

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE FÍSICA

Caos quântico e localização de Anderson em um rotor perturbado

Max Akira Endo Kokubun

Trabalho de Conclusão de Curso realizado sob a orientação da professora Sandra Prado e financiado pelo programa de bolsas de iniciação científica PIBIC-CNPQ

Índice:

<u>1. Introdução</u>	3
<u>2. Sistema clássico</u>	5
<u>3. Caos quântico</u>	10
<u>4. Mapa quântico</u>	12
<u>5. Localização de Anderson e analogia com o rotor forçado</u>	18
<u>6. Observações experimentais de localização</u>	24
<u>Bibliografia</u>	28

Introdução:

Em 1917, Albert Einstein escreveu um artigo [1] que foi completamente ignorado por 40 anos. Nele, foi levantada uma questão que apenas recentemente os físicos começaram a se questionar: o que o caos clássico, que semeia em quase qualquer de nosso mundo, faria com a mecânica quântica, a teoria que descreve os mundos atômicos e subatômicos?

Talvez a característica mais fenomenal do mundo quântico é sua natureza suave e ondulatória. Essa característica levou à questão de como é possível o caos pode aparecer na transição clássico-quântico? Como o caráter irregular do caos clássico pode ser conciliado com a natureza suave e ondulatória dos fenômenos em escala atômica? Será que o caos existe no mundo quântico?

Essas perguntas serão respondidas sucintamente nesse trabalho, como uma introdução ao estudo de um fenômeno que fascina os físicos desde o fim da década de 50: a localização de Anderson.

A localização de Anderson é um fenômeno fascinante e amplamente estudado desde sua descoberta por P.W. Anderson [2] e consiste em idéias apresentadas no contexto do estudo de funções de onda eletrônicas em potenciais de rede desordenados, aleatórios.

Um estudo do começo dos anos 80 [3,4] demonstrou que é possível modelar um sistema, que é classicamente caótico, (o rotor forçado) em um problema de Anderson, e estudar a partir desse modelo mais simples uma dinâmica rica em questões em aberto, e altamente recorrente em prestigiadas revistas internacionais, tais como a Physical Review Letters. A contraparte quântica do rotor forçado apresenta traços característicos de sistemas quânticos que classicamente são caóticos [5, 6, 7].

O cerne da questão é que o rotor forçado é um sistema determinístico. Não existe nenhum traço de aleatoriedade em seu modelo, mas mesmo assim o relacionamos com um problema diametralmente oposto: potenciais aleatórios.

Toda a discussão feita atualmente frente ao rotor forçado leva em consideração argumentos físicos, observações experimentais e embasamento via teoria de Floquet. O tratamento matemático é demasiado avançado e complexo, sendo particular para cada potencial dado. Não é objetivo desse trabalho demorar-se em análises quantitativas sobre potenciais aleatórios, o rotor forçado e a localização de Anderson. As argumentações serão majoritariamente físicas e será deixado que as simulações numéricas e os resultados experimentais existentes na literatura convençam, pelo menos em parte, o leitor de que sim, podemos fazer uma analogia entre os sistemas.

Sistema Clássico:

Iremos brevemente apresentar o sistema clássico e serão feitas algumas observações frente a existência de caos.

O sistema fechado e não perturbado consiste em uma partícula movendo-se ao longo de um círculo. Tal hamiltoniana é trivial e dada por:

$$H_0 = \frac{J^2}{2I}$$

Onde J é o momento angular da partícula e I seu momento de inércia.

Agora supomos que adicionamos uma perturbação externa periódica aplicada à uma distância l do pivô, e seu período é τ . Note, aqui estamos considerando que o momento angular é constante e aumenta de acordo com o torque aplicado ($Fl\cos\theta = k\cos\theta$) a cada *kick*.

Então, a hamiltoniana perturbada periodicamente pode ser expressa como:

$$H = \frac{J^2}{2I} + \kappa \cos\theta + \sum_n \delta(t - n\tau)$$

Aonde temos θ como a coordenada angular da partícula.

Fazendo a escolha (por conveniência) $l/\tau = 1$ e utilizando-se das variáveis rescaladas q e p (mod-1):

$$q = \frac{\theta}{2\pi}$$

$$p = \frac{J\tau}{2\pi I}$$

Podemos reescrever a hamiltoniana como:

$$H = \frac{p^2}{2} + \frac{\kappa}{(2\pi)^2} \cos(2\pi q) \sum_n \delta(t - n)$$

Dessa forma podemos nos utilizar das equações de Hamilton para obter um 'mapa':

$$q_{t+1} = q_t + p_{t+1}$$

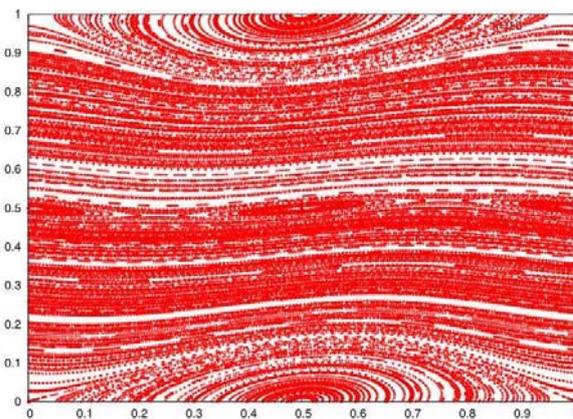
$$p_{t+1} = p_t + \frac{\kappa}{2\pi} \sin(2\pi q_t)$$

Esse mapa é conhecido com o *mapa padrão de Chirikov* e é extensamente estudado no contexto da teoria do caos (por exemplo, [2]).

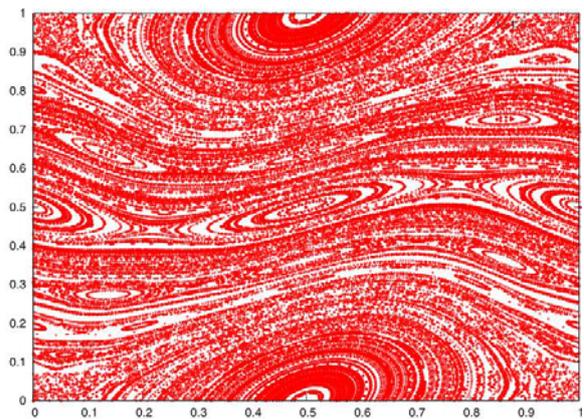
Tal sistema é especialmente muito útil no estudo das transições de sistemas Hamiltonianos de comportamentos regular à caóticos, quando mudamos um parâmetro de controle.

