densidade suave de níveis semiclássica para transformar o espectro obtido numericamente em um espectro com espaçamento de níveis unitário [16]. Tal procedimento poderia também ser implementado usando o espaçamento médio de níveis local  $D$  (que tem uma dependência suave com a energia).

Desta forma podemos imediatamente construir a distribuição de espaçamentos de níveis. Sem grande sofisticação pode-se fazer isto da seguinte forma: Computa-se

$$s_i = \frac{E_{i+1} - E_i}{D}, \quad \text{onde} \quad i = 1, \dots, N. \quad (2.46)$$

Mediante um programa em Fortran montamos o histograma correspondente à distribuição  $P(s)$  do espaçamento de níveis. Se  $n$  é o número de eventos, ou seja, o número de elementos do conjunto  $\{s_i\}$  onde  $i = 1, \dots, n$  e  $m$  o número de canais entre  $s_{\min}$  e  $s_{\max}$ , cada canal



com comprimento  $\Delta s$ , com  $R_i$  contagens de valores de  $s$  no  $i$ -ésimo canal de comprimento  $\Delta s$ , então a probabilidade de obter o valor  $s$  numa faixa  $\Delta s$  é:

$$P(s)\Delta s = \frac{R(s)}{n} \Delta s. \quad (2.47)$$

Assim, em média obtemos um número de eventos por canal de  $n/m$  com um desvio  $\sigma = \sqrt{n/m}$  dos resultados teóricos. Para os primeiros 125 níveis de energia ( $n = 125$ ) do espectro encontrado acima para o caso da matriz  $400 \times 400$  encontramos o histograma  $P(s)$  que mostrado na Fig.(2.13). Na mesma figura comparamos o histograma obtido numericamente com o resultado teórico obtido pela teoria de matrizes aleatorias (RMT).

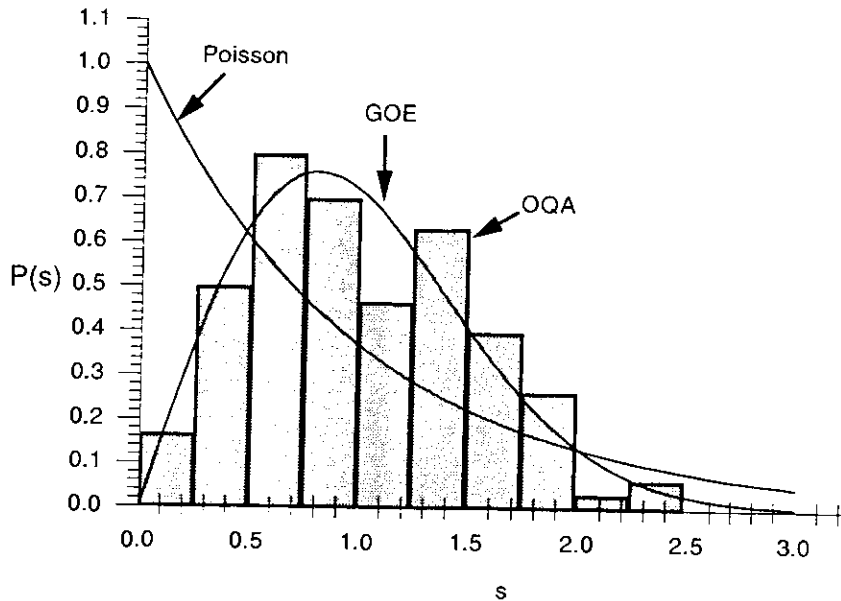


Fig.2.13

Analogamente, também encontramos as flutuações espectrais para as medidas para  $\Delta_3(L)$ . Da Eq.(2.25) podemos também computar o valor de  $\Delta_3$  para uma faixa de energia escalada  $L$ . Os resultados obtidos estão ilustrados na Fig.(2.14), com a mesma convenção que acima.

Observe-se a convergência da curva  $\Delta_3(L)$  até uma faixa de energia  $L \approx 5.0$ . Neste caso o fato de ter elegido uma matriz finita, restringe o tamanho da faixa  $L$  para uma boa convergência, se tomarmos uma maior dimensão da matriz, como 800, o tamanho

da faixa de convergência  $L$  aumentaria, e isto se pode observar na Fig.(2.15) onde a convergência é até  $L \approx 10.0$ . Isto é compatível com a teoria semi-clássica de Berry para  $\Delta_3$

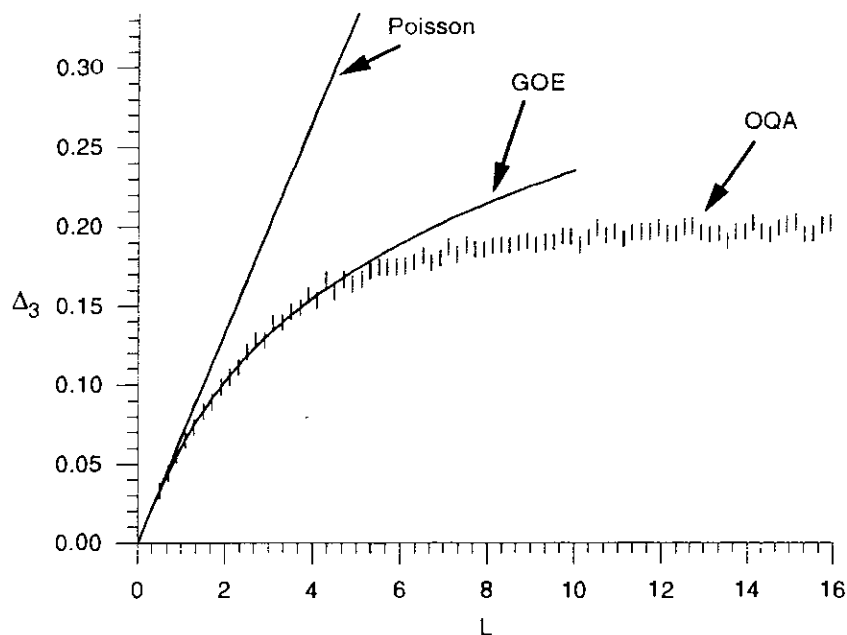


Fig.2.14

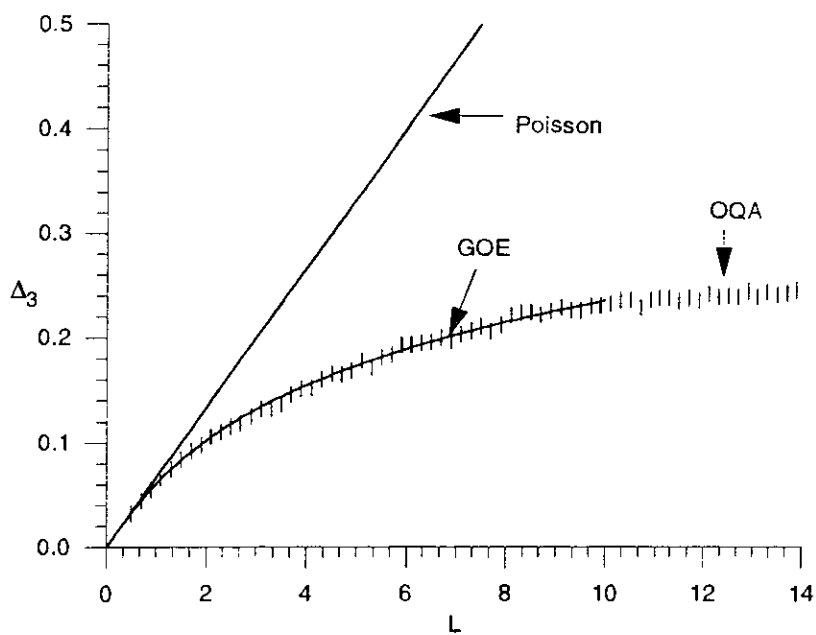


Fig.2.15

# Capítulo 3

## Em busca de uma generalização para a teoria de Landau-Zener

### 3.1 Introdução

O primeiro capítulo desta dissertação foi dedicado à apresentação de um resumo da teoria de Landau-Zener para transições em sistemas de dois níveis sob a influência de uma perturbação dependente do tempo.

O segundo capítulo foi dedicado ao estudo da dinâmica clássica do oscilador quártico acoplado, bem como ao estudo de suas flutuações espectrais comparando-as com as previsões da teoria de matrizes aleatórias. Nesta ocasião discutimos apenas propriedades estáticas, ou seja, propriedades do sistema com os parâmetros  $\alpha$  e  $\beta$  fixos.

Este capítulo é dedicado ao estudo dinâmico de transições entre níveis de um sistema com limite clássico caótico cuja hamiltoniana é governada por um parâmetro externo. Com isto, este estudo é mais uma tentativa na busca de uma generalização da teoria de Landau-Zener para sistemas de muitos-corpos.

Naturalmente a literatura neste campo é muito extensa, principalmente na química e

na física nuclear, onde a transferência de energia entre modos rápidos e lentos determina o rendimento de um grande número de reações. Na química, em particular, características específicas dos sistemas estudados são sempre de grande relevância. Apesar do grande interesse, pouco foi feito para sistemas caóticos, onde se espera que propriedades universais, após escaladas com poucas grandezas específicas do sistema emergjam. Uma exceção notável são os trabalhos de Wilkinson no assunto [10].

A estrutura do presente capítulo é a seguinte: iniciamos com uma curta revisão da teoria de Wilkinson para dissipação quântica. Apresentamos, então, os resultados de nossas simulações usando a teoria de matrizes aleatórias. Com base nestas simulações fazemos uma crítica a algumas hipóteses da teoria de Wilkinson. Concluimos apresentando resultados para evolução temporal do oscilador quártico.

## 3.2 Revisão da teoria de Wilkinson

A teoria de Wilkinson para dissipação quântica é baseada na hipótese de que as transições entre níveis é governada por “avoided crossings”. Com base nisto, Wilkinson adaptou o modelo de Landau-Zener para probabilidade de transição em um sistema de dois níveis de energia para um sistema genérico com muitos níveis, mas com comportamento classicamente caótico. A evolução temporal de tal sistemas é dada pela evolução do parâmetro  $X \equiv X(t)$ . A dinâmica determina a razão de dissipação  $(\partial \bar{E} / \partial t)$  e esta Wilkinson mostrou que é proporcional à velocidade  $\dot{X}$  elevada a uma potência.

A hipótese central é que para o níveis cuja diferença de energia  $\Delta\epsilon$  é muito menor do que o espaçamento médio de níveis  $D$ , a probabilidade de transição é dada pela fórmula de Landau-Zener:

$$P_{LZ} = \exp\left(-\frac{\pi\Delta\epsilon^2}{2A\hbar|\dot{X}|}\right). \quad (3.1)$$

A qual é equivalente a Eq.(1.28), para um “avoided crossing” isolado. Neste caso a energia

é parametrizada mediante  $X$ , onde  $A$  é a derivada  $|d\epsilon/dX|$  próxima ao "avoided crossing" com gap  $\Delta\epsilon$ . A condição para a qual esta fórmula seja válida é quando  $\Delta\epsilon \ll D$ ,  $P_{LZ}$  tem um valor apreciável, restringe os valores da velocidade  $\dot{X}$  a:

$$\hbar\sigma|\dot{X}|n_0^2 \ll 1, \quad (3.2)$$

onde  $\sigma$  é um valor típico das derivadas  $A$  e  $n_0$  é a densidade média de níveis, relacionada com o espaçamento médio de níveis  $D$  por:

$$D = \frac{1}{n_0}. \quad (3.3)$$

A relação Eq.(3.2) define a velocidade crítica  $V_c = D^2/\hbar\sigma$ . Portanto temos dois regimes de velocidades paramétricas.

