

TESE DE DOUTORADO

Aspectos geométricos da função de Wigner.

Fabrizio Toscano

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas
Rio de Janeiro, Janeiro de 2000.

A Claudinha.

Agradecimentos.

É com grande prazer que agradeço ao Professor Alfredo M. Ozorio de Almeida pela oportunidade de aprender com seu conhecimento, pelo apoio constante, por ter tido sempre confiança em meu trabalho e pelo ameno ambiente de trabalho que conseguiu criar ao seu redor.

Ao Dr. Raul O. Vallejos pelas incontáveis e frutíferas discussões durante todo meu doutorado, assim como por sua amizade. Também agradeço as discussões com os Professores Marcos Saraceno e André Voros relativas ao primeiro dos trabalhos desta tese, e a colaboração do Dr. Marcus A. M. de Aguiar para o desenvolvimento do segundo dos trabalhos.

A todos os membros do grupo de pesquisa, ao qual pertenço, pelos estimulantes seminários durante todos estes anos.

Ao CLAF/CNPq pela bolsa de doutoramento e pelo apoio, e também ao PRONEX/MCT pelo apoio financeiro. Às secretarias do CLAF, Graça e Fátima, pela ajuda sempre exercida com muita simpatia.

Ao CBPF por ter me dado todas as facilidades para o desenvolvimento desta tese. Faço extensivo este agradecimento a todos os funcionários do CBPF em especial a Vanda, por ter me facilitado a vida muitas vezes e pelo carinho sempre dispensado, a Almerio por ter tirado as fotocópias durante todo meu doutorado e a Regina por receber-me todas as manhãs com um sorriso.

A todos meus colegas de trabalho que fizeram minha estadia no CBPF um prazer, em especial: Ernesto, Ladario, Erwin e ao "tio" Andre.

A Claudinha pelo apoio constante durante estes quatro anos.

A meus pais e a minhas irmãs, Valeria e Flavia, que sempre me apoiaram em tudo.

A Diego, Isabel, Enrique, Pancho e Celia.

Aos Professores Mario e Myriam Giambiaggi pelo apoio quando cheguei ao Brasil.

Abstract.

We developed two works based on the semiclassical geometry of the Wigner function.

First, we construct a semiclassical expression for the Husimi function of autonomous systems in one degree of freedom, by smoothing with a Gaussian function an expression that captures the essential features of the Wigner function in the semiclassical limit. Our approximation reveals the “*center and chord*” structure that the Husimi function inherits from the Wigner function, down to very shallow *valleys*, where lie the Husimi zeroes. This explanation for the distribution of zeroes along curves relies on the geometry of the classical torus, rather than the complex analytic properties of the WKB method in the Bargmann representation. We evaluate the zeroes for several examples.

Second, we developed a new picture of scars of short and unstable periodic orbits on the spectral average of stationary Wigner functions, *i.e.* the spectral Wigner function. This pattern consists of concentric rings of positive and negative successive intensities on the *central surface* of a periodic orbit. We tested this prediction for a coupled nonlinear oscillator in two degrees of freedom, where we compute appropriate sections of stationary Wigner functions and of its spectral average, for energies where the classical dynamics of the system is essentially chaotic.

Resumo.

Foram desenvolvidos dois trabalhos baseados na geometria semiclássica da função de Wigner.

Em primeiro lugar, construímos uma expressão semiclássica para a função de Husimi para sistemas autônomos com um grau de liberdade, suavizando com uma função Gaussiana uma expressão que captura as principais características da função de Wigner no limite semiclássico. Esta aproximação revela a estrutura de *centros e cordas* que a função de Husimi herda da função de Wigner, produzindo *vales rasos* onde se encontram os zeros da função de Husimi. Esta explicação para a distribuição dos zeros ao longo de curvas depende da geometria do toro clássico, em vez das propriedades analíticas complexas do método WKB na representação de Bargmann. Calculamos os zeros da função de Husimi em vários exemplos.

Em segundo lugar, desenvolvemos um novo esquema de cicatrizes de órbitas periódicas instáveis curtas sobre a média espectral de funções de Wigner estacionárias, *i.e.* a função de Wigner espectral. Este esquema consiste de anéis concêntricos de sucessivas intensidades positivas e negativas na *superfície central* da órbita periódica. Esta predição foi testada para um oscilador acoplado não linear em dois graus de liberdade, onde computamos seções apropriadas de funções de Wigner estacionárias e de sua média espectral, para energias onde a dinâmica clássica do sistema é essencialmente caótica.

Índice

1	Introdução	1
2	As funções de Wigner e Husimi.	13
2.1	A função de Wigner.	13
2.1.1	Estrutura semiclássica em sistemas integráveis.	16
2.1.2	Conexão com o formalismo da mecânica clássica.	25
2.2	A função de Husimi.	28
3	Approximação geométrica para os zeros da função de Husimi.	31
3.1	A partícula numa caixa.	32
3.2	Nossa aproximação geométrica.	37
3.3	A partícula sujeita a uma força constante.	42
3.4	Caso genérico.	47
4	A função de Wigner em sistemas não integráveis.	57
4.1	Função de Wigner espectral.	57
5	Estudo de cicatrizes na função de Wigner.	65
5.1	Cicatriz na superfície central.	65
5.2	Exemplos para autoestados do Hamiltoniano NELSON.	71
6	Conclusão	84
A		88
A.1	A função de Husimi para a partícula numa caixa.	88
B		90
B.1	Detalhes de nossa aproximação geométrica.	90
C		92
C.1	A função de Husimi para uma partícula sujeita a uma força constante.	92
D		94
D.1	Método WKB na representação de Bargmann para a função de Husimi no problema da partícula sujeita a uma força constante.	94

Lista de Figuras

2.1	Geometria semiclassical da função de Wigner em sistemas 1-D para uma típica curva de energia constante, \mathcal{E} , suave e convexa. A ação $S(\mathbf{x})$ é igual à área sombreada entre a curva \mathcal{E} e a corda ξ . A corda cheia perto da cáustica de Wigner, \mathcal{L} , corresponde a um centro, \mathbf{x} , fora dela. Quando o centro atravessa \mathcal{L} , uma bifurcação acontece. Assim, se o centro está sobre \mathcal{L} uma segunda corda aparece (cordas tracejadas). Note-se que as velocidades no espaço de fases nas pontas desta nova corda mais longa são paralelas, cancelando assim a área (2.25); para a corda mais curta isto não acontece. Finalmente, quando o centro está dentro da curva \mathcal{L} , tem-se três cordas (cordas pontilhadas). Os outros elementos da geometria estão explicados no texto.	23
3.1	Gráficos da função de Husimi para um autoestado par no problema da partícula numa caixa com paredes rígidas. A amplitude da função em cada ponto corresponde a uma intensidade numa escala logarítmica de cores cinzas; assim os lugares mais escuros correspondem a valores crescentes da amplitude. (a) Calculada numericamente de (2.42) e (3.2). (b) Aproximando as funções erro em (3.3) por (3.4). (c) Suavizado da função de Wigner simplificada, (3.9). Os pontos brancos representam zeros. Os segmentos brancos horizontais são os ramos da trajetória clássica $ p_n = 0.3$ entre os limites da caixa em Q , junto com os quais formam a "caixa no espaço de fases" citada no texto. O retângulo central encerra a interseção das regiões $ \Im(w) < \Re(w)$ com $\Re(w) > 0$, para todas as funções erro em (3.3). As linhas verticais no gráfico (c) encerra a interseção das mesmas regiões para as funções erro em (3.9).	34
3.2	A função de Husimi sobre o eixo $P = 0$ para os gráficos da Fig.3.1. A curva pontilhada corresponde ao gráfico (a), a curva tracejada corresponde ao gráfico (b) e a cheia para o gráfico (c). As linhas tracejadas verticais delimitam a região de validade da aproximação (3.6).	36
3.3	A função de Husimi de um autoestado de energia para o problema da partícula sujeita a uma força constante. A amplitude em cada ponto está representada numa escala logarítmica de intensidades de cores cinzas, com os lugares mais escuros correspondendo a valores crescentes da amplitude. A parábola \mathcal{E} , é a curva de energia constante. Os pontos brancos sobre o eixo $P = 0$ são os zeros da função. O círculo no canto inferior esquerdo representa a curva (3.12) onde o suavizado Gaussiano (2.45) é significativo. O símbolo (\times) em $P = 0$ indica o ponto Q_* . Os valores para os parâmetros usados são : $E = 10$, $F = 1$, $\hbar = 2$, $\beta = 1$ e $m = 1$	43