O estudo qualitativo desse mapa é feito majoritariamente via cortes no espaço de fases para diferentes valores do parâmetro de controle (nesse caso, κ)

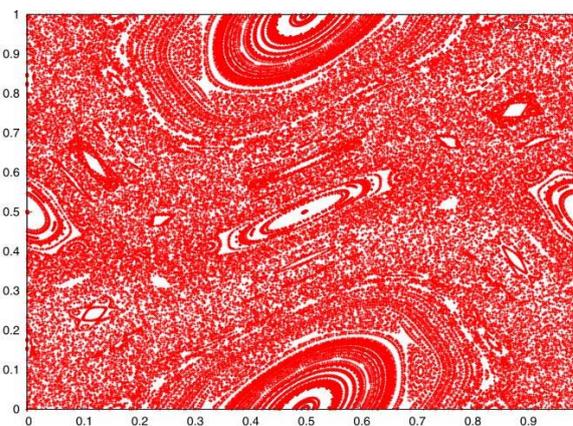
Abaixo seguem algumas dessas seções:



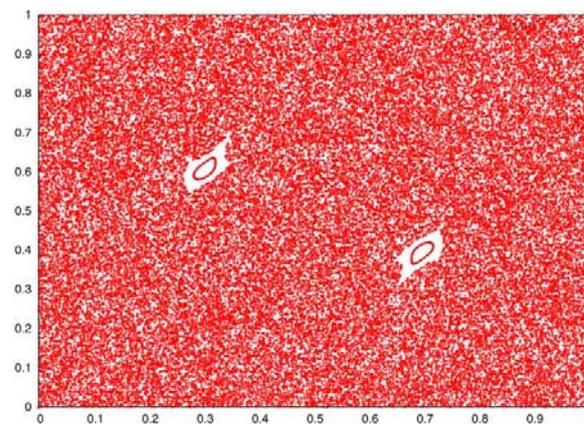
(a)



(b)



(c)



(d)

Fig 2.1: cortes no espaço de fases do mapa de Chirikov para valores de κ iguais à (a) 0.5: espaço de fases bem regular (b) 1,5: espaço de fase começa a apresentar quebras de regularidade para algumas ilhas de condições iniciais; (c) 2,5: processo difusivo ilimitado é possível após a quebra do último toro de KAM; (d) 11: espaço de fases é completamente caótico, apesar de pequenas ilhas de estabilidade sobreviventes

Uma análise interessante e que será de grande valia (em termos de comparação mais a frente) é a do comportamento difusivo do transporte de momento angular.

Estamos interessados aqui no transporte de um *ensemble* de trajetórias no espaço de fases. Vamos nos restringir no caso de *caos forte* (valores elevados de κ). Como quase todo o espaço de fases é caótico, é esperado que todas as trajetórias “pulem” erraticamente pelo espaço de fases de maneira aleatória, muito parecido com o comportamento realizado por um caminhante aleatório¹. Por essa analogia, esperamos que o transporte seja *difusivo* (ou seja, se considerarmos uma distribuição inicial qualquer de trajetórias no espaço de momento é esperado que tal distribuição tenda a uma gaussiana). Da mesma maneira, se considerarmos o valor médio da energia cinética (ou, equivalentemente, a variância do momento) deve crescer linearmente com o tempo.

Podemos obter o valor médio da energia de maneira muito simples algebricamente. Se consideramos o cenário de *caos forte*, então a expressão para a energia média é dada por:

$$E_n = \left\langle \frac{(\Delta P)^2}{2} \right\rangle = \frac{\kappa^2}{8\pi} n$$

*'n' é o contador temporal

Podemos notar o crescimento linear da energia cinética média, como era esperado.

Na figura a seguir, tal comportamento é mostrado:

¹Conhecido na literatura em língua inglesa como “random walk”.

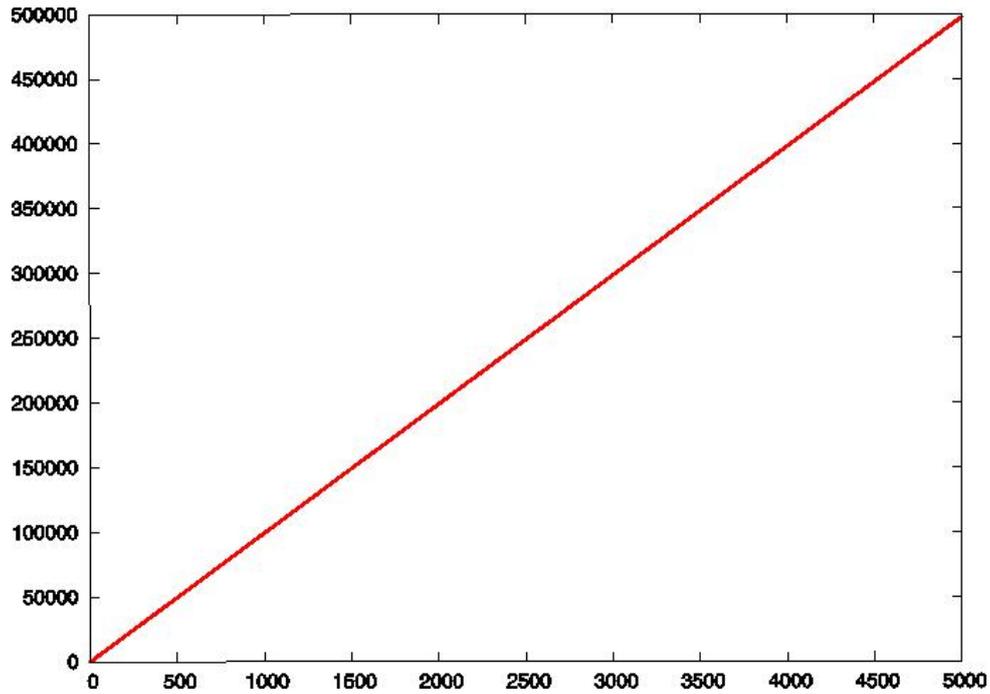


Fig 2.2: energia média X número de 'kicks'. Utilizada a condição inicial $(x_0, p_0) = (0.751, 0.123)$

Podemos também calcular a distribuição de momentos:

Seja a distribuição de momentos uma medida da probabilidade de que após N iterações (kicks) a diferença $(P_n - P_0)$ seja de ΔP , quantitativamente:

$$f_N(\Delta P) = \langle \delta(\Delta P - P_N + P_0) \rangle$$

- *Aonde estamos tirando uma média entre diferentes condições iniciais*

Utilizando propriedades da função delta e as aproximações de que para altos valores de κ os sucessivos valores de q_n não estão correlacionados e ainda considerando que o regime que nos interessa é o após muitos kicks (valor alto de N), podemos obter a seguinte expressão:

$$f_N(P) = \frac{2\pi}{\kappa\sqrt{\pi N}} \exp\left(-\frac{4\pi^2(\Delta P)^2}{\kappa^2 N}\right)$$

A seguir plotamos para $\kappa = 7$ o logaritmo da distribuição:

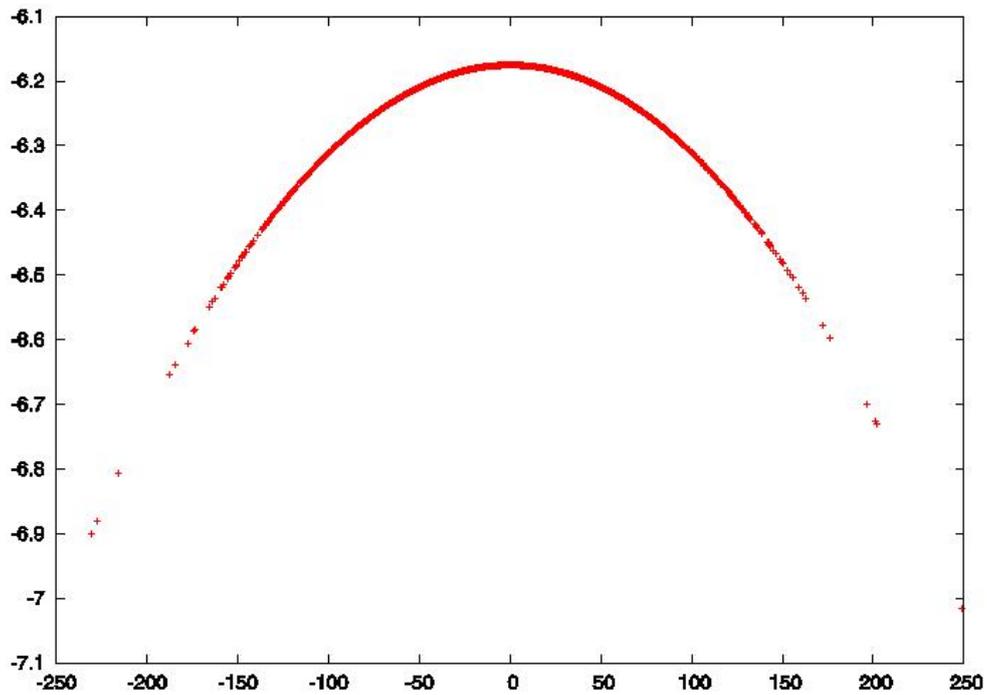


Fig 2.3: Logaritmo da distribuição de momentos X momento

Podemos ver claramente o comportamento difusivo esperado típico de um processo do tipo *random walk* (coloca-se aqui um porém: o sistema é determinístico, mas ao que concerne aos nossos propósitos comporta-se de maneira *pseudo-aleatória*). O mapa padrão de Chirikov é um sistema caótico típico para altos valores do parâmetro de controle κ .

Como veremos a seguir, esse comportamento difusivo, quando passamos para a contraparte quântica do sistema, não é observado [9], levando ao fenômeno da localização dinâmica.

Caos Quântico

Começamos esse capítulo com uma pergunta fundamental: será que é possível observarmos a existência de caos no mundo quântico? [10,11]

A resposta é sim – sintomas de caos aparecem até nos padrões de onda associados aos níveis de energia atômicos.

Esse capítulo será dedicado a introduzir a idéia de como se procede no tratamento do caos no mundo quântico e algumas evidências fortes de que sim, é possível observar a transição de comportamento entre regular e caótico na contraparte quântica de um sistema classicamente caótico.

Ao pensar-se no conceito de caos, como o conhecemos mais comumente, é natural defini-lo em termos da separação de trajetórias, ou seja, a existência de sensibilidade exponencial às condições iniciais. Mas quanticamente não existe propriamente o conceito de trajetória – afinal, elas não estão definidas!

Foi mostrado anteriormente que uma das maneiras mais usuais de se estudar o fenômeno de caos em sistemas hamiltonianos clássicos é o estudo direto dos espaços de fase. Quanticamente nosso *espaço de fases* fica quantizado em unidades de \hbar devido ao princípio da incerteza!

Classicamente, um requerimento básico para se observar caos é que as equações que regem o comportamento do sistema em questão apresentem uma não-linearidade. Quanticamente, a evolução do sistema é dada pela equação de Schrödinger – uma equação linear!

Poderíamos a partir dessas três observações fundamentais argumentar que não existe caos na Mecânica Quântica – pelo menos não no sentido que aplicamos classicamente. Mas então como fica o princípio da correspondência de Bohr? Esse princípio, formulado por Niels Bohr em 1923, pode ser resumido em uma frase: *A teoria quântica deve se aproximar da clássica assintoticamente no limite de grandes números quânticos, ou seja, quando $\hbar \rightarrow 0$*

O fato é que o caos, quanticamente, não é tratado da mesma maneira que classicamente. De fato, o estudo de caos quântico procede-se através do limite semiclássico de sistemas cujos análogos clássicos sejam caóticos.

Análise quântica

Assim como no estudo do sistema clássico, podemos definir um “*mapa*” quântico através de um operador que é o responsável pela evolução temporal do sistema em estudo.

Nesse trabalho propõe-se o estudo de um sistema com hamiltoniano dependente do tempo. Tal hamiltoniano é o responsável pela evolução do sistema.

Será mostrado em seguida as “assinaturas” do caos clássico no sistema quântico em questão. Mostrar-se-á as propriedades universais e particulares da contraparte quântica de tais sistemas e uma análise em um contexto aparentemente diferente será feita para demonstrar um resultado a princípio paradoxal, além de serem utilizados argumentos físicos, resultados numéricos e dados experimentais (existentes na literatura) para fazer um paralelo com outro problema físico de grande interesse: a localização de Anderson. Tais resultados são obtidos essencialmente estudando-se o espectro de auto-energias e autofunções de um operador que comuta com o hamiltoniano: o operador de Floquet.

Mapa Quântico

O hamiltoniano do sistema quântico é obtido através do hamiltoniano clássico, simplesmente transformando as coordenadas q e p em operadores, e tomando-se o tempo como parâmetro.

Sendo assim, obtemos o hamiltoniano quântico:

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar_{eff}}{(2\pi)^2} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{\kappa}{(2\pi)^2} \cos(2\pi q) \sum \delta(t - n)$$

Onde $\hbar_{eff} = \frac{\hbar}{(2\pi)^2}$ é a constante de Planck reescalada, obtida através da regra de quantização:

$$[q, p] = i \frac{\hbar}{(2\pi)^2} = i \hbar_{eff}$$

O ponto importante aqui é que o hamiltoniano depende explicitamente do tempo, ou seja, não podemos mais resolver a equação de Schrödinger independente do tempo em termos de um *ansatz* de separação da forma

$$\psi_n(x, t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} E_n t\right) \psi_n(x)$$

E, conseqüentemente, a energia E não é mais uma constante de movimento.

Mas o hamiltoniano ainda é invariante frente um *shift* discreto de tempo τ . Isso nos possibilita achar soluções $\psi_n(x, t)$ da equação de Schrödinger dependente do tempo que são simultaneamente autofunções do operador de *shift* correspondente \mathcal{F}_τ . Esse operador é o chamado *operador de Floquet*, e é um operador unitário, isso implica que seus autovalores são da forma $\lambda_n = e^{-i\phi_n}$, ou seja, estão distribuídos ao longo de um círculo unitário.

A expressão para o operador de Floquet é dada por:

$$\mathcal{F} = e^{-\frac{i}{\hbar_{eff}} \int dt' \mathcal{H}(t')}$$

Devido ao fato da interação da força externa ser instântanea, pode-se aproximar o operador de Floquet como o produto de operadores evolução, onde um corresponde à livre-rotação e o outro a interação¹:

$$\mathcal{F} = \mathcal{B}(q)G(p)$$

Teremos a expressão geral para \mathcal{F} como sendo:

$$\mathcal{F} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar_{eff}} \frac{\kappa}{(2\pi)^2} \cos(2\pi q)\right) \exp\left(-\frac{i}{\hbar_{eff}} \frac{\tau}{2} p^2\right)$$

Expressando na base de momento: $|n\rangle = e^{-in2\pi q}$

Obtemos:

$$\mathcal{F}_{nm} = \langle n|\mathcal{F}|m\rangle = \exp\left(-\frac{i}{\hbar_{eff}} \frac{\tau}{2} m^2\right) i^{m-n} J_{m-n}\left(\frac{\kappa}{4\pi^2 \hbar_{eff}}\right)$$

Nessa base apenas os elementos matriciais perto da diagonal principal serão significativos, visto que as funções de Bessel decaem rapidamente com o aumento de sua ordem.