Regime de pequenas velocidades:

$$|\dot{X}| \ll V_c, \quad (3.4)$$

regime de altas velocidades:

$$|\dot{X}| \gg V_c. \quad (3.5)$$

Para um sistema que apresenta invariância por reversão temporal (GOE) e sujeito a uma variação paramétrica de baixa velocidade no sentido da Eq.(3.2), a razão de dissipação é dada por [10]:

$$\frac{\partial \bar{E}}{\partial t} = 2^{-5/4} \pi \Gamma\left(\frac{3}{4}\right) n_0 \hbar^{1/2} [\sigma(E_f, 0)^2]^{3/4} |\dot{X}|^{3/2}. \quad (3.6)$$

Já para altas velocidades  $\hbar\sigma|\dot{X}|n_0^2 \gg 1$ , espera-se que a transição seja também influenciada por estados não vizinhos e, portanto, que a fórmula de Zener não seja aplicável. Neste caso, foi mostrado que [10]

$$\frac{\partial \bar{E}}{\partial t} = \pi \hbar n_0^2 \sigma^2 |\dot{X}|^2. \quad (3.7)$$

Vamos nos concentrar inicialmente no caso “lento”. Para quantificar suas previsões analíticas em sistemas realísticos, Wilkinson [13] introduziu uma distribuição para os “gaps”,  $P_g(\Delta\varepsilon)$  e uma distribuição para as derivadas  $A$  discutidas acima,  $P_d(A)$  para descrever sistemas com muitos níveis de energia. Foi mostrado que estas distribuições são dadas por:

$$P(\Delta\varepsilon) = \gamma n_0^\nu \Delta\varepsilon^{\nu-1} \quad \text{para} \quad \Delta\varepsilon \rightarrow 0, \quad (3.8)$$

onde  $\nu = 1$  para o caso GOE e  $\nu = 2$  para o caso GUE. Foi também mostrado que

$$P'(A)dA = \frac{A}{4\sigma^2} \exp\left\{-\frac{A^2}{8\sigma^2}\right\} dA, \quad \text{para o caso GOE}, \quad (3.9)$$

bem como

$$P'(A)dA = \frac{A^2}{2\sqrt{\pi}\sigma^3} \exp\left\{-\frac{A^2}{4\sigma^2}\right\} dA, \quad \text{para o caso GUE}. \quad (3.10)$$

Cabe esclarecer que a distribuição que nos fornece o número de “avoided crossings” por unidade de comprimento, com “gap”  $\Delta\varepsilon$  entre  $\Delta\varepsilon, \Delta\varepsilon + d\Delta\varepsilon$  e com inclinação  $A$  entre  $[A, A + dA]$  é:

$$N(A, \Delta\varepsilon) = n_0 A P(\Delta\varepsilon) P'(A). \quad (3.11)$$

Assim, no limite adiabático definido por  $|\dot{X}| \ll V_c$ , onde Wilkinson considera os “avoided crossings” isolados, escreve-se que a razão de transição é:

$$R = \dot{X} \int_0^\infty dA \int_0^\infty d\Delta\varepsilon N(A, \Delta\varepsilon) \exp\left\{-\frac{\pi\delta\varepsilon^2}{2A\hbar|\dot{X}|}\right\} \quad (3.12)$$

o que dá

$$R = \gamma I_\nu n_0^{\nu+1} \langle A^{(\nu+2)/2} \rangle \hbar^{\nu/2} |\dot{X}|^{(\nu+2)/2} \quad (3.13)$$

onde para o caso GOE:

$$\langle A^{3/2} \rangle = 3.2^{1/4} \Gamma(3/4) \sigma^{3/2} \quad \text{e} \quad I_1 = 2^{-1/2} \quad (3.14)$$

e para o caso GUE

$$\langle A^2 \rangle = 6\sigma^2 \quad \text{e} \quad I_2 = \pi^{-1} . \quad (3.15)$$

Disto a razão de transição fica

$$\begin{aligned} R &= \text{cte}_1 |\dot{X}|^{3/2} \quad (\text{GOE}) , \\ R &= \text{cte}_2 |\dot{X}|^2 \quad (\text{GUE}) . \end{aligned} \quad (3.16)$$

Se o  $n$ -ésimo estado tem a probabilidade  $f_n$  de estar ocupado então:

$$\frac{df_n}{dt} = (-2f_n + f_{n+1} + f_{n-1})R \quad (3.17)$$

onde  $f_n(t) = f(E_n, t)$ . A probabilidade de ocupação  $f_n$  se comporta difusivamente e portanto satisfaz a equação:

$$\frac{\partial}{\partial t} f = \frac{R}{n_0} \frac{\partial^2}{\partial E^2} f \quad (3.18)$$

e a energia total do sistema é escrita como:

$$\bar{E} = \int dE n_0(E) f(E, t) E . \quad (3.19)$$

Para o caso onde o nível de Fermi é bem marcado, onde se tem  $n_0(E) \approx n_0(E_F)$ , pode-se encontrar a energia dissipada

$$\frac{\partial \bar{E}}{\partial t} = \frac{R}{n_0} = c_1 |\dot{X}|^{3/2}, \quad (\text{GOE}) \quad (3.20)$$

$$\frac{\partial \bar{E}}{\partial t} = \frac{R}{n_0} = c_2 |\dot{X}|^2, \quad (\text{GUE}),$$

onde :

$$c_1 = 2^{-5/4} \pi \Gamma(3/4) n_0 \hbar^{1/2} [\sigma(E_f, 0)^2]^{3/4} \quad (3.21)$$

$$c_2 = \pi \hbar n_0^2 \sigma^2 . \quad (3.22)$$

Para altas velocidades ( $|\dot{X}| \gg V_c$ ), onde se espera que a transição também aconteça entre estados não vizinhos, portanto a fórmula de Zener não é aplicável, da fórmula de Kubo obtêm-se:

$$\frac{\partial \bar{E}}{\partial t} = \pi \hbar n_0^2 \sigma^2 |\dot{X}|^2. \quad (3.23)$$

### 3.3 Simulações Quânticas através da RMT

Primeiro analisaremos a evolução temporal de um sistema hamiltoniano, apresentando muitos “avoided crossings”, cuja dinâmica clássica é caótica. Vamos ainda nos especializar na situação em que a simetria por reversão temporal é preservada, ou seja, no caso ortogonal. Um modo eficiente de modelar a variação paramétrica de tal hamiltoniano via teoria de matrizes aleatórias é:

$$H(X) = H_1 \cos X + H_2 \sin X, \quad (3.24)$$

onde  $H_1$  e  $H_2$  são matrizes de dimensão  $N \times N$ , cujos elementos estão distribuídos gaussianamente e descorrelacionados entre si, ou seja, segundo a relação:

$$\overline{H_{k,k'} H_{i,i'}} = \sigma^2 (\delta_{k,i} \delta_{k',i'} + \delta_{k,i'} \delta_{k',i}), \quad (3.25)$$

a vantagem desta parametrização é que a densidade independe de  $X$ . É importante notar que a dependência temporal entra através da fórmula  $X \equiv X(t)$ .

Através de um programa em FORTRAN calculamos o espectro do hamiltoniano  $H$  no caso GOE para dimensão  $31 \times 31$  como função de  $X$ , para valores do parâmetro  $X$  variando de 0 a  $2\pi$ . Observamos na Fig.(3.1) a presença de muitos “avoided crossings” entre diferentes níveis e distintos valores de  $X$ .

O primeiro passo para uma análise estatística é reescalar o espectro, o que significa reescalar a energia com respeito ao espaçamento médio de níveis  $D$ , e o parâmetro  $X$  com respeito à distância típica entre dois “avoided crossings”.



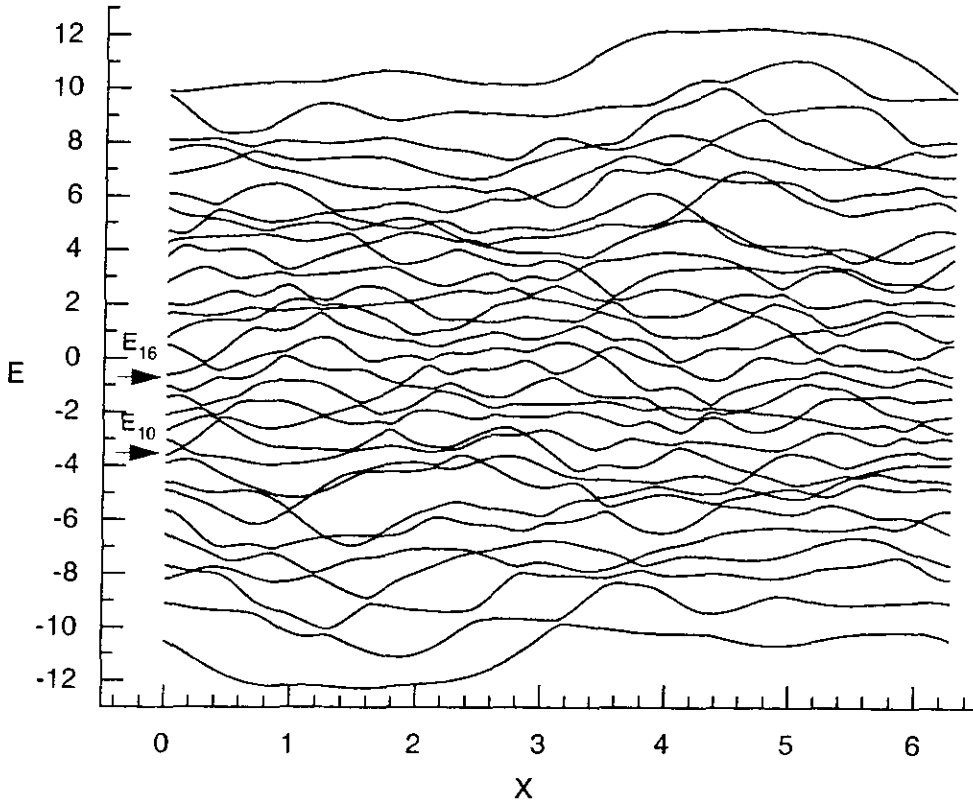


Fig.3.1

Para rescalo o parametro  $X$ , primeiro encontramos o correlator  $C(\delta x)$ , o qual é uma propriedade universal dos sistemas classicamente caóticos. O correlator  $C(\delta x)$  é definido:

$$C(\delta X) = \frac{1}{D^2} \frac{\overline{\partial E_i(X + \delta X) \partial E_i(X)}}{\partial X \partial X}. \quad (3.26)$$

A simulação para o espectro da Fig.3.1, foi feito para os 20 níveis centrais. O motivo é que os níveis mais extremos do espectro apresentam efeitos de confinamento. Para estas diferentes realizações conseguimos a função correlação apresentada na Fig.3.2:

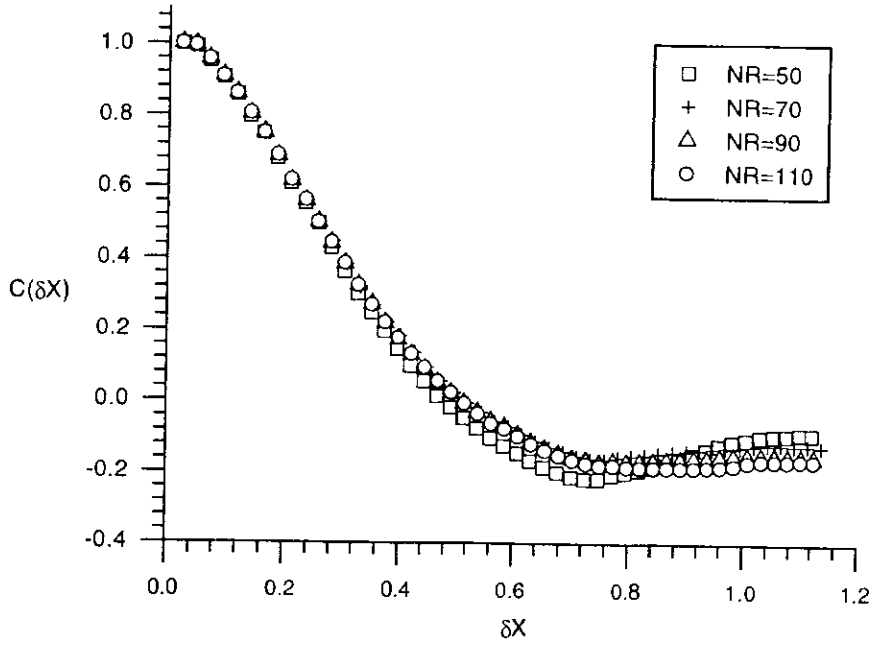


Fig.3.2

Nesta figura  $C(\delta x)$  é rescalado para  $C(\delta x)/C(0)$ . Já  $\delta x$  é rescalado para  $\sqrt{C(0)}\delta x$ . Note-se que de 70 realizações as curvas convergem para um mesmo valor. O valor obtido para  $C(0) = 5.49$ , e para o espaçamento médio de níveis do espectro da Fig.3.1  $D = 0.56$ . Podemos obter o espectro universalizado segundo o rescalado proposto por Simons e Altshuler [18]:

$$x = \sqrt{C(0)}X \quad \text{e} \quad \epsilon_i(x) = E_i(X)/D. \quad (3.27)$$

O espectro rescalado é apresentado na Fig.(3.3).

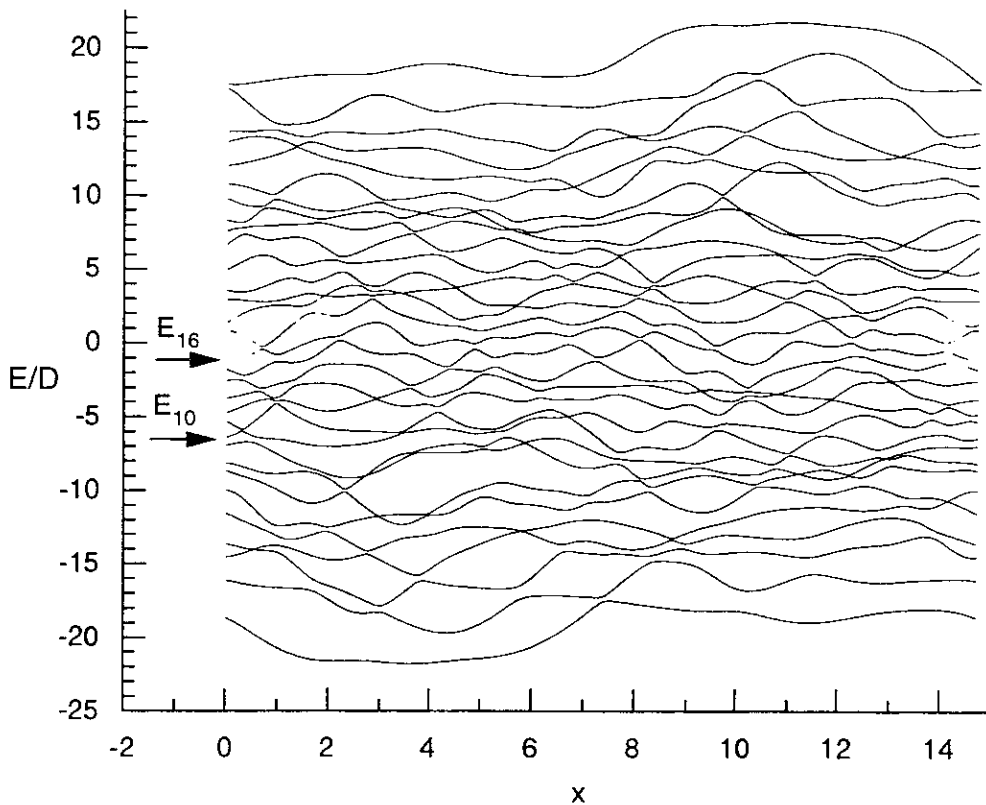


Fig.3.3

Este tipo de rescalamento faz com que a distância entre “avoided crossings” em média seja aproximadamente um. Observe-se a estrutura complicada do espectro onde se podem observar muitos “avoided crossing” não isolados os quais serão analisados. Para valores do gap ( $\Delta E$ ) dos “avoided crossing” menores que o espaçamento médio de níveis ( $D$ ) (no grafico menores que a unidade) segundo Wilkinson será possível uma transição de tipo Landau-Zener dada pela fórmula da Eq.(3.1). A Fig.3.3 mostra a região do espectro que será analisada. Estudamos a dinâmica entre os níveis  $E_{10}$  e  $E_{16}$ , examinando a probabilidade de transição entre os diferentes “avoided crossings”, populando inicialmente o nível  $E_{14}$  quando  $X = 0$  no instante  $t = 0$ , para uma determinada “velocidade” do

sistema. A evolução do sistema estará na dependência do parâmetro  $X$  com o tempo  $X(t)$ , portanto a velocidade do sistema estará dada por  $\dot{X}$ , na qual será escolhida constante por simplicidade. Agora precisamos definir um regime de velocidades em função dos parâmetros do sistema como  $C(0)$  e  $D$ , que definirá quando a velocidade é lenta ou rápida. Para isto nos basearemos na Eq.(3.2) que define estes limites. Assim temos uma relação entre os elementos de matriz da derivada  $\partial H/\partial X$  e  $\sigma(E, 0)$ :

$$\overline{\left[\frac{\partial H}{\partial X}\right]_{n,n}^2} \equiv \beta\sigma(E, 0)^2 \quad (3.28)$$

onde para o caso GOE  $\beta = 2$  e caso GUE  $\beta = 1$  como:

$$\overline{\left[\frac{\partial H}{\partial X}\right]_{n,n}^2} = \overline{\left(\frac{\partial E_n(X)}{\partial X}\right)^2} = DC(0) \quad (3.29)$$

então:

$$\sigma(E, 0) = D\sqrt{\frac{C(0)}{\beta}} \quad (3.30)$$

por tanto a velocidade crítica para o caso GOE é:

$$V_c = \frac{D}{\hbar} \sqrt{\frac{2}{C(0)}}. \quad (3.31)$$

Como estamos interessados na evolução temporal do sistema, faz-se necessário escalar o tempo com respeito a um determinado tempo característico. Isto foi feito para o caso de um “avoided crossing” isolado no Capítulo 1, onde se definiu o tempo de tunelamento Zener ( $\tau_Z$ ). Utilizando essas definições nós trabalharemos com os valores médios do “gap” e da inclinação das assíntotas dos “avoided crossings”.

Primeiro vejamos a distribuição de gaps dos “avoided crossing” do espectro da Fig.(3.3) tomando as 20 energias centrais (Descartamos os extremos por efeito de confinamento). Encontramos assim também o gap médio  $\Delta E$ . Na Fig.3.4 mostramos esta distribuição, com o valor médio do gap de  $\overline{\Delta E} = 0.93D$ .

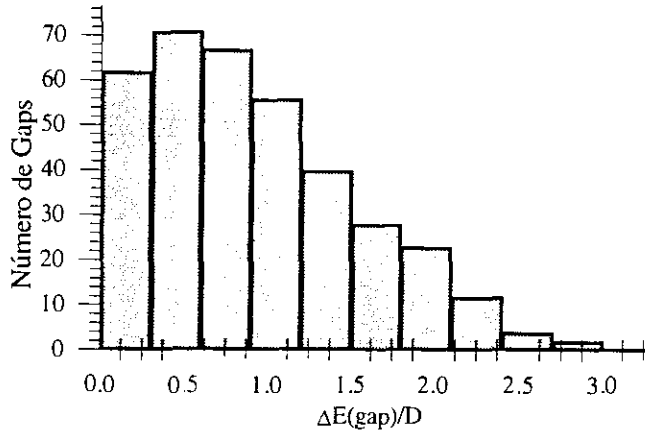


Fig.3.4

Da distribuição  $P'(A)$  de derivadas  $A$  dos “avoided crossing” da Eq.(3.9) obtemos a valor médio  $\bar{A} = \sqrt{2\pi\sigma}$ .

Com estes resultados podemos escalar o tempo envolvido nas transições, tanto para o regime de pequenas velocidades como para o caso de altas velocidades. Baseando-nos no artigo [6], é possível rescalar o tempo para ambos regimes das velocidades, definindo o tempo de tunelamento Zener ( $\tau_Z$ ) (como foi feito no capítulo 1). O tempo típico que define o limite assintótico da probabilidade de transição encontrada por Zener, Eq.(1.28) ou seu equivalente Eq.(3.1). Podemos apresentar o tempo de tunelamento Zener ( $\tau_Z$ ) como função dos parâmetros do espectro sistema,  $\overline{\Delta E}$ ,  $C(0), D$  e da velocidade  $|\dot{X}|$  com a qual o sistema se move.

Para o limite adiabático,  $|\dot{X}| \ll V_c$ :

$$\tau_Z \approx \frac{\overline{\Delta E}}{|\dot{X}| D \sqrt{C(0)}} \quad (3.32)$$

Para sistemas não adiabáticos,  $|\dot{X}| \gg V_c$ :

$$\tau_Z \approx \sqrt{\frac{1}{|\dot{X}| \sqrt{C(0)D}}} \quad (3.33)$$

Dependendo da escolha da magnitude da velocidade com respeito a  $V_c$ , será utilizado um destes resultados.

Para o espectro apresentado na Fig.3.3, populando o nível  $E_j$  no instante  $t = 0$  e com uma função do  $X$  do tipo  $X(t) = \dot{X}t$ , com o valor de  $\dot{X}$  constante, encontramos as populações dos níveis como função do tempo. Para isto resolvemos numericamente o sistema de equações acopladas, oriundos da equação de Schrödinger  $i\hbar(\partial/\partial t)|\Psi\rangle = H|\Psi\rangle$ , para o hamiltoniano da Eq.(3.24), onde  $|\Psi\rangle$  é o estado do sistema que expressamos como uma combinação linear dos autoestados do sistema  $|\psi_i\rangle$ :

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_{j=1}^n a_j(t) \exp\left\{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t E_j(t') dt'\right\} |\psi_j(t)\rangle \quad (3.34)$$

onde  $n$  é a dimensão da representação matricial do hamiltoniano  $H$ , e  $E_j$  são as autoenergias, encontradas ao resolver a equação de autovalores:

$$H(t)|\psi_j(t)\rangle = E_j(t)|\psi_j(t)\rangle, \quad (3.35)$$

$a_j(t)$  são as amplitudes de probabilidade que darão a probabilidade de que o  $j$  -ésimo estado esteja populado no tempo  $t$ , o qual será denotado por  $P_j(t)$ .