- 3.4 Comparação numérica, ao longo do eixo Q , dos pré-fatores do cosseno em (3.18) (linha **pontilhada**) e em (3.15) (linha **tracejada**), com o valor da integral (3.29) (linha **cheia**). Note-se que quando Q cresce, o pré-fator em (3.15) é maior que o valor da integral (3.29). A linha tracejada vertical está na posição q_r e a pontilhada na posição Q_* 45
- 3.5 O logaritmo de nossa aproximação (3.18) (curva **preta**) e da função de Husimi (curva **cinza**) para a partícula, baixo a ação de uma força constante, ao longo do eixo Q dentro da curva de energia constante. Os mínimos relativos da curva **preta** indicam zeros da função de Husimi, e os da curva **cinza** mínimos de (3.18). As linhas cheias verticais realçam as posições dos zeros da função de Husimi. A linha tracejada indica a posição q_r e a linha pontilhada a posição Q_* . Os (\diamond) indicam a posição em Q para os mínimos de nossa aproximação (3.15) e os (\times) para os mínimos de (3.18). A segunda linha de (\diamond) são os mínimos de (3.15) deslocados uma distância $(Q_* - q_r)$. Os (\diamond) são para as posições em Q dos zeros da aproximação semiclássica da função de Husimi obtida pelo método WKB na representação de Bargmann, (3.26). 46
- 3.6 Erro relativo percentual, $(\delta_k/\Delta_{k-1,k})100\%$, entre as posições dos zeros da função de Husimi (calculados numericamente) e as posições dadas por algumas das aproximações. Os zeros estão contados da esquerda para a direita, sendo δ_k a distância sobre o eixo Q entre o k -ésimo zero da função de Husimi e a posição dada por alguma das aproximações, enquanto que $\Delta_{k-1,k}$ é a distância entre o $k-1$ e o k -ésimo zero da função de Husimi. (\diamond) são os zeros (3.26) da função de Wigner semiclássica obtida pelo método WKB na representação de Bargmann, (\times) para os mínimos de nossa aproximação (3.18) e os (\diamond) para aqueles da aproximação (3.15) deslocados uma distância $(Q_* - q_r)$ 47
- 3.7 Função de Wigner para o autoestado $n = 30$ do problema de uma partícula num potencial anarmônico e assimétrico, (3.30), cujos parâmetros foram fixados nos valores: $m = \omega_0 = 1$, $q_0 = 4.0$ e $\lambda = 0.1$. A curva de energia \mathcal{E} corresponde a um valor $E \approx 30.8175$ para a constante de Planck $\hbar \approx 0.508236$. O gráfico foi realizado normalizando a função e representando a amplitude resultante para cada ponto do espaço de fases, de acordo com a escala linear de intensidades de cores mostrada à direita. As tonalidades vermelhas correspondem a valores positivos da função entanto que as tonalidades azuis são para valores negativos. A função passa por zero nas regiões brancas. O círculo no canto superior esquerdo corresponde à área efetiva de valor $2\pi\hbar$ encerrada pela curva (3.12). 48
- 3.8 Distribuição de zeros da função de Husimi, dentro da curva de energia \mathcal{E} (com $E \approx 30.8175$), para dois autoestados de energia do problema de uma partícula num potencial anarmônico e assimétrico, (3.30). O símbolo (\times) indica a posição dos zeros. (a) para o autoestado $n = 30$ correspondendo a um valor quantizado de $\hbar \approx 0.508236$ e (b) para o autoestado $n = 45$ cujo valor de $\hbar \approx 0.340691$. A curva \mathcal{L} representa a cáustica de Wigner. A linha **tracejada** representa o vale de zeros da função de Husimi. A linha **pontilhada** representa o vale de mínimos locais de nossa aproximação (3.15) e a linha **cheia** para o vale de mínimos de (3.18). O círculo no canto superior esquerdo de cada figura corresponde à área efetiva de valor $2\pi\hbar$ encerrada pela curva (3.12). 49

3.9	Método geométrico para a localização dos mínimos locais, ao longo do vale das aproximações (3.15) (a) e (3.18) (b), dados implicitamente pelas equações (3.16) e (3.31) respectivamente. O valor de \hbar corresponde ao número quântico $n = 30$. (a): as linhas cheias são as curvas de nível da ação de centros para valores mínimos do termo oscilatório, enquanto que as curvas de nível para o comprimento da corda correspondem às linhas tracejadas (ver (3.16)). (b): as linhas cheias são as curvas de nível da fase para valores mínimos do cosseno em (3.18), enquanto que as curvas de nível do argumento da função exponencial são as linhas tracejadas (ver (3.31)). Em (c) e (d) nós comparamos a posição dos zeros da função de Husimi (\times) com a posição aproximada dos mínimos locais de (3.15) (\circ) e (3.18) (\circ) dada pela interseção tangencial dos dois conjuntos de curvas (3.16) e (3.31) respectivamente.	51
3.10	Idem Fig.3.9 para um valor de \hbar correspondendo ao número quântico $n = 45$	52
3.11	O logaritmo de nossa aproximação (3.18) (curva preta) e da função de Husimi do autoestado $n = 30$ (curva cinza) ao longo do vale de mínimos locais (linha cheia na FIG.3.7). As curvas estão projetadas sobre o eixo P . As linhas verticais dão ênfase à posição dos zeros da função de Husimi sobre o eixo P ; as linhas cheias são para os zeros no vale principal e as linhas tracejadas são para os zeros no vale bifurcado menor. Os símbolos (\circ) e (\circ) marcam a posição sobre o eixo P dos pontos em Fig.3.8 (c) e (d).	54
3.12	Idem Fig.3.11 para um valor de \hbar correspondendo ao número quântico $n = 45$	55
4.1	Em geral existem muitos segmentos de trajetórias, na camada de energia \mathcal{C} , com extremos \mathbf{x}_{j-} e \mathbf{x}_{j+} unidos por cordas ξ_j centradas num dado ponto \mathbf{x} . O circuito, fechado pela corda $-\xi_j = \mathbf{x}_{j-} - \mathbf{x}_{j+}$, define a fase da contribuição semiclássica a (4.8).	61
5.1	A curva desenhada esquematiza uma órbita periódica. Os centros \mathbf{x} cujas cordas têm pontas na órbita periódica formam uma superfície bidimensional que chamamos de <i>superfície central</i> . Em cada ponto \mathbf{x} , na superfície central, estão centradas pelo menos duas cordas tal que $\xi_{in} = -\xi_{out}$. Estas cordas dividem a órbita em dois segmentos cujas ações associadas são as áreas simpléticas S_{in} e S_{out} . Em (5.8), nós somamos as repetições destes segmentos, que se constroem dando voltas à órbita periódica indo de um mesmo ponto inicial até o mesmo ponto final.	66
5.2	Gráfico da ação S_v da órbita vertical como função da energia. O movimento isócrono desta órbita para diferentes energias refleti-se na linearidade da relação, onde o declive da reta é: $\partial S_v / \partial E = \tau_v \approx 4.4428$ (τ_v o período da órbita). As pequenas linhas verticais no eixo das abscissas correspondem ao espectro de autoenergias. As pequenas linhas no eixo das ordenadas são as ações para as autoenergias na janela $0.753 < E < 0.837$. Dentro desta janela existem 59 estados com números quânticos que vão de $n = 252$ até $n = 311$. As cruzeiras sobre a reta são uma guia para o olho. As ações Bohr-quantizadas, $2\pi\hbar(m + \mu/4)$, são as duas linhas mais compridas no eixo vertical com $m = 10$ e $m = 11$, e as energias Bohr-quantizadas correspondentes são as duas linhas mais compridas no eixo horizontal. O valor do índice de Maslov desta libração é $\mu = 3$, sendo ímpar por ser uma órbita hiperbólica com reflexão [50]. O valor da constante de Planck é $\hbar = 0.05$	73