Nesse trabalho, por questões numéricas, utilizaremos a expressão de \mathcal{F} na base de posição:

$$(\mathcal{F}_N)_{q'q} = \langle q_{j'}|\hat{\mathcal{F}}_N|q_j\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \exp\left[\frac{i\pi}{N} (j' - j)^2 - \frac{i\kappa N}{2\pi} \cos\left(\frac{2\pi}{N} j\right)\right]$$

*onde $|q_j\rangle$ é um autoestado discreto de posição com autovalor associado $q_j = j/N$ com

$$j=1,2,3,\dots,N$$

O número N de autoestados de posição discretos determina a dimensão da matrix de Floquet. Devido ao fato do espaço de fases ser um torus bidimensional, as funções de onda devem satisfazer condições periódicas de contorno: $\psi(q + j) = \psi(q)$ e $\hat{\psi}(p + k) = \hat{\psi}(p)$, aonde j e k são números inteiros. Devido à quantização do espaço de fases, o valor efetivo da constante de Planck será igual à $1/2\pi N$

Com a expressão dada acima, podemos acompanhar a evolução de uma função de onda inicial qualquer no espaço de posição.

¹Aqui frisa-se que o operador de Floquet é da forma e^{A+B} , onde A e B são operadores que não comutam, logo, não é possível, rigorosamente, realizar a fatoração $e^A e^B$, mas fazemos uso do fato da interação ser instantânea, realizamos tal aproximação

Utilizando métodos numéricos estudamos essa evolução através de propriedades espectrais: autovalores (que fazem o papel de *quasi-energias*) e autovetores (que formam uma base para os autovetores do hamiltoniano).

Um ponto importante, e que deve ser analisado antes de ser dada continuidade é em relação a paridade dos autovetores. O sistema em si é simétrico frente à uma transformação de paridade, logo, os autoestados do operador de Floquet devem satisfazer: $\psi_\alpha(-q_j) = \pm \psi_\alpha(q_j)$

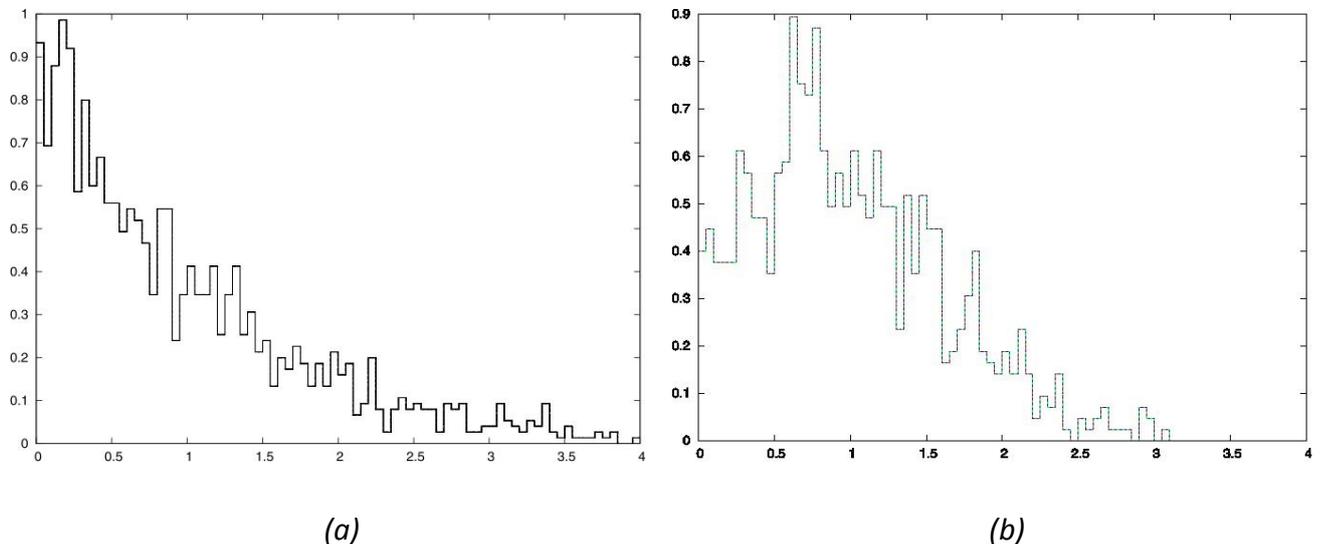
Como a função de onda deve satisfazer condições de contorno periódicas, temos que:

$$\psi(-q_j) = \psi(1 - q_j) = \psi(q_{N-j})$$

Como a paridade é um “bom” número quântico, as *quasi-energias* que obtemos diagonalizando a matriz de Floquet formam uma mistura de sequências independentes. Faz-se importante, então, utilizarmos apenas autoestados de mesma paridade para realizarmos a estatística.

Utilizando-se do critério de que a soma: $\sum_{j=1}^{N-1} |\psi_\alpha(q_j) + \psi_\alpha(q_{N-j})|^2$ será nula se o autoestado for par, separamos as autoenergias correspondentes aos estados pares, apenas. Assim, a estatística será feita somente sobre os autovalores pares.

Em seguida, mostramos alguns resultados numéricos da distribuição estatística dos autovalores de \mathcal{F} , para diferentes casos de valores do parâmetro de controle κ :



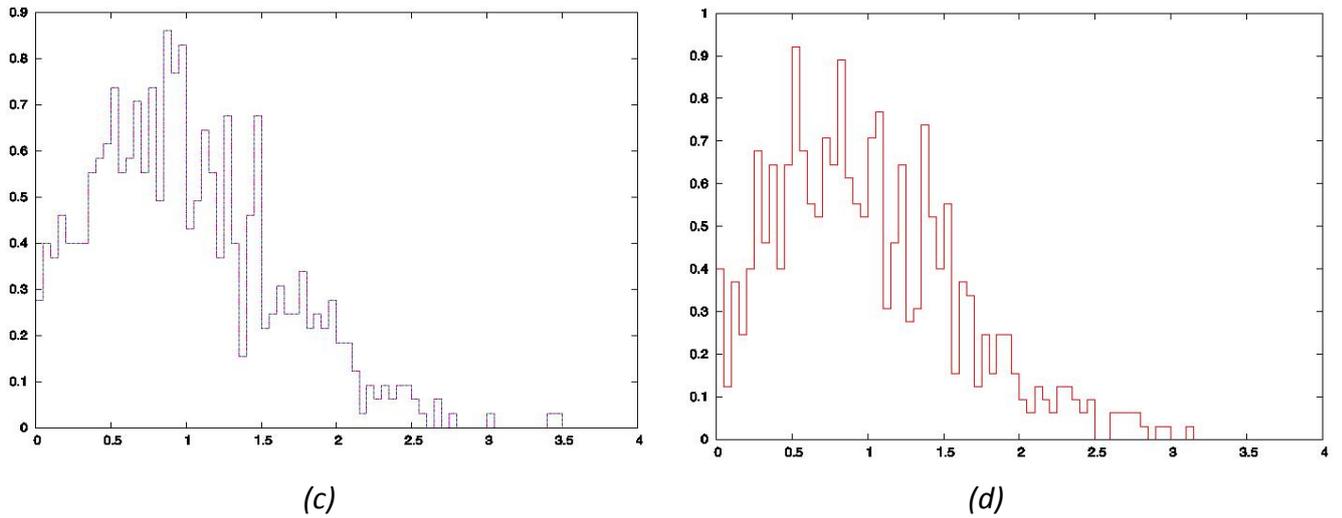


Fig 4.1: (a) $k=1$; (b) $k=2.5$; (c) $k=5$; (d) $k=7$.