Para achar estas populações resolvemos o sistema de equações diferenciais acopladas:

$$\frac{d}{dt} a_i = \sum_{j=1}^n \frac{\exp\{i[E_j(t) - E_i(t)]/\hbar\}}{E_i(t) - E_j(t)} \left[\frac{d}{dt} H\right]_{i,j} a_j(t) \quad (3.36)$$

O resultado numérico foi encontrado pelo método de Runge Kutta de 4ª-ordem. Assim populando o nível  $E_{14}$  no instante  $t = 0$ , resolvemos o sistema Eq.(3.36) para dois regimes:

1) Para o regime de pequenas velocidades,  $|\dot{X}| = V_c/100$ , obtemos a evolução temporal das populações mostrada na Fig.(3.5).

Fazendo uma ampliação da região do espectro de interesse, apresentamos os “avoided crossings” envolvidos no processo, como função do tempo parametrizado ao tempo de tunelamento Zener ( $\tau_Z$ ) para o caso adiabático. Da Fig.3.6 observamos que os “avoided crossings” estão a distâncias menores que o tempo  $\tau_Z$ .

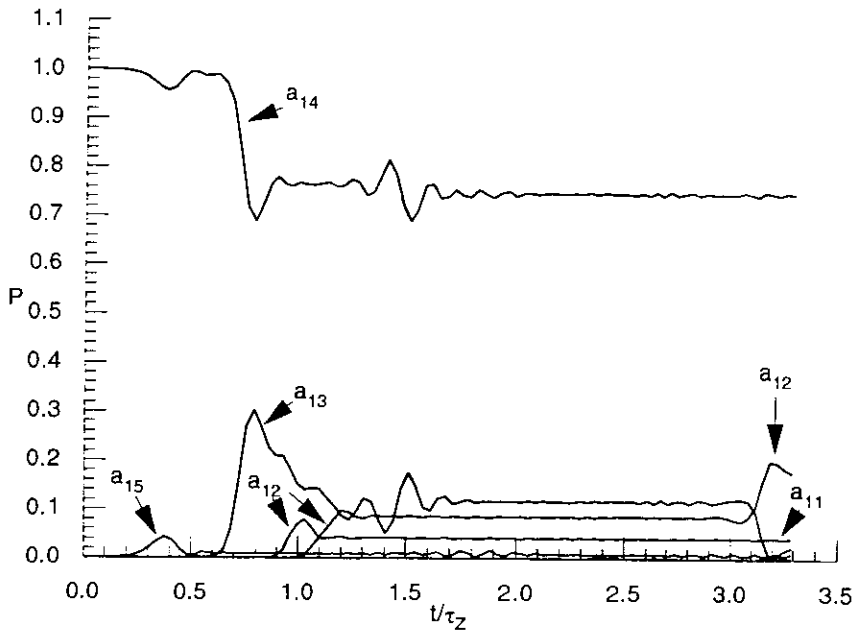


Fig.3.5

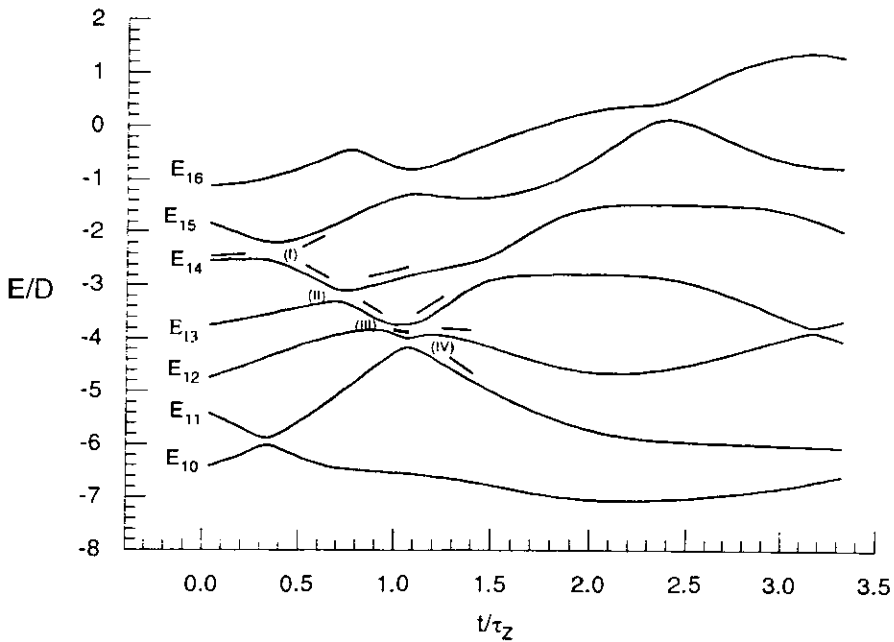


Fig.3.6

2) Para altas velocidades ou caso não adiabático,  $|\dot{X}| = 100V_c$  a evolução das amplitudes e o espectro são mostradas nas figuras (3.7) e (3.8)

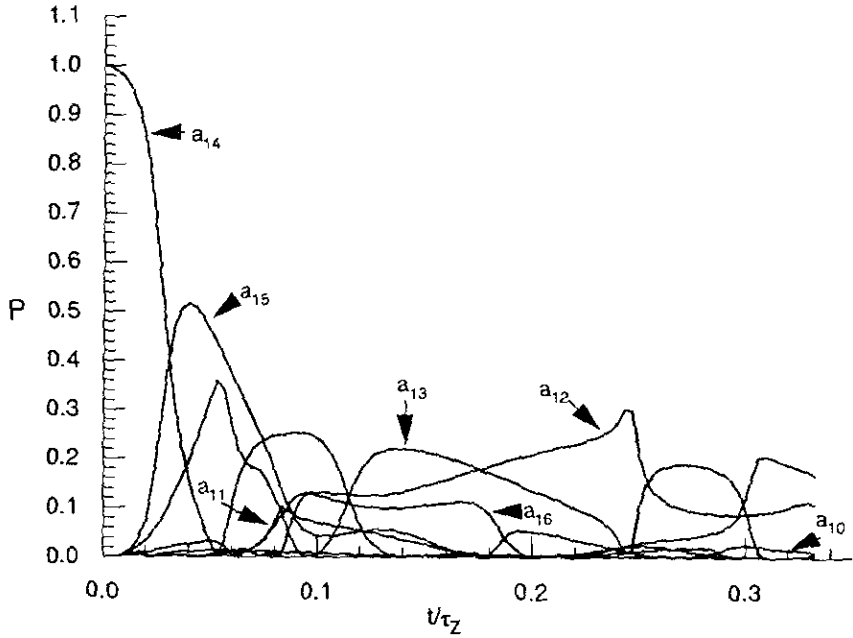


Fig.3.7

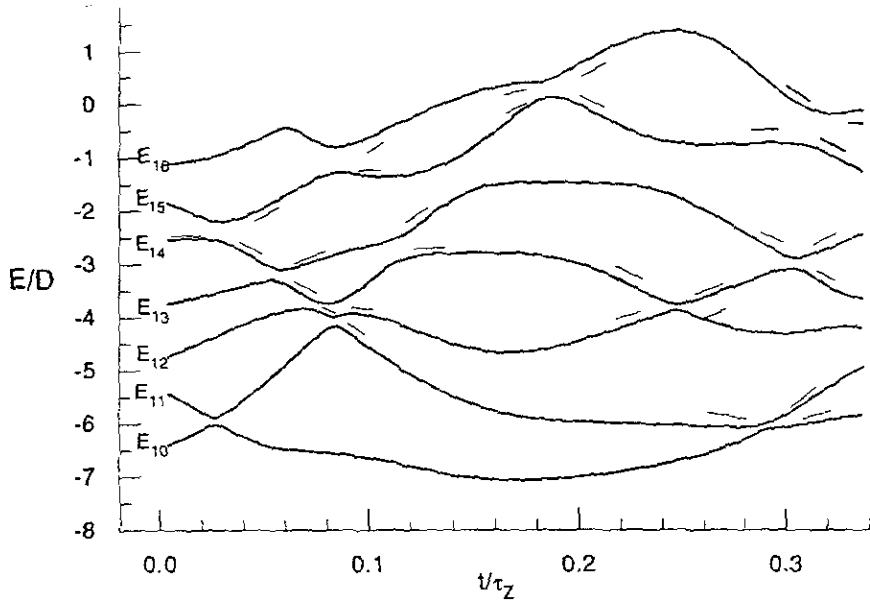


Fig.3.8



Para o espectro da Fig.3.6 a evolução dinâmica do sistema, será discutida em termos dos “avoided crossings” (*I*), (*II*), (*III*) e (*IV*). Podemos observar que eles se encontram separados a distâncias menores que o tempo  $\tau_Z$ . E se parametrizamos os “avoided crossings” encontrando os gaps  $\Delta E_i$  :

$$\begin{aligned}
 \Delta E_I/D &\approx 0.34 \\
 \Delta E_{II}/D &\approx 0.21 \\
 \Delta E_{III}/D &\approx 0.14 \\
 \Delta E_{IV}/D &\approx 0.14
 \end{aligned}
 \tag{3.37}$$

temos que as transições estão acontecendo em “avoided crossings” com “gap” muito menores que o espaçamento médio de níveis  $D$  e isto se está dando para um processo adiabático com uma velocidade do sistema muito menor que a velocidade crítica  $V_c$ . O primeiro “avoided crossing” *I* representa uma perturbação para o sistema, já que o estado inicialmente populado ( $E_{14}$ ), permanece quase com a mesma amplitude de probabilidade. Os “avoided crossing” (*II*), (*III*) e (*IV*) são mais interessantes, observando-se uma situação crítica entre os “avoided crossing” (*III*) e (*IV*), onde o nível  $E_{13}$  antes de chegar a seu valor assintótico realiza uma transição para o nível  $E_{12}$  no “avoided crossing” (*IV*) que está muito perto do (*III*). Isto é ilustrado claramente na Fig.3.5. As populações ou probabilidades ( $|a_i|^2$ ) depois de um tempo que consideramos assintótico longo  $t/\tau_Z \approx 2.5$ , são:

$$\begin{aligned}
 |a_{14}|^2 &= 0.76 \\
 |a_{13}|^2 &= 0.126 \\
 |a_{12}|^2 &= 0.09 \\
 |a_{11}|^2 &= 0.04
 \end{aligned}
 \tag{3.38}$$

Para o caso não adiabático mostradas nas figuras 3.7 e 3.8 o comportamento dinâmico do sistema é mais complicado chegando a ocorrer transições onde antes (caso adiabático)

não ocorriam. É como se os “avoided crossings” se aproximassem. Observando a escala do tempo na qual acontecem as transições, estas são muito menores que o tempo  $\tau_Z$ , portanto as populações ou as amplitudes de probabilidade não chegam a seu valor assintótico.

Se quisermos comparar estes resultados com a hipótese de Wilkinson temos que parametrizar os “Avoided Crossings” da região do espectro de interesse, medindo o gap  $\Delta E$  e as derivadas das assíntotas da hipérbola como o qual foi aproximado o “Avoided Crossings”,  $|dE_i/dt - dE_{i+1}/dt| = \Delta m = |m_i - m_{i+1}|$ .