5.3	Seções da função de Wigner espectral sobre o plano invariante $q_1 = p_1 = 0$, para autoestados do Hamiltoniano NELSON. Foram calculadas como médias sobre estados em pequenas janelas de energia. A faixa de números quânticos, n , dentro de cada uma destas janelas esta indicada acima de cada gráfico. (a) para os estados ao redor da primeira energia Bohr-quantizada da Fig.5.2 e (c) para a segunda. (b) é para os estados ao redor de uma energia no centro entre essas duas (Fig.5.2). As elipses pretas em cada gráfico são as camadas de energia constante no plano invariante para cada uma das autoenergias dos estados considerados nas médias. Note-se que a proximidade delas faz com que se confundam numa única curva. As órbitas periódicas verticais coincidem com estas elipses. O interior de cada elipse é a chamada “superfície central”, i.e. os centros $\mathbf{x} = (0, q_2, 0, p_2)$ de todas as cordas com pontas na órbita vertical. O esquema de representação colorida é o mesmo que foi usado na Fig.3.7.	74
5.4	Seções bidimensionais da função de Wigner espectral paralelas ao plano invariante $q_1 = p_1 = 0$. Foram calculadas como médias sobre os estados do gráfico (a) da Fig.5.3.	75
5.5	Seções das funções de Wigner individuais sobre o plano invariante $q_1 = p_1 = 0$, para os estados usados no cálculo das seções da função de Wigner espectral da Fig.5.3. As duas primeiras fileiras horizontais são para os estados do gráfico (a) da Fig.5.3, as duas seguintes para o gráfico (b) e as últimas para o (c). Os números quânticos n de cada estado estão indicados acima de cada gráfico.	76
5.6	Projeções sobre o espaço de configurações de duas librações simétricas da Hamiltoniana (5.15). Os pontos de retorno estão sobre as curvas que representam as projeções da camada de energia constante. No espaço de fases estas órbitas têm cordas centradas no plano $q_1 = p_1 = 0$. Um exemplo é aquela unindo o par de pontos desenhados numa das figuras, onde os momentos correspondem aos vectores tangentes. Pontos equivalentes podem facilmente ser encontrados para a órbita “horizontal” (a). Segmentos de órbita com pontas nestas cordas podem contribuir para formar o padrão de interferência para $q_2 \geq 0$ nas Fig.5.3 e Fig.5.5, no plano invariante $q_1 = p_1 = 0$	77
5.7	Densidade de probabilidade $ \langle q n\rangle ^2$ para o autoestado $n = 294$. Este estado aparece em [49] como exemplo do único estado que tem uma cicatriz clara, no espaço de configurações, sobre uma órbita periódica. Esta órbita corresponde à libração assimétrica no gráfico.	78
5.8	Gráfico da ação S_{op} da libração assimétrica da Fig.5.7 como função da energia. Para os valores considerados no eixo das abscissas a relação é praticamente linear, sendo o declive da reta $\partial S_{op}/\partial E = \tau_{op} \approx 7.14$. As pequenas linhas verticais no eixo das abscissas correspondem ao espectro de autoenergias. As pequenas linhas horizontais no eixo das ordenadas são as ações dos estados usados no cálculo das seções da função de Wigner espectral da Fig.5.10. As autoenergias destes estados estão ao redor do valor para o estado $n = 294$. A linha pontilhada une a autoenergia deste estado com o valor da ação da órbita para essa energia. A energia Bohr-quantizada, $m = 19$, esta indicada com uma linha mais comprida, ao igual que sua correspondente ação (considerando que o índice de Maslov da órbita em questão é $\mu = 5$).	79

- 5.9 Seções da função de Wigner do autoestado $n = 294$, cada uma calculada para um $\mathbf{q} = (q_1, q_2)$ fixo sobre a projeção no espaço de configurações da órbita periódica da Fig.5.7 (também desenhada nesta figura). Os diferentes pontos \mathbf{q} usados estão marcados com pequenos círculos sobre a projeção da órbita, e os valores correspondentes estão acima de cada seção da função de Wigner. Neste tipo de seções em \mathbf{p} , a camada de energia é um círculo. Nestes gráficos podemos acompanhar a função de Wigner em três pontos correspondentes a centros na superfície central da órbita: dois indicados com cruces que indicam a passagem desta pela camada de energia em forma simétrica respeito da origem (por tratar-se de uma libração), e o outro com $\mathbf{p} = 0$. Para os dois primeiros pontos obviamente a corda associada é nula, enquanto que para o terceiro as cordas, com $\xi_q = 0$, vão de um ponto até o outro da órbita periódica. 80
- 5.10 Seções da função de Wigner espectral calculada como uma média sobre os estados com autoenergias ao redor da correspondente ao estado $n = 294$ (ver Fig.5.8), para dois pontos \mathbf{q} fixos sobre a projeção da órbita periódica (Fig.5.9). Os círculos são as camadas de energia para as diferentes autoenergias, e a passagem da órbita periódica em cada uma delas são as cruces sobre os círculos. 81
- 5.11 Comparação entre a fase das oscilações da função de Wigner espectral (ou equivalentemente da função de Wigner para o estado $n = 294$), sobre a linha de centros $\mathbf{x} = (\mathbf{q}, 0)$ na superfície central da órbita periódica (desenhada no gráfico à esquerda), e a dada pela fórmula (5.9). As ações S_{in} são para os segmentos de órbita com cordas centradas em $\mathbf{x} = (\mathbf{q}, 0)$. As linhas verticais no gráfico à direita marcam as coordenadas q_1 dos pontos indicados com pequenos círculos sobre a projeção da órbita à esquerda. Para cada um destes pontos foram calculadas as seções das figuras 5.9 e 5.10. 82
- 5.12 Idem Fig.5.9 mas para os novos pontos \mathbf{q} indicados com pequenos círculos sobre a projeção da órbita periódica no espaço das posições 83

Capítulo 1

Introdução

O estudo da mecânica clássica ganha em clareza quando é desenvolvido no espaço de fases. Desde o ponto de vista formal, é neste espaço onde o princípio de invariância das equações de movimento com respeito às transformações canônicas é estabelecido, dando assim toda uma estrutura simplética ao formalismo Hamiltoniano. Assim também, é neste espaço onde se estabelecem as relações mais gerais entre simetrias e magnitudes dinâmicas invariantes. Mas é quando queremos caracterizar geometricamente os tipos de movimentos que as equações de movimento geram, que esta descrição no espaço de fases mostra melhor suas vantagens.

Os movimentos clássicos podem ser caracterizados pela organização geométrica de suas trajetórias no espaço de fases $2L$ -dimensional [16] ¹. Para os sistemas autônomos, *i.e.* onde a função Hamiltoniana não depende explicitamente do tempo, todas as trajetórias pertencem à camada de energia constante. Se além da energia o sistema possuir outras $L - 1$ magnitudes constantes durante a evolução temporal, então as trajetórias clássicas estarão confinadas a superfícies de dimensão L chamadas de toros invariantes, e temos assim os sistemas *integráveis*. Se o número de constantes de movimento for menor que os graus de liberdade do sistema, haverá regiões do espaço de fases livres de toros e as trajetórias com condições iniciais nessas regiões têm agora a possibilidade de explorar regiões com a dimensão da camada de energia ². A sensibilidade exponencial às condições

¹Onde L é o número de graus de liberdade do sistema.

²As perturbações genéricas dos sistemas integráveis produzem, por exemplo, a destruição do folheado por toros do espaço de fases. Tipicamente, verificamos a destruição de todos os toros com movimento periódico para qualquer intensidade da perturbação, podendo sobreviver só os toros com movimento

iniciais, característica deste tipo de trajetórias em oposição àquelas que habitam os toros, junto com o movimento limitado, produz um tipo de movimento conhecido como *caótico*. Temos assim os sistemas com dinâmica mista, onde partes do espaço de fases têm movimento regular e em outras o movimento é caótico. Se o sistema não possuir nenhuma constante de movimento exceto a energia, então o movimento é caótico sobre toda a camada de energia, dando lugar aos sistemas ergódicos. A conservação dos volumes no espaço de fases durante a evolução clássica, e o movimento limitado, fazem do movimento caótico uma combinação de “esticamentos e dobras” cujo resultado é de tal complexidade que justifica plenamente o nome. Nestes casos, o esqueleto de soluções periódicas do movimento, *i.e.* as órbitas periódicas, é a ferramenta fundamental para o entendimento deste tipo de dinâmica. As regiões regulares do movimento clássico estão caracterizadas pela existência de órbitas periódicas estáveis que habitam os toros remanescentes, enquanto que as regiões caóticas estão caracterizadas pela existência de órbitas periódicas instáveis cujo número cresce exponencialmente com o período.

O tratamento semiclássico dos sistemas quânticos com análogo clássico é profundamente influenciado pelo tipo de dinâmica clássica que estes possuam. Na teoria semiclássica trata-se de aproximar os objetos e magnitudes quânticas (funções de onda, níveis de energia, etc), através da associação com estruturas e magnitudes clássicas. Desta maneira cumpre-se com um duplo objetivo. Por um lado o de verificar o *princípio da correspondência* segundo o qual, em certas situações limites, a teoria quântica deve se reduzir à clássica, que bem descreve o mundo macroscópico. Estas situações limites resumem-se no limite onde \hbar é pequeno, em comparação com outros parâmetros do sistema, o qual difere do limite clássico, onde toma-se \hbar exatamente nula. A diferença fundamental entre estes dois regimens deve-se à não analiticidade das funções quânticas no limite clássico. Mas, por outro lado, existem muitas situações onde o tratamento semiclássico é mais simples do que resolver a equação de Schrödinger, assim como também traz uma compreensão maior sobre quais características básicas são responsáveis pelo comportamento geral do sistema. Entre estes sistemas estão os chamados “mesoscópicos” cujo correlato experi-

quase-periódico. À medida que aumenta a perturbação a sobrevivência de toros invariantes é o assunto do famoso teorema KAM (Kolmogorov-Arnold-Moser) (ver referências e uma discussão em [16]).

mental encontra-se nas modernas técnicas de construção de nanoestruturas em sólidos.