O que foi calculado foi a probabilidade de encontrarmos valores consecutivos das *quasi-energias* próximos ou afastados.

Note que para valores baixos de κ (que correspondem ao caso regular, sem caos) as *quasi-energias* tendem a ficarem próximas. Enquanto que para o caso de κ elevado (que corresponde ao caso da existência de caos forte no sistema clássico) os autovalores tendem a se repelir.

De uma maneira um tanto quanto paradoxal quando a contraparte clássica do sistema é não-caótica os níveis de energia estão distribuídos aleatoriamente e sem correlação, enquanto que os níveis energéticos de um sistema quântico cuja contraparte clássica é caótica exibem uma forte correlação. Os níveis do sistema regular costumam estar perto uns dos outros, devido ao fato de um sistema regular ser composto por subsistemas menores que são completamente desacoplados. Os níveis energéticos de um sistema caótico, entretanto, quase que parecem saber da existência uns dos outros, e tentam manter distância entre si.

O espectro das *quasi-energias* no caso fortemente caótico segue a distribuição de Wigner (originária da física nuclear, utilizada para estudar as propriedades estatísticas do espectro nuclear), que é dada por:

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

Já quando o valor do parâmetro é baixo, observamos que a distribuição espectral segue uma distribuição de Poisson, dada por:

$$P(s) = e^{-s}$$

Note a seguir a concordância quando sobrepomos os resultados:

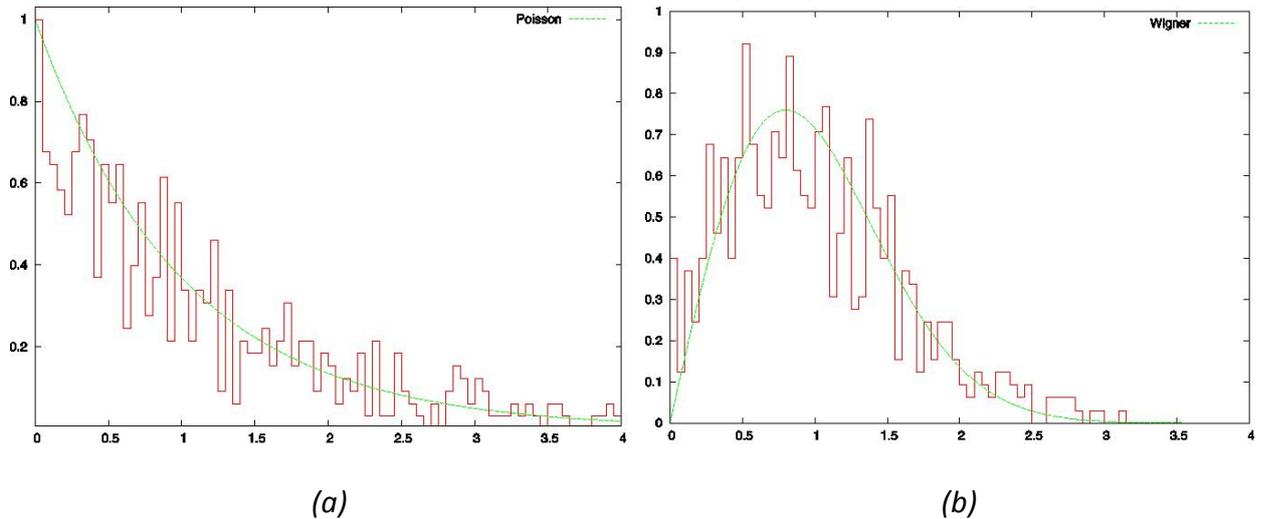


Fig 4.2: (a) Poisson e 'k' baixo; (b) Wigner e 'k' alto

É interessante notar como as estatísticas, inicialmente obedecendo uma distribuição de Poisson, acabam indo em direção à distribuição de Wigner quando variamos o valor do parâmetro κ . Essa diferença nas estatísticas nos fornece um *insight* sobre a manifestação de caos em sistemas quânticos cujas contrapartes clássicas sejam caóticas, já que variando o parâmetro κ no sistema clássico passamos de um regime regular à um que é completamente caótico.

Esse assunto é extenso na literatura e boas referências podem ser obtidas na bibliografia ao final desse trabalho.

O efeito mais significativo que será analisado por esse trabalho é o da *localização dinâmica*. Esse efeito foi originalmente descoberto em estudos desse mesmo modelo [9].

Foi calculado anteriormente, para o sistema clássico, a difusão da energia para o caso em que o valor do parâmetro κ é elevado (caos forte). Foi visto que o rotor comporta-se, para nossos fins, como um processo *random-walk*.

Localização de Anderson

Será dada agora uma breve introdução [12] sobre um assunto aparentemente sem relação com o sistema do rotor forçado: o estudo de funções de onda eletrônicas em uma rede cristalina desordenada. Começamos com uma rede unidimensional com átomos igualmente espaçados a uma distância 'd'. O hamiltoniano desse sistema é dado por:

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad 5.1$$

Aonde $V(x)$ é o potencial na rede. Resolvemos esse hamiltoniano aplicando uma *aproximação de ligação forte*: assumimos que o elétron interage fortemente com um átomo por vez em um dado tempo, enquanto que a interação com os outros átomos é fraca. Então a função de onda eletrônica pode ser expressa em termos de uma combinação linear das autofunções de um único átomo:

$$\psi(x) = \sum_n a_n \psi_0(x - nd) \quad 5.2$$

Onde a soma é feita sobre todas as posições da rede. Se utilizarmos esse *ansatz* na equação de Schrödinger, e considerarmos que o *overlap* das funções de onda sobre diferentes sítios pode ser desprezado:

$$\int \psi_0^*(x - nd) \psi_0(x - md) dx = \delta_{nm}$$

obtemos:

$$\sum_{k \neq n} W_{nk} a_k + E_n^0 a_n = E a_n \quad 5.3$$

Aonde:

$$E_n^0 = \int \psi_0^*(x - nd) \mathcal{H} \psi_0(x - nd) dx$$

$$W_{nk} = \int \psi_0^*(x - nd) \mathcal{H} \psi_0(x - kd) dx$$

Para potenciais periódicos, E_n^0 é independente de n , e os valores de W_{nk} dependem exclusivamente da diferença $(n - k)$. Nesse caso a função de onda pode ser escrita como uma função de Bloch:

$$\psi(x) = e^{ikx} u_k(x)$$

* $u_k(x)$ é uma função periódica.