Para completar a parametrização dos “avoided crossing”, precisamos conhecer as derivadas da reta tangente a um “avoided crossing”. Isto é tratar como isolados e aproximadamente como hipérbolas com sua respectiva assíntota, a derivada da qual encontraremos. Nestas condições o parâmetro que precisamos  $\Delta m$  é  $|dE_i(\infty)/dt - dE_{i+1}(\infty)/dt|$  onde as derivadas  $dE_i(\infty)/dt$ , são das assíntotas, como mostrada na Fig.(3.9), na parametrização de um “avoided crossing” idealmente isolado.

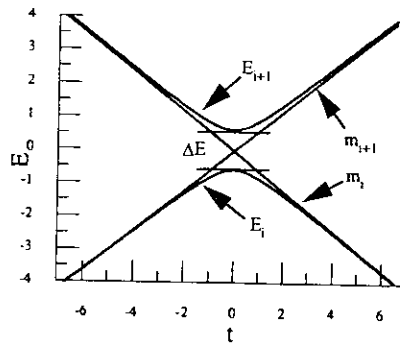


Fig.3.9

por tanto os parâmetros que caracterizam os “avoided crossings” para o caso adiabático da Fig.(3.6) são:

$$\begin{aligned}
 \Delta m_{II} &= 3.6D/\tau_Z \\
 \Delta m_{III} &= 3.16D/\tau_Z \\
 \Delta m_{IV} &= 4.75D/\tau_Z
 \end{aligned}
 \tag{3.39}$$

Agora em cada “avoided crossing” a probabilidade de transição só é determinada pela geometria deste, e dada pela formula da Eq.(3.1) ou sua forma equivalente [2]

$$P_{LZ} = \exp -(2\pi\gamma), \quad \gamma = \frac{1}{4\hbar}(\Delta E)^2 / \left| \frac{d}{dt} E_i(\infty) - \frac{d}{dt} E_{i+1}(\infty) \right| \quad (3.40)$$

Portanto para cada “avoided crossing” a probabilidade de transição Zener  $P_{LZ}$  é:

$$\begin{aligned} P_{LZ}^{II} &= 0.209 \\ P_{LZ}^{III} &= 0.45 \\ P_{LZ}^{IV} &= 0.59 \end{aligned} \quad (3.41)$$

A isto juntamos o fato de que os níveis estão inicialmente populados. Por exemplo seja um “avoided crossing” isolado, formado pelos níveis  $E_n$  e  $E_{n+1}$ , e estando inicialmente (no  $-\infty$  os valores das populações em  $P_n$  e  $P_{n+1}$  respectivamente. Os valores das populações (no infinito), depois de passar po um “avoided crossing” é:

$$\begin{aligned} P'_n &= P_n(1 - P_{LZ}) + P_{n+1}P_{LZ} \\ P'_{n+1} &= P_{n+1}(1 - P_{LZ}) + P_nP_{LZ} \end{aligned} \quad (3.42)$$

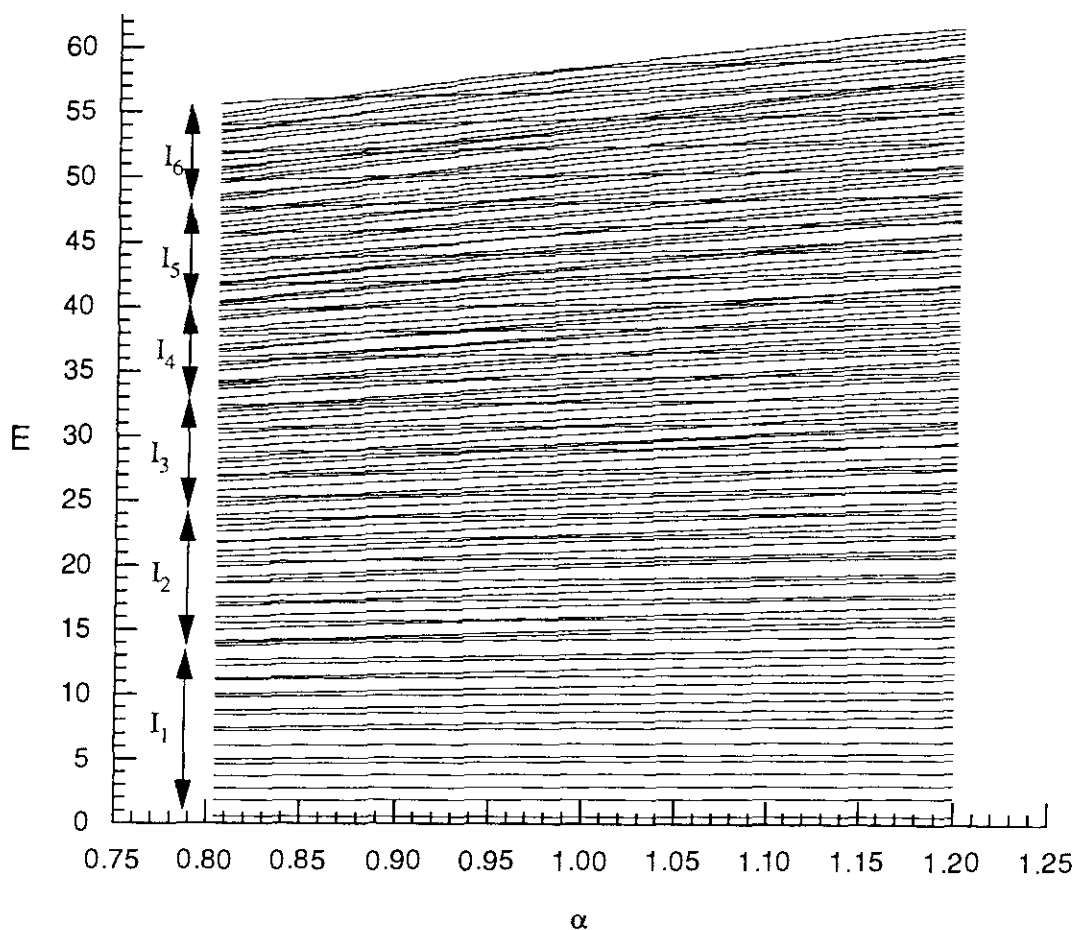
Aplicando este resultado para a região do espectro estudado, que inicialmente só está populado o nível  $E_{14}$ , encontrarmos as populações finais:

$$\begin{aligned} P_{14} &= 0.79 \\ P_{13} &= 0.115 \\ P_{12} &= 0.038 \\ P_{11} &= 0.055 \end{aligned} \quad (3.43)$$

Este último resultado é obtido de acordo segundo a hipótese de Wilkinson, a qual será comparada com nosso resultado feito numericamente, mostrada nos resultados (3.38)

### 3.4 Resultados para o oscilador quártico-OQA

Estudaremos aqui a dinâmica do oscilador quártico acoplado, Eq.(2.1), o qual por apresentar invariãnpor reversão temporal pode ser modelada por uma matriz GOE.



$\alpha$   
Fig.3.10

As propriedades espectrais do OQA e seu comportamento clássico já foram estudadas no capítulo 2, estando o comportamento caótico do sistema contido no acoplamento  $x^2y^2$ . Escolhemos uma janela de parâmetros  $\alpha$  que garante que o sistema seja caótico. A dependência temporal é inserida no problema através de  $\alpha \equiv \alpha(t)$ .

Resolvendo a equação de autovalores Eq.(2.41) com o hamiltoniano do OQA(Eq.(2.1)), para cada valor do parâmetro  $\alpha$ , que toma valores numa janela de valores de  $[0.8, 1.2]$ , e com o valor fixo de  $\beta = 0.0025$ , encontramos o espectro do OQA com a variação do  $\alpha$ , mostrados na Fig.(3.10), isto foi feito para uma escolha de 400 elementos da base. Assim

a representação matricial do hamiltoniano é de  $400 \times 400$ , apresentando o sistema 400 níveis de energia, dos quais, baseando-nos na convergência de  $N(E)$ , da Fig.(2.12), os 125 primeiros níveis são bons. O espectro apresenta muitos “avoided crossings”, como no caso do matriz GOE de  $31 \times 31$ , com a diferença de que o espaçamento médio de  $D$  cresce com  $\alpha$ .

Precisamos, como no caso da matriz GOE, escalar o espectro para ter um melhor panorama das magnitudes dos “gaps” e das distâncias entre “avoided crossings”, para isto o fator importante como já sabemos é o correlator  $C(\delta\alpha)$ , e sobretudo seu valor no ponto zero  $C(0)$ , uma expressão mais geral que a Eq.(3.26) é:

$$C(\delta\alpha) = \frac{1}{D^2} \overline{\frac{\partial E_i(\alpha + \delta\alpha)}{\partial \alpha} \frac{\partial E_i(\alpha)}{\partial \alpha}} - \overline{\left( \frac{\partial E_i(\alpha)}{\partial \alpha} \right)^2}, \quad (3.44)$$

o qual é aplicado para o caso do espectro do OQA.

Devido a que o espectro apresenta diferente estrutura, com o aumento da energia a como se pode ver na Fig.3.10, e baseando-nos no resultado encontrado por Bruus e colaboradores [19], na dependência de  $C(0)$  com a energia da forma:  $C(0) \propto E^3$  para o caso do bilhar, para uma análise do OQA, nós dividimos o espectro em seis regiões, cada uma contendo 20 níveis de energia:

$$\begin{aligned} I_1 &= [E_1, E_{20}] & I_2 &= [E_{21}, E_{40}] \\ I_3 &= [E_{41}, E_{60}] & I_4 &= [E_{61}, E_{80}] \\ I_5 &= [E_{81}, E_{100}] & I_6 &= [E_{101}, E_{120}] \\ I_7 &= [E_{121}, E_{140}] \end{aligned} \quad (3.45)$$

Consideramos apenas 140 primeiros níveis, por estes terem convergido. Da Eq.(3.44), podemos encontrar  $C(0)$ , como função da energia para o OQA, nos diferentes intervalos  $I_i$ , Fig(3.11):

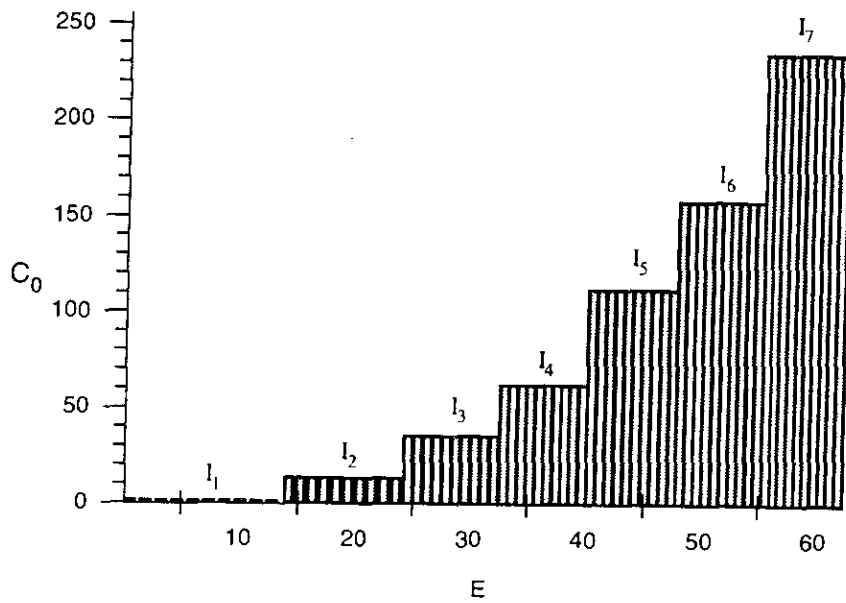


Fig.3.11

A função crescente de  $C(0)$  com  $E$ , é um reflexo de que o espectro apresenta mais estrutura para os níveis superiores. Tomando os níveis convergentes e os que apresentam maior estrutura, como os que estão contidos nas regiões  $I_4$ ,  $I_5$  e  $I_6$ , e encontrando o espaçamento médio de níveis para cada região, apresentando o mesmo valor  $\Delta = 0.35$ . Mostramos o correlator dado pela Eq.(3.44), para estas três regiões e comparadas com o correlator para o caso GOE :