O limite semiclássico de sistemas com análogo clássico integrável é bem compreendido atualmente. Este está baseado na estrutura de toros invariantes no espaço de fases. O espectro de autoenergias encontra-se através da regra de quantização EBK, que é uma generalização da velha regra de quantização de Bohr-Sommerfeld dos primórdios da teoria quântica (ver seção 2.1.1). As funções de onda dos estados estacionários são do tipo WKB, na representação das posições q ou dos momentos p , cujas fases são ações sobre o toro em unidades de \hbar , mais fases associadas ao número de caústicas da aproximação (seção 2.1.1). A ausência do folheado por toros invariantes do espaço de fase no caso de movimento caótico, inviabiliza este tipo de aproximação semiclássica nos sistemas com análogo clássico não integrável, cujo tratamento semiclássico completo ainda é um problema em aberto.

A maior parte das aproximações semiclássicas realizadas no caso integrável estão na representação quântica das coordenadas ou equivalentemente dos momentos. Mas, é de se esperar que o tratamento semiclássico nos casos do movimento caótico ganhe clareza numa representação da mecânica quântica no espaço de fases, equivalentemente ao que acontece na mecânica clássica. Uma representação no espaço de fases consiste essencialmente em associar aos operadores da mecânica quântica, que sejam funções dos operadores posição e momento, funções no espaço de fases chamadas de *símbolos*. Por exemplo, se quisermos representar os estados no espaço de fases usa-se o símbolo do operador densidade $\hat{\rho}$ em alguma representação. Varias destas associações existem, cada uma relacionada a um particular ordenamento dos operadores de posição e momento que compoem o operador quântico [6, 7, 17, 11]. Entre elas é de crucial importância para o tratamento semiclássico a representação de Weyl de operadores, associada a um ordenamento simétrico dos operadores posição e momento [12, 13, 14]. Nesta representação o símbolo do operador densidade corresponde à função de Wigner.

Apesar da função de Wigner não ter uma correspondência direta com a densidade de probabilidade clássica de Liouville, já que pode tomar valores negativos, suas projeções correspondem às densidades de probabilidades nas posições e nos momentos, assim como

também sua suavização por uma função Gaussiana, a função de Husimi, é definida positiva. O uso da função de Wigner no estudo do limite semiclássico de estados puros em sistemas integráveis provou a versatilidade desta função em conectar-se com as estruturas clássicas no espaço de fases. Assim, no caso de estados puros em sistemas autônomos com um grau de liberdade, Berry [1] mostrou que o pico da amplitude da função de Wigner fica perto da curva de energia constante, cuja distância tende a zero como $\hbar^{2/3}$, no limite semiclássico. Este quadro foi generalizado por Ozorio de Almeida e Hannay [2] para os toros invariantes em sistemas integráveis em geral. Em todos estes sistemas, a análise semiclássica da função de Wigner [1, 2, 3, 4, 5] revelou uma fascinante estrutura geométrica de “centros e cordas” que determina a fase das oscilações desta função à medida que o ponto de avaliação $\mathbf{x} = (\mathbf{q}, \mathbf{p})$ é variado dentro do toro. Esta fase é proporcional à área simplética (ou ação de centros) encerrada pelo toro e a corda, centrada em \mathbf{x} , que une dois pontos sobre o toro.

Esta geometria de centros e cordas permeia toda a análise semiclássica na representação de Weyl. Isto se deve a sua conexão com o formalismo de funções geratrizes da mecânica clássica, e o uso dentro deste formalismo de um novo conjunto de variáveis canonicamente conjugadas na descrição da evolução clássica. Estas são : os centros, $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_- + \mathbf{x}_+)/2$, e as cordas, $\boldsymbol{\xi} = \mathbf{x}_+ - \mathbf{x}_-$, que servem de alternativa à especificação dos pontos inicial, $\mathbf{x}_- = (\mathbf{q}_-, \mathbf{p}_-)$, e final, $\mathbf{x}_+ = (\mathbf{q}_+, \mathbf{p}_+)$ do movimento no espaço de fases $2L$ -dimensional [12]. Assim, as transformações canônicas podem ser especificadas por funções geratrizes de cordas ou centros das quais obtêm-se as correspondentes variáveis canonicamente conjugadas por diferenciação. Como o princípio de incerteza na mecânica quântica só permite o conhecimento simultâneo da metade das coordenadas de ambos os pontos inicial e final no espaço de fases (usualmente escolhidas as posições embora os momentos são igualmente permitidos), a representação de Weyl está relacionada com a escolha alternativa do centro do vetor que une os pontos inicial e final. Por isso, podemos chamar à representação de Weyl como *representação de centros* [12]. A conexão entre a geometria semiclássica de centros e cordas da representação de Weyl quântica e este novo formalismo da mecânica clássica baseado inteiramente nos centros e as cordas foi

primeiramente estabelecida por Ozorio de Almeida [13, 14, 12]. Assim também, a analogia formal entre as transformações de Legendre que conectam as diversas funções geratrizes na mecânica clássica, entre elas as funções geratrizes de centros e cordas, e as transformações de Fourier que relacionam as diferentes representações na mecânica quântica, como por exemplo as de posições e momentos, lhe permitiu desenvolver paralelamente à representação de centros a *representação de cordas* da mecânica quântica, conectadas entre si por uma transformação de Fourier. A geometria de centros e cordas e sua conexão com o formalismo da mecânica clássica formam o pano de fundo teórico e o fio conector para os trabalhos desenvolvidos nesta tese.

O primeiro destes trabalhos centra-se na construção de uma aproximação semiclassical para a função de Husimi em sistemas autônomos com um grau de liberdade, a partir da visão desta como uma suavização por uma função Gaussiana da função de Wigner. Sabe-se que o resultado do é uma função com um pico da amplitude ao redor da região do movimento clássico no espaço de fases, que decai exponencialmente nas regiões classicamente proibidas [22, 23]. A primeira impressão é que o suavizado cancela todo rastro do esqueleto de centros e cordas da função de Wigner. No entanto, mostraremos que efeitos muito delicados devido a esta estrutura são ainda discerníveis.

Lembremos primeiro que a função de Husimi pode também ser vista como o valor médio do operador densidade $\hat{\rho}$ em estados coerentes, cuja parte holomórfica (inteira) é chamada de função de Bargmann [17]. Esta função corresponde à autofunção para o estado quântico numa representação da mecânica quântica introduzida por Bargmann [18] (no caso do grupo de Heisenberg-Weyl), onde a base do espaço de Hilbert consiste de estados coerentes não normalizados à unidade. Desta maneira, na representação de Bargmann as autofunções são funções inteiras na variável $z = \frac{1}{\sqrt{2}}(\beta q - ip/\beta)$, que atua como uma coordenada no espaço de fases. A analiticidade da função de Bargmann obriga a seus zeros, que são aqueles da função de Husimi, a serem isolados em sistemas com um grau de liberdade. Nesta tese estudaremos a distribuição de zeros da função de Husimi à luz da geometria herdada da função de Wigner.

A motivação para este estudo encontra-se fundamentalmente nos trabalhos de Leboeuf

e Voros [24], para cujos resultados sobre a distribuição dos zeros da função de Husimi, grande atenção tem sido dedicada ultimamente. Eles mostraram computacionalmente para diversos mapas caóticos e integráveis, que a distribuição de zeros é completamente diferente nestes dois casos. Enquanto para os mapas caóticos eles encontraram que os zeros estão espalhados em forma quase uniforme sobre todo o espaço de fases, para os mapas integráveis agrupam-se ao longo de linhas. Sendo assim, eles sugerem que em sistemas integráveis os zeros da função de Husimi estão distribuídos em forma linear e para sistemas caóticos estão espalhados no espaço de fases, dando assim uma “assinatura quântica” do caos clássico. A primeira alternativa é a única permitida para sistemas autônomos com um grau de liberdade. Além disso, as linhas de zeros não podem estar perto da curva de energia constante onde o suavizado da função de Wigner tem um pico não oscilatório. Sendo assim, estas linhas de zeros só podem ser encontradas em regiões onde a função de Husimi é exponencialmente pequena.

Nestas circunstâncias, nós só podemos esperar encontrar o padrão geral dos zeros com uma teoria semiclássica “subdominante” muito delicada. Este é o caso da teoria do tipo WKB desenvolvida por Voros na representação de Bargmann [17], que prediz zeros nas linhas anti-Stokes onde dois ou mais ramos da ação complexa tem a mesma amplitude. Os zeros ao longo destas linhas são selecionados pela condição de que a parte imaginária da ação complexa seja um múltiplo inteiro de π . Duas dificuldades cercam este tipo de aproximações. Primeiro, é muito difícil encontrar analiticamente os ramos da curva de energia clássica nas coordenadas complexas, para poder calcular explicitamente a ação complexa (*i.e.* a fase nas autofunções WKB). Segundo, uma aproximação válida em qualquer lugar fora da vizinhança da curva de energia, requer a continuação analítica das funções que definem os ramos; isto exige a analiticidade do símbolo de Weyl para o Hamiltoniano quântico.