Levando ao bem conhecido modelo eletrônico de bandas de um sólido cristalino (potenciais periódicos na rede levando à funções de onda periódicas no espaço).

Se o arranjo periódico é perturbado por uma desordem, então estamos frente ao *modelo de Anderson* [2]. Há na literatura uma vastidão de artigos sobre o modelo de Anderson, aqui será apresentado apenas o principal resultado sobre o modelo: em sistemas unidimensionais, *todas* as funções de onda estão localizadas em uma região da rede, mesmo com uma desordem quase-nula. A localização é causada por interferência destrutiva quântica devido à um retroespalhamento coerente pelas impurezas.

Em meados de 1982-1984 foi mostrado [3,4] que é possível modelarmos o rotor forçado como um problema de Anderson e estudarmos nesse modelo (simples e completamente diferente) diversos fenômenos que intrigam a área do caos quântico. Especificamente, o fenômeno de localização dinâmica, que foi citado na análise clássica do sistema, está fortemente ligado com a localização de Anderson [3].

Começemos com um hamiltoniano de Floquet genérico:

$$\mathcal{H}(t) = K(p) + V(q) \sum_n \delta(t - n) \tag{5.4}$$

Onde $K(p)$ e $V(q)$ são funções arbitrárias de momento angular e ângulo, respectivamente. O operador de Floquet correspondente é dado por:

$$\mathcal{F} = e^{-iV(q)} e^{-iK(p)}$$

Na base de 'p' os elementos matriciais de \mathcal{F} serão dados por:

$$\mathcal{F}_{nm} = e^{-iK(m)} J_{n-m}$$

$$\text{Com } J_{n-m} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-iV(q)} e^{inq} dq$$

A notação indica que J_n pode ser considerada como uma função de Bessel generalizada. Para o rotor forçado, J_n se reduz em uma função de Bessel ordinária.

Agora, vamos assumir que

$$A = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

É um autovetor de \mathcal{F} associado à autofase ϕ , ou seja:

$$\mathcal{F}A = e^{-iV(q)} e^{-iK(p)} A = e^{-i\phi} A \quad 5.5$$

Se realizarmos a seguinte substituição:

$$e^{-iV(q)} = \frac{1 + iW(q)}{1 - iW(q)}$$

$$\text{Com } W(q) = -\tan \frac{V(q)}{2}$$

Então a equação de autovalores de \mathcal{F} pode ser expressa como:

$$(1 + iW)e^{i(\phi-K)} A = (1 - iW)A \quad 5.6$$

Se introduzirmos um novo vetor:

$$\bar{A} = (e^{i(\phi-K)} + 1)A$$

Que é o antigo autovetor transladado pelo operador $e^{i(\phi-K)}$. Dessa forma, obtemos:

$$\frac{e^{i(\phi-K)} - 1}{e^{i(\phi-K)} + 1} \bar{A} + iW\bar{A} = 0$$

Ou, equivalentemente:

$$\tan\left(\frac{\phi-K}{2}\right)\bar{A} + W\bar{A} = 0 \quad 5.7$$

E se nos utilizarmos de uma transformada de Fourier em W :

$$W_n = \int_0^1 W(q)e^{-in2\pi q} dq$$

Podemos reescrever a equação (5.7) como:

$$\sum_{k \neq n} W_{n-k} \bar{a}_k + E_n^0 \bar{a}_n = E \bar{a}_n \quad 5.8$$

Onde E_n^0 e E são dados por:

$$E_n^0 = \tan\left(\frac{\phi - K(n)}{2}\right)$$

e

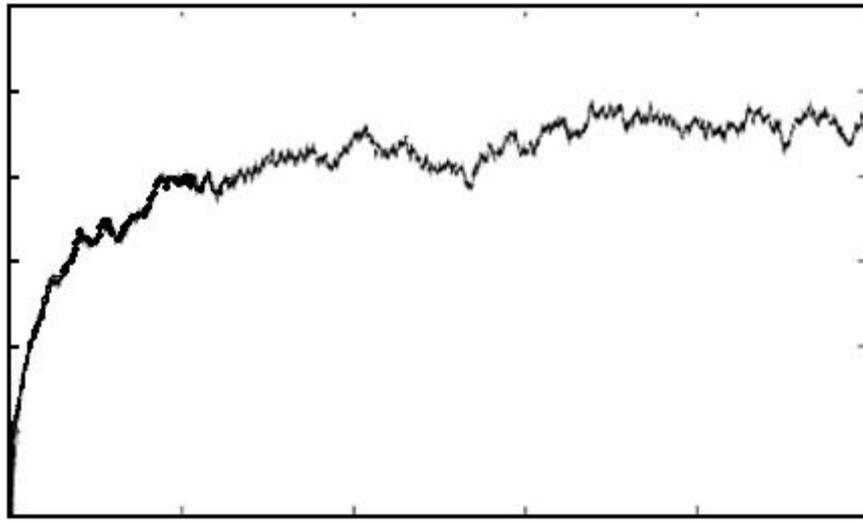
$$E = -W_0$$

A equação (5.8) corresponde a um hamiltoniano fortemente ligado com forças de ligação W_{n-k} dependendo apenas da distância entre os sítios vizinhos 'n' e 'k', e com energias dependentes dos sítios E_n^0 .

Note que se utilizarmos $K(p) = \frac{p^2}{2}$ e $V(q) = \frac{\kappa}{2\pi} \cos(2\pi q)$ estamos no caso do rotor forçado. Dessa maneira, fomos capazes de modelar o rotor forçado em um modelo de Anderson.

Os potenciais aleatórios presentes no modelo de Anderson aqui se fazem aparecer na sequência pseudo-aleatória $\{E_n^0\}$. As diversas simulações numéricas e dados experimentais sugerem que o efeito de localização aparece no sistema do rotor, mesmo que a sequência seja pseudo-aleatória e não aleatória como demonstrado inicialmente por Anderson em seu famoso artigo [2].

O fenômeno de localização dinâmica (ou localização de Anderson) é facilmente visto no rotor forçado se agora procedermos com o cálculo do valor esperado do operador P^2 (assim como foi feito para o caso clássico).



Podemos observar que a difusão quântica ‘segue’ a clássica até certo ponto [9], quando começa seu processo de saturação, até finalmente parar.

Note que, diferentemente do caso clássico, a distribuição de momentos angulares possui uma forma do tipo exponencial [13,14]:

$$f_N(P) = \frac{1}{l_s} \exp\left(-\frac{2|P|}{l_s}\right)$$

Com um comprimento de localização l_s .