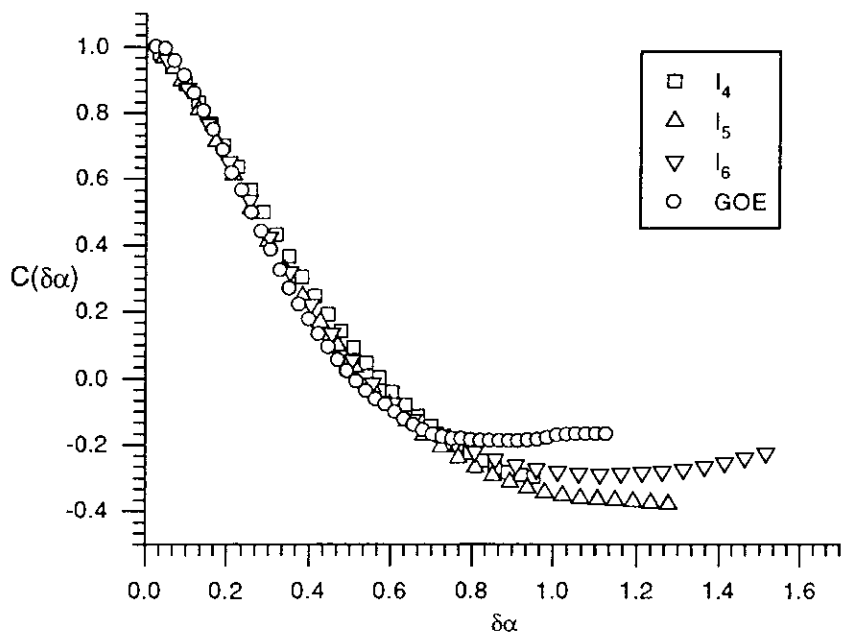


Fig.3.12

Com todos estes dados já podemos apresentar o espectro rescalado pela Eq.(3.27) com a nova variável  $\alpha^*$ . Por exemplo para a região  $I_5$  e  $I_6$  o espectro é:

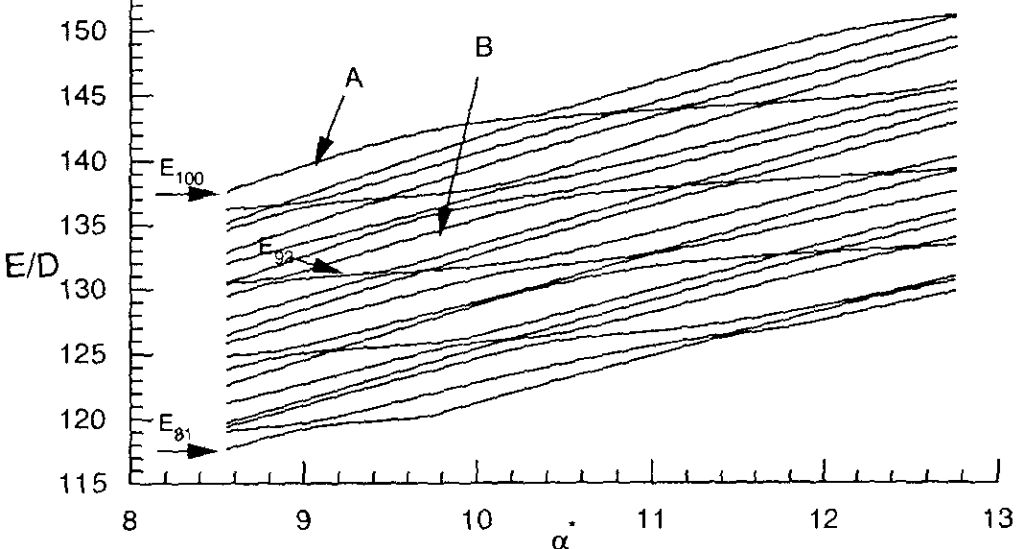


Fig.3.13 a

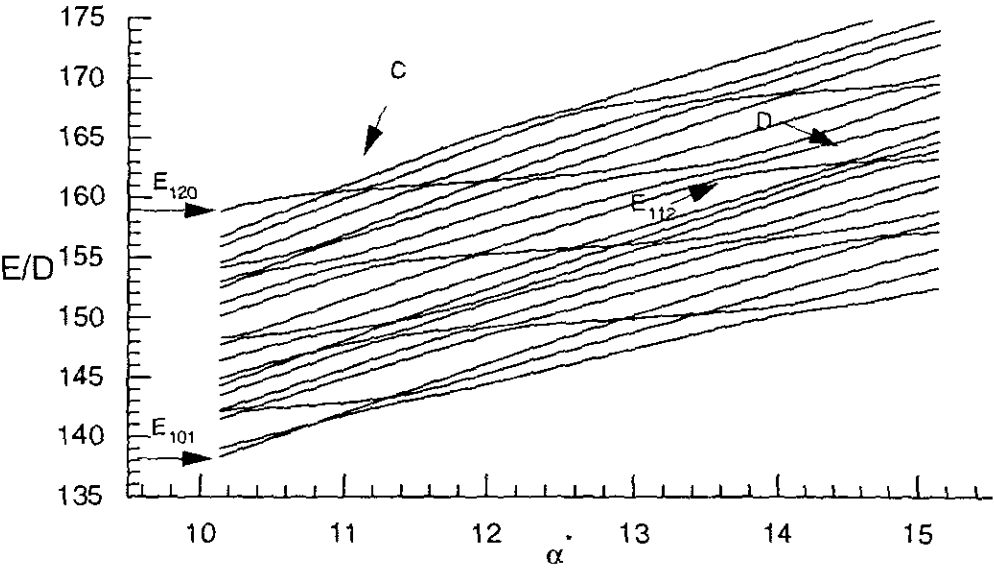


Fig. 3.13 b



Podemos notar a presença de “avoided crossings” com gaps ( $\Delta E$ ) muito menores que o espaçamento médio de níveis  $D$ . No entanto, para uma melhor análise, construímos uma estatística dos gaps, para  $I_4, I_5$  e  $I_6$ :

região I4:

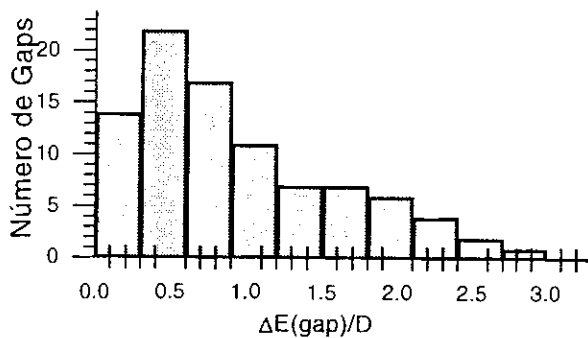


Fig.3.14

região I5:

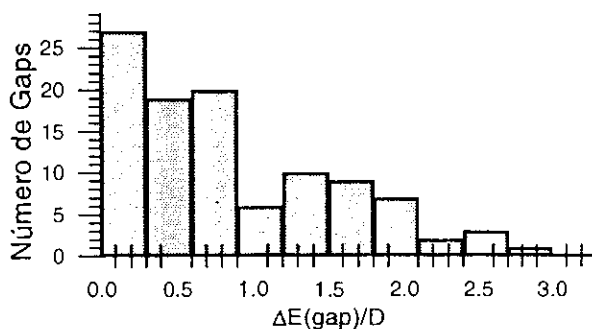


Fig.3.15

região I6:

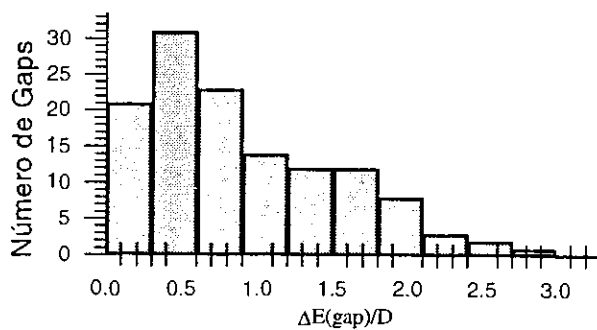


Fig.3.16

Em todos estes casos o gap médio  $\overline{\Delta E} = 0.9D$ , além disto observamos que a quantidade de “avoided crossings”, com gaps muito menores que  $D$  não é a maioria.

Vejamos agora a evolução temporal do sistema para o OQA, escolhemos as regiões  $I_5$  e  $I_6$ , por apresentarem o espectro com maior estrutura e estar com níveis convergentes. Para qualquer destas regiões, estudaremos a evolução temporal nas vizinhanças de zonas que contenham dois ou três “avoided crossings”.

A evolução temporal sera feita utilizando o sistema de equações diferenciais Eq.(3.36) para as amplitudes de probabilidade, com o hamiltoniano do OQA Eq.(2.1) e a para  $\alpha$  como função do tempo. Na realidade o espectro do OQA tem um numero infinito de níveis de energia, no entanto para o caso do tratamento numerico o numero de elementos da representação matricial e escolhida finita, trabalhamos com uma matriz de  $400 \times 400$ , portanto temos 400 equações diferenciais acopladas, dos quais, as soluções das amplitudes de probabilidade correspondentes aos 125 primeiros níveis serão bons pelo criterio de convergencia da Fig.2.12.

A evolução temporal é feita no regime adiabático (pequenas velocidades), portanto o tempo será escalado segundo o tempo de tunelamento Zener  $\tau_Z$  dada pela Eq.(3.32).

Na região  $I_5$ , estudaremos a dinâmica dos “avoided crossings” contidos nas zonas  $A$  e  $B$  ilustradas na Fig.3.13a:

1) Zona  $B$ , popularemos inicialmente o nível  $E_{92}$ , e o sistema evoluirá com velocidade  $|\dot{\alpha}| = V_c/50$ , desde o valor  $\alpha^* = 9.21$  até 10.0. A evolução das amplitudes de probabilidade dos níveis vizinhos mais próximos ao nível  $E_{92}$ , é mostrada na Fig.3.17, assim como uma ampliação da zona  $B$  na Fig.3.18 mostrando os “avoided crossings” envolvidos na dinâmica.