Já que a função de Wigner não precisa ser analítica, as aproximações da função de Husimi obtidas através da suavização Gaussiana da primeira, não têm porquê ser manifestamente analíticas, *i.e.* não devemos esperar que seus zeros estejam necessariamente isolados. No entanto, podemos procurar por *vales rasos*, mesmo em regiões onde a função

de Husimi é exponencialmente pequena, e por oscilações nos fundos destes vales que indiquem onde os zeros estão. As duas regiões dominantes na avaliação da função de Husimi num dado ponto são sua vizinhança, coincidindo com o centro da função Gaussiana do suavizado, e o máximo da função de Wigner ao longo da curva de energia \mathcal{E} . Já que sabemos que um zero só pode ser encontrado removendo a função Gaussiana para longe da curva de energia, nós usamos a *aproximação simples*, tipo cosseno, de Berry para representar a função de Wigner nos pontos ao redor do ponto de avaliação da função de Husimi [1]. Para a contribuição da região perto de \mathcal{E} , usamos ainda uma aproximação mais elementar considerando a função de Wigner no seu limite clássico, *i.e.* uma função $-\delta$ sobre a curva de energia. Após a suavização, o primeiro termo mantém-se cosseno-oscilatório com essencialmente a mesma fase (proporcional à ação de centros, a menos de pequenas correções), mas agora amortecido por uma função exponencial, a qual decresce essencialmente com o comprimento da corda (a menos de correções). O segundo termo é positivo em toda parte, suave e concentra-se em um máximo na curva de energia. A combinação de ambos os termos produz uma expressão positiva e suave, com um pico ao longo da curva \mathcal{E} , enquanto que as oscilações dos mínimos locais no vale resultante aproximam-se dos zeros da função de Husimi quando $\hbar \rightarrow 0$. Esta expressão encontrada para a função de Husimi tem validade só dentro da curva de energia e depende somente das propriedades do toro \mathcal{E} .

O segundo trabalho desenvolvido nesta tese é um estudo do fenômeno chamado de *cicatrices*³, sobre a função de Wigner, em sistemas não integráveis. A observação deste fenômeno tem surgido durante a tentativa dos físicos na área do chamado “caos quântico”, de entender a estrutura dos autoestados em sistemas com análogo clássico caótico, ou mesmo com uma dinâmica clássica mista, mas até agora não rendeu uma forma de determinar completamente estes estados semiclassicamente a partir das estruturas clássicas subjacentes como no caso integrável.

As únicas estruturas clássicas invariantes (estacionárias), que sobrevivem nos sistemas autônomos totalmente caóticos são a superfície de energia constante e as órbitas

³De “scars” em inglês.

periódicas, as quais contêm toda a possível informação sobre a dinâmica do sistema. É por isso que se supõe existir alguma relação entre o limite semiclássico de estados estacionários e estas variedades invariantes do movimento clássico. Entre os indícios de uma relação entre estados estacionários quânticos e as órbitas periódicas clássicas, conta-se o fenômeno de cicatrizes de órbitas periódicas instáveis curtas sobre autoestados caóticos [33, 34, 35]. Em geral, por cicatrizes entende-se o aumento ou diminuição ⁴ da densidade de probabilidade associada aos autoestados caóticos, na vizinhança de uma órbita periódica instável e suas correspondentes variedades estáveis e instáveis. Este fenômeno constitui um excelente exemplo de como as estruturas subjacentes clássicas influenciam as propriedades quânticas estacionárias e o transporte quântico de tempos longos em sistemas classicamente ergódicos.

Na moderna caologia quântica é comum associar o movimento caótico a aspectos da teoria de matrizes aleatórias (RMT, de Random Matrix Theory), tais como a repulsão de níveis no espectro quântico, dada pelo apropriado ensemble de matrizes aleatórias, ou a predição de autofunções aleatórias para os autoestados caóticos [39]. O fenômeno de cicatrizes é considerado atualmente como a “correção” mais importante, no regime semiclássico ($\hbar \rightarrow 0$), à idéia de autoestados aleatórios sugerida pela RMT [34, 35].

Como uma típica trajetória clássica nos sistemas ergódicos explora toda a camada de energia, é razoável em primeira aproximação, a suposição de Berry [40] e Voros [41] de uma distribuição uniforme sobre a camada de energia para a distribuição de probabilidades no espaço de fases dos autoestados caóticos no limite semiclássico. No entanto, o teorema sobre ergodicidade [42] ⁵, no qual a hipótese está baseada, assim como também teoremas posteriores [43], fornecem pouca informação sobre a estrutura dos autoestados em regiões de tamanho $O(\hbar)$ do espaço de fases.

Várias teorias semiclássicas foram desenvolvidas para entender o fenômeno de cicatrizes de órbitas periódicas em autoestados caóticos usando argumentos no domínio temporal e a dinâmica linearizada ao redor destas órbitas. Entre elas contam-se a teoria baseada

⁴Em inglês chama-se “anti-scar”.

⁵O teorema de Shnirelman [42] basicamente afirma que o valor esperado quântico de um operador suave é a média microcanônica clássica quando $\hbar \rightarrow 0$.

em pacotes de ondas Gaussianos de Heller [33], e a teoria de Bogomolny [47] no espaço de configurações baseada na função de Green semiclássica. Estas teorias são aplicáveis a uma sobreposição coletiva de estados dentro de uma janela de energia de largura ε ao redor de um valor fixo de energia. Elas predizem um aumento na intensidade da função de onda perto da projeção no espaço de configurações de uma órbita periódica cujo período verifique $\tau \lesssim h/\varepsilon$. A intensidade será maior se a ação estiver quantizada ao estilo Bohr-Sommerfeld dentro da janela de energia considerada ⁶. Outras órbitas periódicas também contribuem para a intensidade, mas seu peso é menor. Nesta visão, a questão de ter cicatrizes em estados individuais é obscurecida pela possível interferência de diferentes ramos da órbita periódica no espaço de posições, o que deve ser superposto ao fundo aleatório da função de onda. Isto leva à necessidade de fazer afirmações quantitativas sobre a intensidade das cicatrizes [34, 35]. A existência do fundo aleatório leva à necessidade na teoria de Bogomolny de efetuar uma suavização para poder visualizar as cicatrizes no espaço de configurações.

Uma alternativa para trazer o problema ao espaço de fases foi desenvolvida por Berry [46] através do estudo da função de Wigner espectral, cuja teoria foi refinada por Ozorio de Almeida [12]. Esta função é uma sobreposição coletiva de funções de Wigner de autoestados individuais numa janela de energia ε , cuja soma no regime semiclássico consiste essencialmente num pico perto da camada de energia (correspondente ao centro da janela) ao qual uma órbita de período $\tau \lesssim h/\varepsilon$, sobrepõe uma intensidade extra, que será maior se a sua ação estiver Bohr-quantizada. Perto e dentro da camada de energia a intensidade da cicatriz oscila como uma função de Airy. Projetando 'em \mathbf{p} ', *i.e.* integrando nestas variáveis a fórmula que descreve as intensidades de cicatrizes na função de Wigner espectral perto da camada de energia [12, 46], obtém-se a fórmula de cicatrizes de Bogomolny [47], que por sua vez projetada 'em \mathbf{q} ' dá a contribuição de órbitas periódicas à densidade de níveis de energia, conhecida como a *fórmula do traço* de Gutzwiller [44].

Contrariamente à teoria de cicatrizes de Berry, nosso interesse é para pontos de avaliação \mathbf{x} da função de Wigner espectral, bem dentro da camada de energia. Nosso

⁶Chamaremos órbita periódica Bohr-quantizada aquela cuja ação verifique uma condição de quantização do tipo (2.20).

esquema teórico está baseado numa fórmula apresentada em [12] que descreve a função de Wigner espectral em cada ponto \mathbf{x} , como uma soma de contribuições de segmentos de trajetórias clássicas cujos extremos estejam unidos por cordas centradas nesse ponto. A estrutura de cicatrizes é sobre uma superfície que chamamos de *superfície central*, i.e. a superfície bidimensional definida pelos centros de todas as cordas construídas unindo pares de pontos sobre uma órbita periódica. Sobrepostas às contribuições de outras cordas (com o mesmo centro), as cordas associadas à órbita periódica em cada ponto da superfície central definem muitos segmentos de órbita, os quais podem ser somados em fase se a órbita estiver Bohr-quantizada. Desta forma, mostraremos que isto cria uma estrutura de anéis de sucessivas intensidades positivas e negativas, com um máximo sobre a própria órbita periódica. Esta borda da estrutura de anéis ao longo da superfície central é o objeto de estudo da teoria de Berry.

Uma verificação qualitativa deste esquema de cicatrizes se realizou estudando as funções de Wigner individuais, e a sua sobreposição coletiva que leva à função de Wigner espectral, para um oscilador anarmônico em dois graus de liberdade conhecido como "Hamiltoniano NELSON". Este sistema autônomo não integrável tem uma dinâmica clássica mista, com regiões do espaço de fases onde o movimento é essencialmente regular e outras com predominância do movimento caótico, cujos tamanhos dependem da energia considerada. Vários estudos sobre este sistema encontram-se disponíveis atualmente na literatura, entre os quais contam-se um estudo exaustivo de sua dinâmica clássica [48], e um estudo comparativo de cicatrizes nas funções de onda dos autoestados com respeito à teoria semiclássica de Bogomolny, numa janela de energia onde o movimento clássico é quase completamente caótico [49]. Nosso estudo foi desenvolvido essencialmente nas energias consideradas em [49].