É possível realizar uma análise qualitativa dessa saturação da difusão. Se diagonalizamos o operador de Floquet por meio de uma transformação unitária:

$$\mathcal{F}_{ln} = \sum_k e^{-i\phi_k} U_{kl}^* U_{kn}$$

O valor esperado de P^2 após N ‘kicks’ é dado por:

$$\langle P^2 \rangle = A_N^\dagger P^2 A_N \quad 5.9$$

E como também temos que $A_N = \mathcal{F}^N A_0$, então a expressão geral do valor esperado será:

$$\langle P^2 \rangle = \hbar^2 \sum_{l,m,n} (F^N)_{lm} (F^N)_{ln}^* a_m a_n^* \quad 5.10$$

Agora aplicamos a transformação unitária e consideramos que o rotor encontra-se inicialmente no estado $l = 0$, então $a_0 = 1$ e todos os outros a_n são zero:

$$\langle P^2 \rangle = \hbar^2 \sum_{l,k,k'} l^2 e^{iN(\phi_k - \phi_{k'})} U_{kl}^* U_{k0} U_{k'l} U_{k'l0}^* \quad 5.11$$

Para um número grande de kicks, as fases de Floquet (ϕ_j) oscilam rapidamente e, na média, apenas os termos $k=k'$ sobrevivem. Assim, no regime N muito grande:

$$\langle P^2 \rangle \rightarrow \hbar^2 \sum_{l,k} l^2 |U_{kl}|^2 |U_{k0}|^2 \quad 5.12$$

E obtivemos uma expressão que independe de N. Ou seja, a difusão é interrompida. O comprimento de localização é o limite em que o sistema segue a difusão clássica, a partir desse limite, a difusão começa a cessar.

O fato mais intrigante (e que ainda tenta-se entender) é: como um sistema determinístico e simples pode apresentar um comportamento oriundo de um sistema desordenado? Note que no modelo de Anderson tratamos com *potenciais aleatórios*, enquanto que no rotor forçado o mais próximo que chegamos de aleatoriedade são as *quasi-energias* do operador de Floquet, e que na realidade são *pseudo-aleatórias*. Há uma conexão entre os modelos, sem dúvida; desde o trabalho de Fishman, Grempel e Prange [3,4] que se estuda o rotor forçado em uma tentativa de entender como o efeito de localização pode aparecer nesse sistema. Uma compreensão definitiva do fenômeno é um dos grandes desafios modernos do estudo do caos quântico.

6. Observações experimentais de Localização:

O rotor forçado é um problema interessante porque ele pode facilmente ser realizado experimentalmente. Abaixo, dois experimentos que comprovam a existência do fenômeno de localização em tal sistema, e que demonstram a importância do estudo desse sistema.

Átomos ultra-frios em armadilhas magneto-ópticas

Uma realização de localização dinâmica de átomos foi obtida por Raizen e colaboradores [15]. Os experimentos foram realizados com átomos de sódio à temperaturas da ordem de μK . Os átomos foram presos e simultaneamente resfriados em uma armadilha magneto-óptica por uma interação combinada de um campo magnético inhomogêneo e um campo eletromagnético de um laser forte.

No experimento, aproximadamente 10^5 átomos foram aprisionados dentro de um volume de diâmetro de 0.3mm à temperatura de 17 μK . Ao fim do procedimento de preparação a armadilha foi desligada e um campo de luz estacionário e modulado foi ligado por tempos típicos de 10 μs . O hamiltoniano da interação do átomo de sódio com o campo de luz é dado por:

$$\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_{el} + \frac{p^2}{2M} + eF \cos\{k_L[x - \Delta L \sin(\omega t)]\} \cos(\omega_L t)$$

Onde \mathcal{H}_{el} descreve a interação do elétron de valência com o átomo, $\frac{p^2}{2M}$ é a energia cinética do átomo, e o último termo descreve a interação de dipolo elétrico do campo de luz com o elétron, onde ω_L e ω são, respectivamente, a frequência do laser e a frequência angular de modulação. As ondas estacionárias foram geradas direcionando dois feixes de laser de direções opostas na armadilha, a modulação foi obtida passando um feixe através de um modulador de fases eletro-óptico. A frequência do laser foi escolhida como perto da transição $(3S_{1/2}, F=2) \rightarrow (3P_{3/2}, F=3)$ da linha D_2 ($\lambda=589$ nm) do átomo de sódio.

Realizando mudanças de variáveis apropriadas e manipulando o hamiltoniano via equações de Hamilton, podemos obter um mapeamento semelhante ao mapa de Chirikov:

$$x_{n+1} = x_n + 2\pi p_{n+1}$$

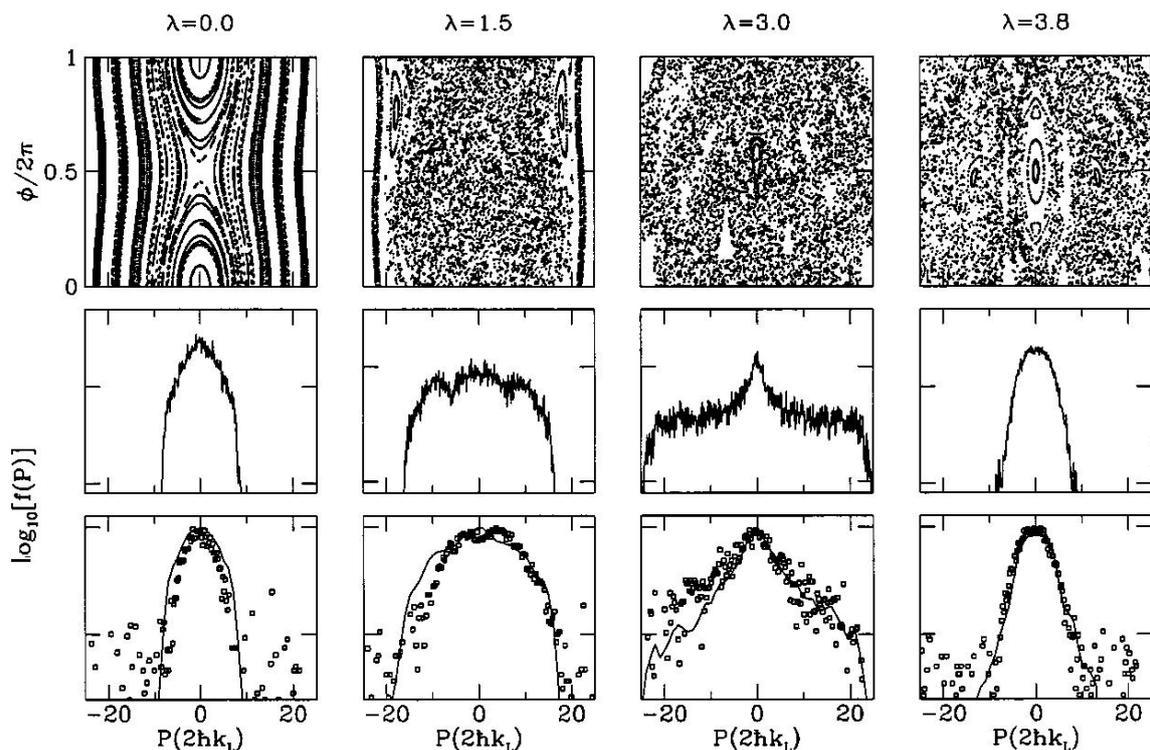
$$p_{n+1} = p_n - 2K \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda}} \cos\left(\lambda - \frac{\pi}{4}\right) \sin x_n$$

Onde $\lambda = 2k_L \Delta L$ e $K = \frac{\hbar k_L^2}{2M} \frac{\Omega^2}{(\omega_0 - \omega_L)\omega^2}$; Ω : frequência de Rabi

Há um detalhe, esse mapeamento acaba considerando que o sistema sofre dois 'kicks' no intervalo de um período. Como estamos interessados no estudo qualitativo do sistema, não nos aprofundaremos mais do que isso, matematicamente.