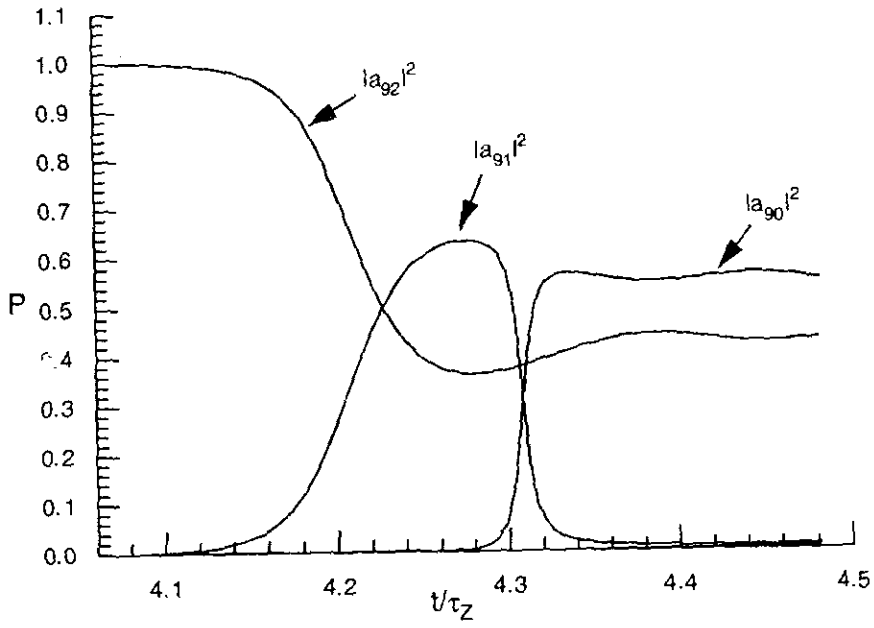


Fig.3.17

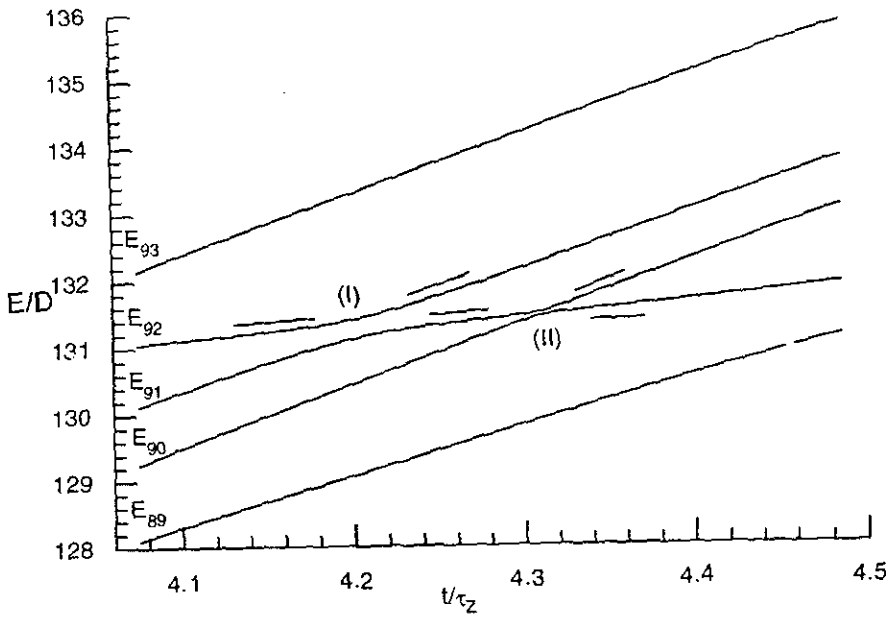


Fig.3.18

Observe-se o nível  $E_{92}$  populado inicialmente, sua população parece chegar a seu valor assintótico depois de passar pelo “avoided crossing” (I). Isto que não acontece com o nível  $E_{91}$  o qual é praticamente despopulado por encontrar-se imediatamente com o “avoided crossing” (II). Pode-se notar que se só fosse considerado o processo entre os níveis  $E_{91}$  e  $E_{90}$  no “avoided crossing” (II), pareceria que a conservação da população entre eles não estaria correta. No entanto as flutuações da população do nível  $E_{92}$  no tempo em que o sistema chega ao “avoided crossing” (II), confirma que ele ainda está em um processo de interação com o nível  $E_{91}$ . A aplicabilidade da teoria de Zener para esta zona de dois “avoided crossings” é falha pelo fato de que o nível  $E_{91}$  não chegou a seu valor assintótico antes de encontrar-se com o segundo “avoided crossing”. Isto é, não são consideradas interferências entre amplitudes.

2) Zona A, populamos inicialmente o nível  $E_{99}$ , o sistema vai do  $\alpha^* = 8.6$  até 9.7, com velocidade  $\dot{\alpha} = V_c/20$ , as populações e os “avoided crossing” neste processo são mostrados nas figuras 3.19 e 3.20,

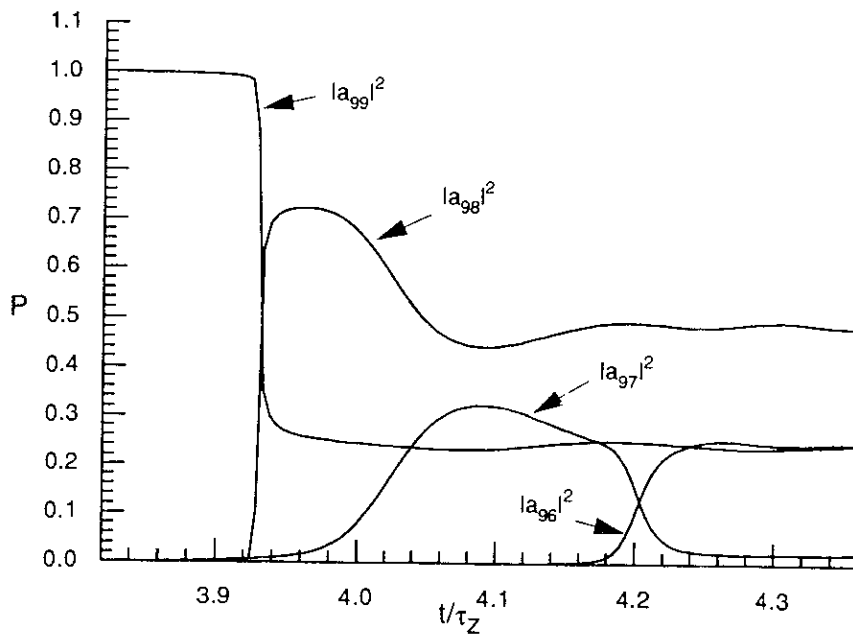


Fig.3.19

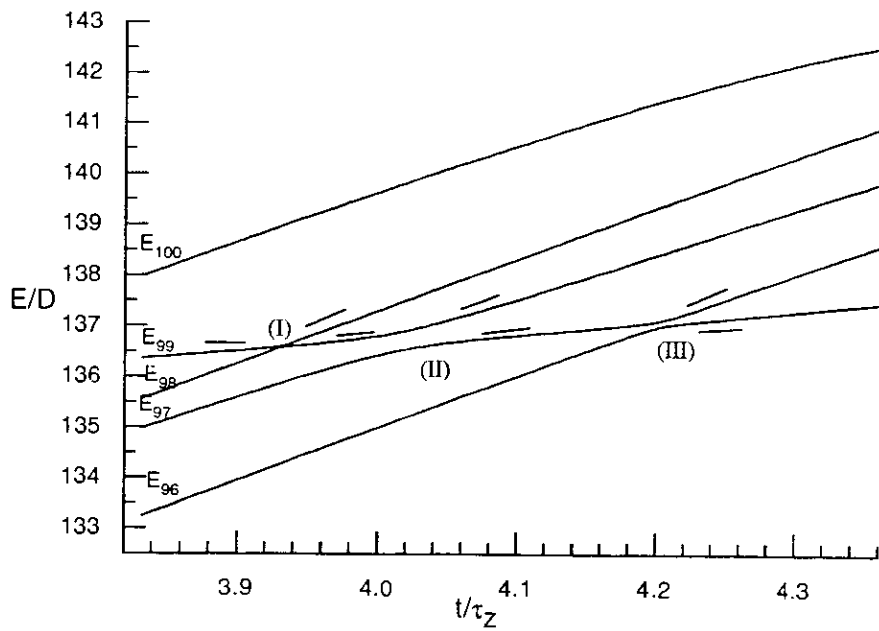


Fig.3.20

Neste caso temos que o nível  $E_{99}$  vai rapidamente para seu valor assintótico, por ser o “avoided crossing”(I) muito pronunciado. No entanto o “avoided crossing”(II) que aparentemente é fraco influencia muito na população do nível  $E_{98}$  dando um pulso considerável no valor de sua população no tempo em que o sistema chega ao “avoided crossing”(II), no qual o nível  $E_{96}$  começa a ser populado sem antes chegar a seu valor assintótico e é despulpada pelo “avoided crossing”(III).

Apresentamos dois casos mais na região  $I_6$  para as zonas C e D, ilustradas na Fig.3.13b. mostrando três “avoided crossings” consecutivos.

1) Zona D, o sistema populado inicialmente no nível  $E_{112}$  se move de  $\alpha^* = 14.2$  ate 15.3, com velocidade  $\dot{\alpha} = V_c/20$ . Os resultados mostramos nas Figuras 3.21 e 3.22

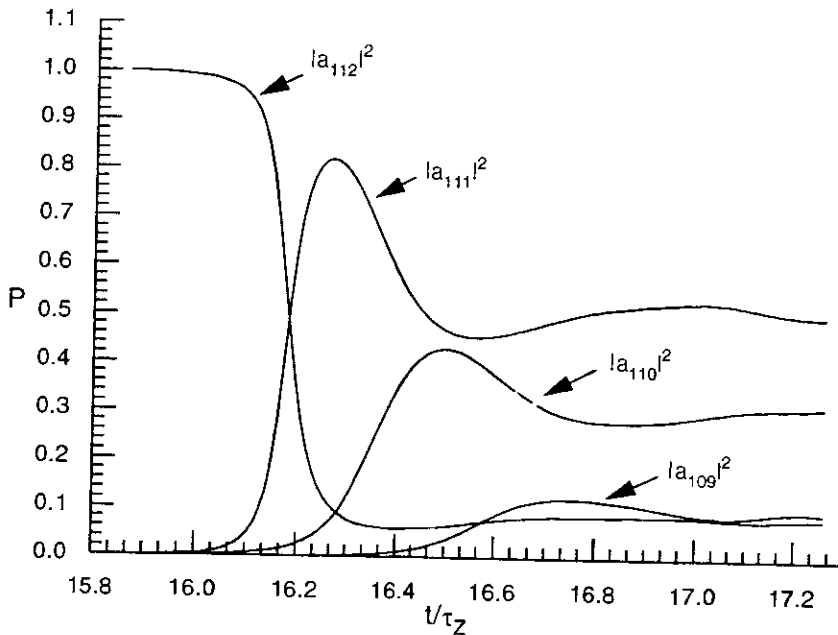


Fig.3.21

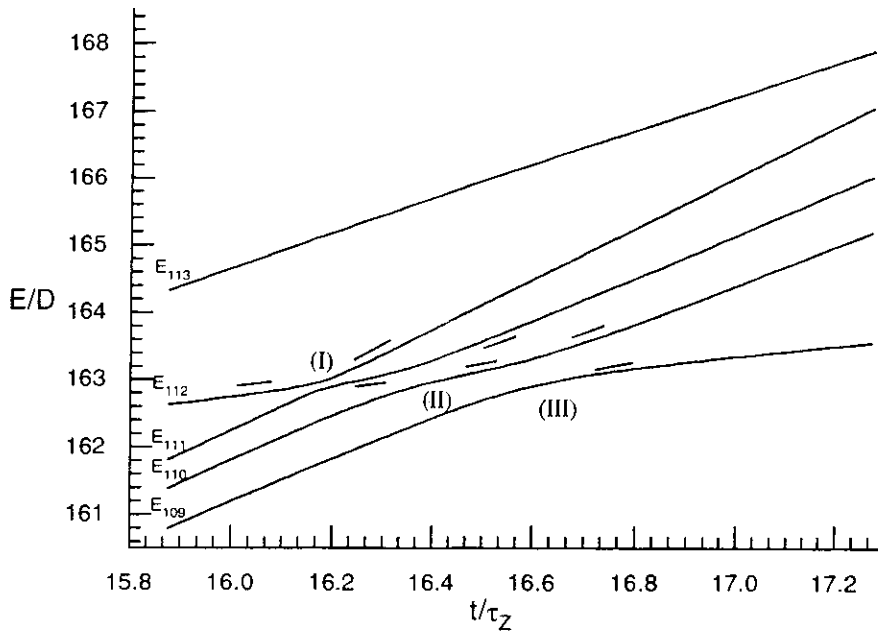


Fig.3.22

Entre outras características parecidas aos casos anteriores, como os “avoided crossing” (II) e (III) são fracos com gaps que não são muito menores que espaçamento médios de níveis, influencia muito nas populações dos níveis  $E_{111}$  e  $E_{110}$ .