Como o espaço de fases deste sistema é de dimensão 4, caculamos seções bidimensionais apropriadas para observar a estrutura de cicatrizes associadas a duas órbitas instáveis de período baixo do sistema. A primeira é uma libração pertencente à família "vertical" de órbitas periódicas, que estão contidas num plano invariante do movimento. Neste caso as seções da função de Wigner foram calculadas no plano invariante onde a superfície central

corresponde à parte do plano interior da órbita. A segunda órbita periódica é uma libração assimétrica cuja superfície central não está contida num plano. Neste caso calculamos seções nas coordenadas dos momentos para diferentes valores das posições sobre a projeção da órbita periódica no espaço de configurações. Desta forma, acompanhamos as funções de Wigner sobre três linhas na superfície central da órbita.

Esta tese está organizada da seguinte maneira. No Capítulo 2 apresentamos as funções de Wigner e Husimi em sistemas com um grau de liberdade. Após a descrição breve do formalismo na representação de Weyl que permite definir a função de Wigner (seção 2.1), passamos a explicar a estrutura semiclássica desta, mostrando as analogias com as aproximações semiclássicas das funções de onda dos autoestados em sistemas integráveis (subseção 2.1.1). Apesar da geometria semiclássica de centros e cordas da função de Wigner ser apresentada para o caso de um grau de liberdade, para facilitar a sua compreensão, a sua generalização para mais graus de liberdade também é indicada. Ainda neste capítulo resumimos a conexão desta geometria semiclássica com o formalismo de funções geratrizes da mecânica clássica (subseção 2.1.2). Finalmente, apresentamos as fórmulas que definem a função de Husimi como uma suavização da função de Wigner assim como também sua definição a partir dos estados coerentes, ambas as quais serão usadas no capítulo seguinte (seção 2.2). O Capítulo 3 está dedicado à nossa aproximação geométrica da função de Husimi em sistemas com um grau de liberdade, onde mostramos como a estrutura semiclássica de centros e cordas da função de Wigner determina a distribuição dos zeros da função de Husimi neste tipo de sistema. Como um modelo simples para nossa aproximação, primeiro achamos uma expressão semiclássica para a função de Husimi no caso de uma partícula dentro de uma caixa com paredes rígidas (seção 3.1). A seguir expomos a derivação de nossa aproximação semiclássica da função Husimi (seção 3.2). Esta aproximação é aplicada ao problema da partícula sujeita a uma força constante (seção 3.3). Este exemplo corresponde a um problema não ligado cuja curva convexa de energia é aberta. Para finalizar este capítulo apresentamos os resultados no caso de uma partícula sujeita a um potencial anarmônico e assimétrico, como um exemplo de um sistema geral com uma curva de energia fechada e convexa. No Capítulo 4, introduzimos

as ferramentas para estudar os estados quânticos no espaço de fases em sistemas não integráveis, *i.e.* a função de Wigner espectral. Aqui explicamos sua conexão com o símbolo do operador evolução na representação de Weyl, *i.e.* o propagador quântico nesta representação. A partir da aproximação semiclássica para este propagador [12], mostramos como se chega a uma aproximação semiclássica simples para a função de Wigner espectral, primeiramente derivada em [12], que é a base para a análise de cicatrizes desenvolvida no próximo capítulo. Também explicamos como aparecem cáusticas nesta aproximação, perto da camada de energia, o que leva à necessidade de aproximações uniformes que derivam na fórmula de cicatrizes da teoria de Berry [46, 12]. O estudo de cicatrizes em forma de anéis na superfície central de uma órbita periódica instável é apresentada no Capítulo 5. Primeiramente mostramos como as contribuições de múltiplos segmentos da órbita, centrados num dado ponto na superfície central, podem ser somados em fase para produzir essa estrutura de anéis (seção 5.1). A seguir confirmamos esta estrutura nas funções de Wigner individuais e coletivas dos autoestados do “Hamiltoniano NELSON” (seção 5.2). Por último, no Capítulo 6 apresentamos nossos comentários finais.

Capítulo 2

As funções de Wigner e Husimi.

Podemos representar os operadores da mecânica quântica, $\hat{A}(\hat{q}, \hat{p})$, por funções no espaço de fases [6, 7, 10, 11]. Essas funções, que serão da forma $A(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ e em geral dependerão de \hbar , são chamadas de símbolos do operador \hat{A} . As funções de distribuição de quase-probabilidade nada mais são do que símbolos associados ao operador densidade, $\hat{\rho}$, em alguma representação de operadores quânticos [6, 7]. Neste capítulo vamos fazer uma revisão de duas destas funções: a função de Wigner e a função de Husimi. Embora a maior parte das fórmulas a serem apresentadas estejam escritas para sistemas com um grau de liberdade (sistemas 1-D), para facilitar a compreensão, suas generalizações para mais graus de liberdade são imediatas na maioria dos casos.

2.1 A função de Wigner.

A função de Wigner é o símbolo do operador densidade na representação de Weyl de operadores [6, 7], ou representação de centros [12]. O símbolo de um operador \hat{A} na representação de Weyl corresponde à função

$$A_W(\mathbf{x}) = \int d\xi_q \langle q + \xi_q/2 | \hat{A} | q - \xi_q/2 \rangle \exp[-ip\xi_q/\hbar], \quad (2.1)$$

onde $\mathbf{x} = (q, p)$ ¹. A simetria formal entre as variáveis q e p se manifesta tomando a transformada de Fourier em (2.1),

$$A_W(\mathbf{x}) = \int d\xi_p \langle p + \xi_p/2 | \hat{A} | p - \xi_p/2 \rangle \exp[ip\xi_p/\hbar]. \quad (2.2)$$

¹Todas as integrações nesta tese são de $-\infty$ até $+\infty$ a menos que seja indicado.

Da definição (2.1) segue que o símbolo de qualquer operador da forma $f(\hat{q})$ será a função $f(q)$. Analogamente, de (2.2), temos que, para qualquer operador da forma $g(\hat{p})$, seu símbolo será a função $g(p)$. Assim, da linearidade das transformadas de Weyl (2.1) e (2.2), encontra-se:

$$f(\hat{q}) + g(\hat{p}) \xrightarrow{\text{Weyl}} f(q) + g(p) . \quad (2.3)$$

Uma das características da representação de Weyl é a de seus símbolos serem invariantes frente a transformações simpléticas (transformações canônicas lineares). Em efeito, é bem conhecido o fato que as transformações canônicas lineares clássicas, $\mathbf{x}' = \mathcal{M}\mathbf{x}$ (\mathcal{M} matriz simplética), correspondem a transformações unitarias, $\hat{A}' = \hat{U}_{\mathcal{M}}^\dagger \hat{A} \hat{U}_{\mathcal{M}}$, na mecânica quântica. O efeito de uma dessas transformações unitarias no símbolo de Weyl é simplesmente

$$A'_W(\mathbf{x}) = A_W(\mathcal{M} \mathbf{x}) . \quad (2.4)$$

A partir da definição (2.1), é fácil ver a relação entre o símbolo de um operador \hat{A} qualquer e o símbolo de seu operador adjunto \hat{A}^\dagger (conjugado hermitiano):

$$A_W^\dagger(\mathbf{x}) = \overline{A_W(\mathbf{x})} , \quad (2.5)$$

onde o sobrelinhado indica conjugação complexa. Assim, se o operador \hat{A} for autoadjunto (operador hermitiano) seu símbolo de Weyl será uma função real. Desta forma, o símbolo na representação de Weyl de todo operador que representa um observável corresponde a uma função real.

Para estados puros em sistemas com um grau de liberdade, o operador densidade é: $\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|$ e de acordo com (2.1) a função de Wigner será

$$W(\mathbf{x}) \equiv \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right) \rho_W(\mathbf{x}) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right) \int d\xi_q \langle q + \xi_q/2 | \psi \rangle \langle \psi | q - \xi_q/2 \rangle \exp[-ip\xi_q/\hbar]. \quad (2.6)$$

Já que o operador densidade corresponde a um operador observável, a função de Wigner é real e representa o estado $|\psi\rangle$ no espaço de fases.