Como obtivemos um mapeamento semelhante ao mapa de Chirikov é de se esperar que, se os resultados anteriores estiverem corretos, seremos capazes de observar os fenômenos discutidos previamente.

Abaixo, do original de [15], na mesma figura os resultados teóricos e experimentais, para diferentes do parâmetro de controle dado por λ :



O painel superior mostra espaços de fase para diferentes valores de λ (respectivamente, 0; 1.5; 3.0 e 3.8), no painel do meio o logaritmo da distribuição de momentos clássica é mostrada como obtida do espaço de fases. O último painel mostra o logaritmo da distribuição de momentos obtida experimentalmente sobreposta com a predição de um cálculo de Floquet. Um comparativo entre as duas últimas séries mostra que todos os resultados, exceto para $\lambda = 3$, concordam com a predição clássica. Para $\lambda = 3$ localização dinâmica ocorre. Classicamente notamos que o momento está distribuído mais ou menos uniformemente sobre o espaço de fases acessível (o pequeno pico central é causado por um pequena ilha de regularidade sobrevivente), experimentalmente, assim como via cálculos de Floquet, uma localização exponencial dos momentos é observada.

Átomos de hidrogênio em campos de radiofrequência intensa

O átomo de hidrogênio em um campo de microondas forte foi o primeiro exemplo experimental mostrando localização dinâmica (vide [12]). Todos os aspectos discutidos nos capítulos anteriores, tais como difusão clássica na região semiclássica e supressão quântica da difusão na região de localização dinâmica são encontrados nesse sistema.

A equação de Schrödinger descrevendo a dinâmica de um elétron sob a influência combinada da interação Coulombiana com as interações com o núcleo e eletromagnética com as microondas é dada por:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\frac{p^2}{2m_e} - \frac{e}{r} + zF \cos(\omega t) \right) \psi$$

O número quântico principal 'n' irá aparecer na expressão da energia do sistema. Valores altos indicam uma aproximação do regime semiclássico.

É possível medir as probabilidades de ionização dos átomos, e quais valores de campos de microondas serão necessários para tal feito.

Podemos também manipular a equação de Schrödinger e obtermos um mapeamento semelhante ao mapa standard, da mesma maneira que foi feito no exemplo anterior. Tal manipulação não será feita aqui, visto que o que nos interessa mesmo são os resultados experimentais e suas comprovações da existência de localização dinâmica, tal qual previsto pela teoria de Floquet.

O campo de microondas possui frequência angular igual à ω . Quando o valor esperado do campo necessário para ionizar os átomos foi medido, observou-se que ele era maior do que o esperado teoricamente para um valor acima de limite de ω . Mas abaixo desse limite, a teoria concordava perfeitamente com os experimentos.

A explicação veio com a conexão com o rotor: a proporcionalidade entre o comprimento de localização e constante de difusão clássica. No átomo de hidrogênio o papel do momento angular é feito pelo número de fótons absorvidos ou emitidos, e conseqüentemente tomamos 'D' (a constante de difusão clássica) como a constante de difusão do número de fótons. Se for feita a conexão, a defasagem observada experimentalmente é explicada e ainda obtemos um indício ainda maior que o rotor forçado apresenta localização dinâmica.

Bibliografia:

- [1] A. EINSTEIN, Deutsche Physikalische Gesellschaft Verhandlungen 19, 82 (1917);
- [2] P. W. ANDERSON, *Absence of diffusion in certain random lattices*, Phys. Rev. **109** (1958) 1492-1505;
- [3] S. FISHMAN, D. R. GREMPPEL, and R. E. PRANGE, “*Chaos, Quantum Recurrences, and Anderson Localization*”, Phys. Rev. Lett. **49**, 8 (1982);
- [4] D. R. GREMPPEL, and R. E. PRANGE, “*Quantum Dynamics of a nonintegrable system*”, Phys. Rev. A, **29**, 4 (1984);
- [5] T. TIMBERLAKE, “*Random numbers and random matrices: Quantum Chaos meets Number Theory*”, American Journal of Physics 74, 547-553 (2006);
- [6] T. PROSEN, AND M. ROBNIK, “*Numerical demonstrations of the Berry-Robnik level spacing distribution*”, J. Phys. A **27** (1994) L459-466;
- [7] O. BOHIGAS, M. J. GIANNONI, and C. SCHMIT, “*Characterization of Chaotic Quantum Spectra and Universality of Level Fluctuation Laws*”, Phys. Rev. Lett. **52**, 1 (1984);
- [8] E. OTT, “*Chaos in Dynamical Systems*”, Cambridge University Press, New York (1993);
- [9] G. CASATI, B. V. CHIRIKOV, F. M. IZRAELEV and J. FORD, “*Stochastic behavior of a quantum pendulum under a periodic perturbation*”,
in: G. CASATI and J. FORD (eds.), “*Stochastic Behaviour in Classical and Quantum Hamiltonian Systems*”, vol. 93 of *Lecture Notes in Physics*, 334-352. Springer, Berlin (1979);
- [10] M. V. BERRY, *Semiclassical mechanics of regular and irregular motion*, in: G. IOOSS, R. H. G. HELLEMAN and R. STORA (eds.), *Chaotic Behaviour of Deterministic Systems*, Les Houches: École d'Été de Physique Théorique, Session XXXVI (1981), 171-271. North Holland Publishing Company, Amsterdam (1983); M. V. BERRY, *Quantum chaology, not quantum chaos*, Physica Scripta **40** (1989) 335-336; M. V. BERRY, *Chaos and the semiclassical limit of quantum mechanics (is the moon there when somebody looks?)*, in: R. J. RUSSELL, P. CLAYTON, K. WEGTER-MCNELLY and J. POLKINGHORNE (eds.), *Quantum Mechanics: Scientific Perspectives on Divine Action*, 41-54. Vatican Observatory Publications, Vatican City State, and Center for Theology and the Natural Sciences, Berkeley (2001);

- [11] M. C. GUTZWILLER, “*Quantum Chaos*”. Scientific American, Janeiro (1992);
- [12] H-J STÖCKMANN, “*Quantum Chaos: an introduction*”. Cambridge University Press (1999);
- [13] M. C. GUTZWILLER, “*Chaos in Classical and Quantum Mechanics*, vol. 1 of *Interdisciplinary Applied Mathematics*”, Springer-Verlag, New York (1990);
- [14] F. HAAKE, “*Quantum Signatures of Chaos*”. Springer Series in Sinergetics (2004);
- [15] F.L. MOORE, J.C. ROBINSON, C.F. BHARUCHA, BALA SUNDARAM, and M.G. RAIZEN, “*Atom Optics Realization of the Quantum δ -Kicked Rotor*” Phys. Rev. Lett. **75**, 25 (1995).