2) Zona C, a dinâmica acontecerá entre  $\alpha^* = 10.5$  e  $\alpha^* = 11.8$ , com velocidade  $\dot{\alpha} = V_c/20$ , populando inicialmente o nível  $E_{120}$ . Nas figuras 3.23 e 3.24 mostramos o resultados.

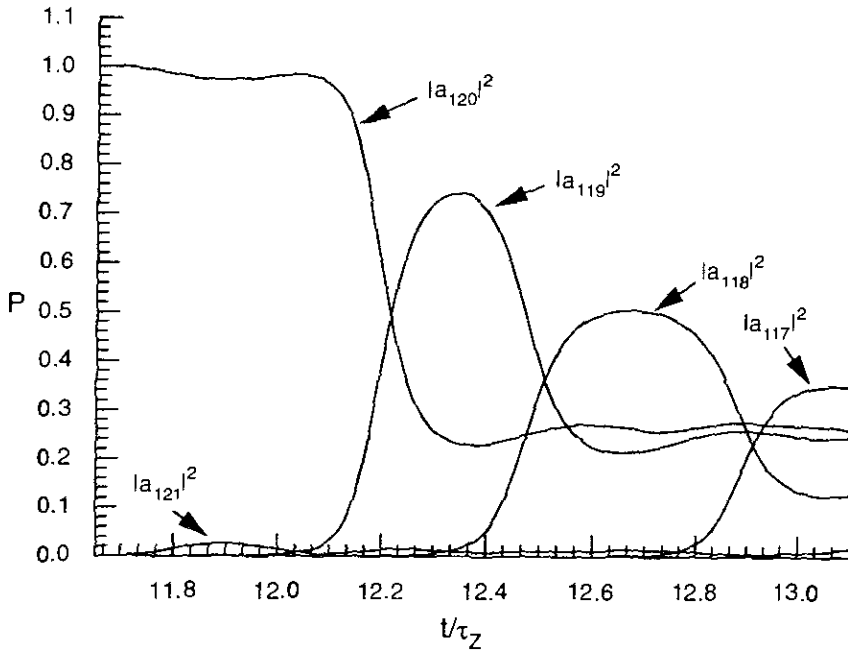


Fig.3.23

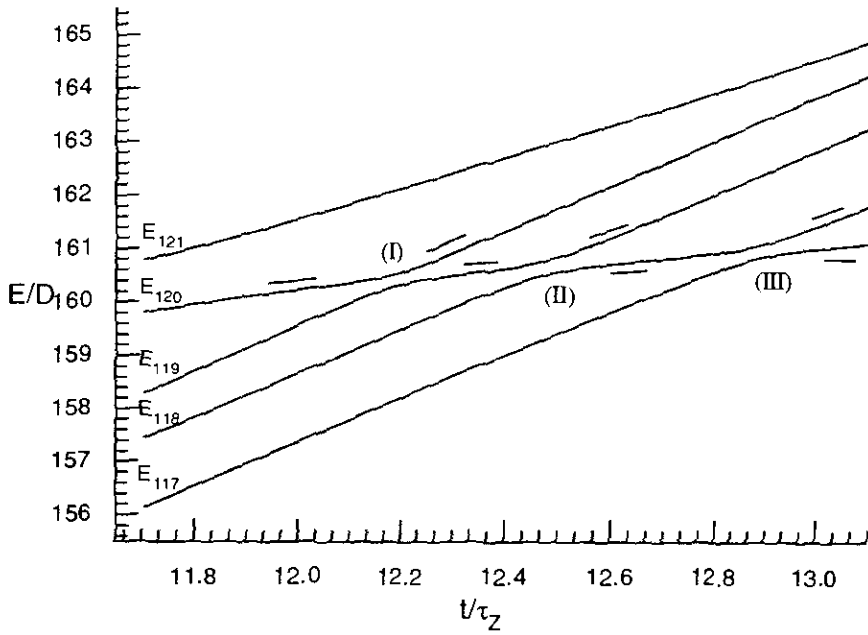


Fig.3.24



Neste caso ressaltamos também as grandes alterações das populações dos estados inicialmente vazios que passam por dois “avoided crossing” consecutivos. Esta característica se repetirá nas populações dos seguintes níveis se prolongamos o tempo de evolução. Isto é mostrado na Fig. 3.13b.

### 3.5 Crítica à teoria de Wilkinson

O primeiro que podemos dizer frente à hipótese de Wilkinson de aplicar o resultado encontrado por Zener para um “avoided crossing” isolado é que na prática, para um sistema realista como o OQA ou para o caso GOE, a aproximação não funciona muito bem. De fato, observando a estrutura do espectro tanto para o caso GOE como para o OQA, esta parece ser muito complexa para que cada “avoided crossing” seja parametrizado como uma hipérbola, o que põem em dúvida se na realidade os “avoided crossings” podem ser considerados isolados. Uma tentativa de parametrização poderia trazer muito erros nas populações finais, como foi feito para o caso GOE.

Aplicabilidade da fórmula de Zener para um sistema de “avoided crossings” implica que estes estejam isolados, uma vez que as amplitudes dos estados antes de chegar ao próximo “avoided crossing” devem alcançar seu valor assintótico (como no caso feito no capítulo 1 para os “avoided crossings” isolados). Pode-se observar dos resultados acima expostos que isto não acontece. Ter um espectro de “avoided crossing” isolados também implica que eles são bem definidos (hipérbolas). Ainda que num espectro realista também possa observar “avoided crossings” pronunciados, é certo que nas proximidades destes existem “avoided crossings” fracos que são difíceis de parametrizar e que influenciam muito as populações dos estados.

A velocidade com a qual se move o sistema faz que alguns “avoided crossing” possam ficar isolados no tempo, mas a estrutura geral do espectro apresenta diferentes distâncias

entre os “avoided crossings”. Assim existem casos nos quais, ainda que sendo a velocidade lenta (como os casos estudados) os cruzamentos de níveis não estarão isolados no tempo. Observe-se isto dos espectros escalados com o tempo de tunelamento Zener  $\tau_Z$ . Finalmente, permeando esta discussão a teoria de Wilkinson falha em levar em conta efeitos de interferência entre amplitudes de níveis distintos. Este certamente serão importantes quando consideramos sucessões de cruzamentos de níveis (fracos e fortes) não isolados.

### 3.6 Conclusões

Como primeira conclusão obtida desta análise para um sistema realístico caótico a estrutura do espectro em geral não apresenta “avoided crossings” isolados.

Outro ponto é a impossibilidade de obter uma boa parametrização dos “avoided crossings”. Elas não podem ser consideradas hipérbolas exatas.

A aplicabilidade da fórmula de Zener para um sistema realístico de muito níveis poderia neste caso dar resultados errados.

A escala de tempo onde estão acontecendo as transições entre dois “avoided crossings” para um processo adiabático não necessariamente é muito maior que o tempo de tunelamento Zener  $\tau_Z$ .

Pode-se esperar que a dependência da razão de transição com a potência  $3/2$  da velocidade para o caso GOE obtida por Wilkinson, seja incorreta para o caso de um sistema realístico como o estudado.

Esta investigação sugere que é necessário desenvolver uma teoria estatística mais sofisticada que a de Wilkinson para tratarmos o problema, incluindo termos de interferência.

Do ponto de vista numérico é necessário fazermos estudos mais quantitativos estudando a evolução da matriz densidade.

# Bibliografia

- [1] L. D. Landau, Phys. Z. Sov. **2**, 46 (1932).
- [2] C. Zener, Proc. R. Soc. (London) **A137**, 696 (1932).
- [3] M. Abramowitz e Stegun *Handbook Of Mathematical Functions*, (Doubleday, New York, 1972)
- [4] H. Bateman, *Special Functions* (Doubleday, New York, 1970)
- [5] W. Press, *Numerical Recipes in Fortran*, (Cambridge Univ. Press, Cambridge, England, 1992)
- [6] K. Mullen, E. Ben-Jacob, Y. Gefen, Z. Schuss, Phys. Rev. Lett. **62**, 2543 (1989)
- [7] B. Eckhardt, G. Hose, and E. Pollak, Phys. Rev. A **39**, 3776 (1989).
- [8] L. Cederbaum et al, Phys. Rev. A **33**, 4333 (1986)
- [9] M. C. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*, (Springer, New York, 1990).
- [10] M. Wilkinson, J. Phys. A **21**, 4021 (1988).
- [11] M. J. Sanches, E. Vergini, and D. A. Wisniacki, Phys. Rev. E **54**, 4812 (1996)
- [12] O. Bohigas, S. Tomsovic e D. Ullmo, Phys. Rep. **223**, 43 (1993).

- [13] M. Wilkinson, *Phys. Rev. A* **41**, 4645 (1990).
- [14] C. E. Porter, *Statistical Theory of Spectra: Fluctuations* (Academic Press, New York, 1965).
- [15] M. L. Mehta, *Rando Matrices and the Statistical Theory of Energy Levels*, (Academic Press, New York and London, 1967 )
- [16] O. Bohigas, Giannoni, Schmit, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1-4 (1984)
- [17] M.V.Berry and M.Tabor, *J. Phys. A* **10**, 371 (1977)
- [18] B. D. Simons e B. L. Altshuler, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 4063 (1993),
- [19] H.Bruus, C.H.Lewenkopf e E.R.Mucciolo, *Phys Rev B* **53**, 9968 (1996).


# **“TEORIA DE LANDAU-ZENER PARA SISTEMAS CAÓTICOS”**

***Luis Alberto Peche Puertas***

Tese de Mestrado apresentada no Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico, fazendo parte da Banca Examinadora os seguintes professores:



Caio H. Lewenkopf - Presidente



Mario Basílio de Matos



Alfredo Miguel Ozório de Almeida



Anibal Omar Caride



Ivan dos Santos Oliveira Junior - Suplente

Rio de Janeiro, 16 de novembro de 1998