Uma propriedade importante da representação de Weyl concerne ao traço do produto de dois operadores [12]:

$$\text{Tr}[\hat{A}\hat{B}] = \int \frac{d\mathbf{x}}{2\pi\hbar} A_W(\mathbf{x}) B_W(\mathbf{x}) . \quad (2.7)$$

Como o símbolo de Weyl para o operador identidade é a função identidade (*i.e.* $I_W(\mathbf{x}) = 1$ para todo \mathbf{x}), no caso do traço de um só operador temos simplesmente que ²

$$\text{Tr}[\hat{A}] = \int \frac{d\mathbf{x}}{2\pi\hbar} A_W(\mathbf{x}) . \quad (2.8)$$

Da propriedade (2.7) e da definição (2.6) obtém-se imediatamente a propriedade de “quase-probabilidade” da função de Wigner,

$$\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \int d\mathbf{x} A_W(\mathbf{x}) W_\psi(\mathbf{x}) . \quad (2.9)$$

Esta fórmula, que foi a motivação do trabalho original de Wigner [8] sobre a função que agora leva seu nome, tem sido uma das principais atrações da representação de Weyl. Ela permite-nos calcular valores médios de observáveis da mesma forma que na mecânica clássica com a função de distribuição de probabilidades de Liouville, embora, ao contrário desta, a função de Wigner não precisa ser definida positiva ³. Isto é particularmente atraente nos casos onde o símbolo de Weyl de um observável coincide exatamente com a magnitude clássica (ou seja quando o símbolo não depende de \hbar). Este é o caso, por exemplo, para as importantes funções Hamiltonianas clássicas da forma

$$H(\mathbf{x}) = p^2/2m + V(q) , \quad (2.10)$$

que são elas mesmas os símbolos de Weyl dos seus operadores Hamiltonianos quânticos associados (*i.e.* $H_W(\mathbf{x}) \equiv H(\mathbf{x})$), os quais verificam (2.3).

²Note-se que para estados, $|\psi\rangle$, normalizáveis $\text{Tr}[\hat{\rho}] = 1$. De (2.8) temos que $\text{Tr}[\hat{\rho}] = \int \frac{d\mathbf{x}}{2\pi\hbar} \rho_W(\mathbf{x}) = 1$, enquanto que nos outros casos a integral diverge. É por essa razão que o pré-fator em (2.6) não deve ser considerado para estados não ligados.

³Esta forma de calcular valores médios como na mecânica clássica não pode ser emulado pela função de Husimi, embora esta seja definida positiva.

A propriedade de quase-probabilidade (2.9) permite-nos obter o “produto escalar” de funções de Wigner:

$$\int d\mathbf{x} W_\phi(\mathbf{x}) W_\psi(\mathbf{x}) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right) |(\phi|\psi)|^2. \quad (2.11)$$

Este produto é sempre definido positivo, assim como também as projeções sobre as posições q e os momentos p ,

$$\int dp W_\psi(\mathbf{x}) = |\langle q|\psi\rangle|^2 \quad \int dq W_\psi(\mathbf{x}) = |\langle p|\psi\rangle|^2, \quad (2.12)$$

que dão as respectivas densidades de probabilidade ⁴.

2.1.1 Estrutura semiclássica em sistemas integráveis.

Vamos primeiro relembrar um pouco a estrutura do espaço de fases nos sistemas integráveis, e como ela determina a forma das autofunções de energia no limite semiclássico. Isto nos permitirá por em perspectiva a função de Wigner neste tipo de sistema, já que, sendo esta distribuição uma maneira de visualizar os estados no espaço de fases, sua forma também deverá estar determinada pela estrutura deste espaço.

Os sistemas integráveis são aqueles onde é possível obter soluções completas, globais, para o movimento clássico. Para que isto aconteça, em sistemas com L graus de liberdade, estes precisam ter pelo menos L constantes de movimento independentes. As constantes de movimento são funções das $2L$ variáveis, (\mathbf{q}, \mathbf{p}) , no espaço de fases, cuja condição de serem independentes corresponde a estas estarem em *involução*, *i.e.* que seus colchetes mútuos de Poisson se anulem. Em sistemas ligados, onde o movimento está limitado a uma porção do espaço de fases, a interseção das L superfícies definidas pelas constantes de movimento, cada uma de dimensão $2L - 1$, resulta numa superfície compacta, de dimensão L , com a topologia de um toro [28, 16]. Quando a função Hamiltoniana não depende explicitamente do tempo, (autônoma), ela própria é uma das constantes de movimento cuja conservação define a camada de energia constante. Os toros, por pertencerem à interseção de todas as

⁴Se o estado $|\psi\rangle$ em (2.9) é não ligado, o lado direito muda para $\int d\mathbf{x}/2\pi\hbar A_W(\mathbf{x})W_\psi(\mathbf{x})$. Se um dos estados em (2.11) é não ligado, de acordo com a definição de função de Wigner para este tipo de estados, (2.6), o pré-fator não precisa ser considerado; e se os dois estados são não ligados, o lado esquerdo também deve mudar para $\int d\mathbf{x}/2\pi\hbar W_\phi(\mathbf{x})W_\psi(\mathbf{x})$.

superfícies constantes, estão contidos na camada de energia. Nos sistemas autônomos com um grau de liberdade a constância da função Hamiltoniana garante sua integrabilidade.

Toda trajetória de um sistema integrável está confinada dentro de algum desses toros que folheam todo o espaço de fases. Cada toro L -dimensional é caracterizado por L circuitos irredutíveis independentes ⁵, parametrizados por variáveis angulares, θ , cada uma mudando em 2π ao redor de um circuito. Nessas coordenadas angulares o movimento gerado pela função Hamiltoniana clássica corresponde a um movimento retilíneo uniforme, cujas velocidades angulares constantes, ω , sobre cada toro, são chamadas de frequências do movimento clássico integrável ⁶. Os tipos de trajetórias dentro dos toros estão determinados por estas frequências. Assim, se as frequências para um dado toro são comensuráveis, as trajetórias nele são periódicas. Elas formam uma família que cobre densamente o toro ao variar a condição inicial. No caso de serem incomensuráveis o movimento é quase-periódico e basta uma única trajetória para cobrir o toro densamente (ergodicamente). Esta estrutura faz com que os toros em sistemas integráveis possam ser considerados como *variedades* do espaço de fases invariantes no tempo, cujos pontos definem um “estado clássico estacionário”.

Uma característica importante dos toros invariantes é serem superfícies *Lagrangeanas*. Em efeito, se especificarmos o toro por intermédio das funções vetoriais $\mathbf{p}_j(\mathbf{q})$ ou $\mathbf{q}_j(\mathbf{p})$ (onde j etiqueta as diferentes “folhas” em que o toro deve ser dividido para ser descrito por funções), a condição deste ser uma superfície Lagrangeana é

$$\text{Rotor } \mathbf{p}_j(\mathbf{q}) = \text{Rotor } \mathbf{q}_j(\mathbf{p}) = 0 \quad , \quad (2.13)$$

sobre cada folha. Como consequência disto, a área simplética ou ação do circuito fechado

$$S_\gamma = \oint_\gamma \mathbf{p} \cdot d\mathbf{q} \quad , \quad (2.14)$$

é nula para circuitos redutíveis, γ , enquanto que mantém-se constante para circuitos que

⁵Um circuito irredutível é aquele que não pode ser reduzido a um ponto por meio de deformações contínuas sobre a superfície do toro. O oposto chama-se circuito redutível.

⁶Este é o conteúdo do teorema de Liouville-Arnold que caracteriza o movimento de um sistema integrável como translações sobre um toro [28].

são deformáveis entre si. Portanto, a ação entre dois pontos quaisquer num toro invariante

$$S(\mathbf{q}) = \int_{\mathbf{q}_0}^{\mathbf{q}} \mathbf{p}(\mathbf{q}') \cdot d\mathbf{q}' , \quad (2.15)$$

não depende dos caminhos sobre o toro, escolhidos para o cálculo, contanto que estes sejam homólogos. Isto define $S(\mathbf{q})$ em (2.15) como uma função de \mathbf{q} , uma vez fixado o ponto \mathbf{q}_0 . Esta função é multívoca devido aos diferentes ramos $\mathbf{p}_j(\mathbf{q})$.

Como todas as deformações possíveis de um dado circuito irredutível têm a mesma ação (2.14), podemos a partir delas definir as coordenadas canonicamente conjugadas dos ângulos, θ , para cada toro. Estas coordenadas chamam-se *variáveis de ação*, \mathbf{I} , e são

$$I_i = \frac{1}{2\pi} \oint_{\gamma_i} \mathbf{p} \cdot d\mathbf{q} , \quad (2.16)$$

onde γ_i é o i -ésimo circuito irredutível do toro. Vemos então que a família de toros no espaço de fases é parametrizada pelas variáveis de ação \mathbf{I} . Por esta razão elas são funções das constantes de movimento originais que definem os toros. A transformação $(\mathbf{q}, \mathbf{p}) \rightarrow (\mathbf{I}, \theta)$ é canônica ⁷ e sua função geratriz corresponde à ação (2.15), porém agora definida também sobre a família de toros $\mathbf{p}_{\mathbf{I}}(\mathbf{q}) \equiv \mathbf{p}(\mathbf{q}, \mathbf{I})$. As equações de transformação são

$$\mathbf{p} = \frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}} \quad \theta = \frac{\partial S}{\partial \mathbf{I}} . \quad (2.17)$$

Já que as transformações canônicas preservam a forma das equações de Hamilton para o movimento clássico, nas variáveis de ação e ângulo temos

$$\dot{\mathbf{I}} = -\frac{\partial H(\mathbf{I})}{\partial \theta} = 0 \quad \dot{\theta} = \frac{\partial H(\mathbf{I})}{\partial \mathbf{I}} = \boldsymbol{\omega}(\mathbf{I}) \quad (2.18)$$

onde $\boldsymbol{\omega}(\mathbf{I})$ são as frequências constantes ao longo de cada toro.

Na mecânica quântica de sistemas classicamente integráveis, os toros invariantes são a pedra fundamental na construção das funções de onda estacionárias, *i.e.* as soluções

⁷A condição para que seja canônica é que preserve a área simplética de qualquer circuito no espaço de fases:

$$\oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{q} = \oint \mathbf{I} \cdot d\theta$$

o que pode ser verificado da definição (2.16) e do fato dos toros serem superfícies Lagrangeanas.

estacionárias da equação de Schrödinger. Assim, cada região classicamente permitida no espaço de configurações, correspondente à projeção de um dos toros, é o suporte da função de onda estacionária. Esta consiste em uma combinação linear de funções, cujas fases são as ações (2.15) em unidades de \hbar , sobre cada folha $-j$ - do toro:

$$\langle \mathbf{q} | \psi_1 \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{L/2}} \sum_j \left| \det \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{q})}{\partial \mathbf{q} \partial \mathbf{I}} \right|^{1/2} \exp \left\{ i \frac{S_j(\mathbf{q}, \mathbf{I})}{\hbar} - i \frac{\beta_j \pi}{4} \right\}, \quad (2.19)$$

onde as fases β_j são constantes sobre cada folha. Impondo que a variação total da fase de $\langle \mathbf{q} | \psi_1 \rangle$ ao longo de cada um dos L circuitos irredutíveis γ_i do toro seja múltiplo de 2π , chega-se à *condição de quantização semiclássica* que seleciona os toros para os quais existem autoestados de energia associados no limite $\hbar \rightarrow 0$ ⁸:

$$\oint_{\gamma_i} \mathbf{p} \cdot d\mathbf{q} = 2\pi\hbar \left(n_i + \frac{\sigma_i}{4} \right) = 2\pi I_i, \quad n_i \equiv \text{números inteiros}, \quad (2.20)$$

e os σ_i , chamados índices de Maslov, são fases inteiras associadas ao número de cáusticas atravessadas pelo circuito correspondente⁹. Desta forma, o espectro de energias será dado implicitamente pelas autoenergias

$$E_n = H(\mathbf{I} = \hbar(\mathbf{n} + \boldsymbol{\sigma}/4)). \quad (2.21)$$

No caso de Hamiltonianas de um grau de liberdade, com a forma (2.10), os toros são as curvas de energia constante, $H(\mathbf{x}) = E$, simétricas em p . A região classicamente acessível no espaço de configurações é aquela compreendida entre os dois pontos de retorno da trajetória clássica, onde $V(q) = E$. Nessa região, a função de onda semiclássica (2.19) coincide com a conhecida solução WKB para a equação de Schrödinger

$$\langle q | \psi_I \rangle = \frac{\omega}{2\pi\sqrt{|p_1(q, I)|}} \exp \left\{ i \frac{S_1(q, I)}{\hbar} - \frac{\pi}{4} \right\} + \frac{\omega}{2\pi\sqrt{|p_2(q, I)|}} \exp \left\{ i \frac{S_2(q, I)}{\hbar} + \frac{\pi}{4} \right\}, \quad (2.22)$$

⁸Para sistemas com um grau de liberdade esta condição é conhecida como “regra de quantização de Bohr-Sommerfeld”. A generalização para mais graus de liberdade é conhecida como “regra EBK” (Einstein-Brillouin-Keller) [30], mas a forma definitiva, (2.20), também tem os aportes de Maslov [31].

⁹Arnold demonstrou que os índices de Maslov são invariantes topológicos do toro [29].

onde $p_{1,2} = \pm 2m[E(I) - V(q)]^{1/2}$ são as duas camadas da curva de energia constante, e $S_{1,2}(q, I) = \int_{q_0}^q p_{1,2}(q', I) dq'$ suas respectivas ações.

Uma característica da aproximação (2.19), ou equivalentemente da (2.22), é a de possuir divergências nas chamadas “cáusticas do toro” definidas como o lugar no espaço de fases onde ¹⁰

$$\left| \det \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \mathbf{q}} \right| = \infty . \quad (2.23)$$

Estas correspondem às fronteiras das diferentes folhas do toro, $\mathbf{p}_j(\mathbf{q})$, que delimitam o movimento no espaço de configurações, sendo no caso de um grau de liberdade simplesmente os pontos de retorno da trajetória clássica. Entretanto, a divergência da intensidade é integrável, refletindo um pico de intensidade finita para a função de onda semiclássica ao atravessar as cáusticas. Refinamentos da aproximação semiclássica (2.19) são necessários para contornar a singularidade nas cáusticas. Em geral estas *aproximações uniformes* sobre as cáusticas revelam para a intensidade ao longo delas, um pico do tipo função de Airy [51]. Os máximos desses picos não caem exatamente nas cáusticas, mas suas distâncias a elas tendem a zero no limite $\hbar \rightarrow 0$. No limite clássico, *i.e.* $\hbar = 0$, recupera-se o pico de intensidade infinita sobre as cáusticas.

Desta maneira vemos que a estrutura dos autoestados de energia em sistemas cujo equivalente clássico é integrável, esta governada, no limite semiclássico $\hbar \rightarrow 0$, pelos toros clássicos. No caso da função de Wigner para estes autoestados sua estrutura semiclássica também esta associada aos toros invariantes no espaço de fases. A primeira análise a estabelecer isto foi realizada por Berry [1] para o caso de autoestados de energia E , em sistemas de um grau de liberdade não relativísticos, onde a Hamiltoniana é da forma (2.10) e o toro é a curva convexa suave, \mathcal{E} , de energia constante. A seguir vamos resumir os resultados em [1] importantes para compreender a geometria semiclássica da função de Wigner, ponto de partida dos trabalhos desenvolvidos nesta tese ¹¹.

¹⁰A divergência acontece pois para a amplitude em (2.19), usando (2.17), temos

$$\left| \det \frac{\partial^2 S}{\partial \mathbf{q} \partial \mathbf{I}} \right| = \left| \det \frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{q}} \right| = \left| \det \frac{\partial \theta}{\partial \mathbf{p}} \right| \left| \det \frac{\partial \mathbf{p}}{\partial \mathbf{q}} \right| ,$$

e $\partial \theta / \partial \mathbf{p} \neq 0$ ao longo das cáusticas.

¹¹Para mais detalhes pode-se consultar também [4, 5].

A aproximação semiclássica simples.

Esta é obtida substituindo as autofunções em (2.6) pela suas formas WKB, (2.22), e integrando pelo método da fase estacionária. O resultado é simétrico em q e p e depende só da geometria da curva clássica \mathcal{E} ,

$$W_{SCL}(\mathbf{x}) = \frac{2}{\pi \sqrt{2\pi \hbar} (\omega^{-1})} \sum_{\text{cordas}-j} \frac{1}{\sqrt{D_j(\mathbf{x})}} \cos \left\{ \frac{S_j(\mathbf{x})}{\hbar} - \frac{\pi}{4} \right\}, \quad (2.24)$$

onde a função $S_j(\mathbf{x})$ é a área simpléctica entre a curva de energia \mathcal{E} e a corda ξ , centrada em \mathbf{x} , i.e. dados dois pontos \mathbf{x}_- e \mathbf{x}_+ sobre o toro, $\xi = \mathbf{x}_+ - \mathbf{x}_-$ e $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_+ + \mathbf{x}_-)/2$ (ver Fig.2.1). A soma é sobre todas as cordas centradas em \mathbf{x} e ω é a frequência do movimento clássico ao redor de \mathcal{E} . Os fatores $D_j(\mathbf{x})$ no denominador são os *produtos exteriores* das velocidades no espaço de fases nas pontas das cordas,

$$D_j(\mathbf{x}) = \dot{\mathbf{x}}_- \wedge \dot{\mathbf{x}}_+ = \dot{p}_- \dot{q}_+ - \dot{q}_- \dot{p}_+, \quad (2.25)$$

correspondendo à área do paralelogramo formado pelos pares de vetores (o ponto \mathbf{x}_+ é alcançado após o ponto \mathbf{x}_- no movimento clássico ao longo de \mathcal{E} , ver Fig.2.1). Fora da curva convexa de energia \mathcal{E} não existem cordas, portanto $W_{SCL}(\mathbf{x}) = 0$.

A *cáustica* de Wigner, indicada com \mathcal{L} na Fig.2.1, é a fronteira de regiões com diferentes números de cordas: dentro da cáustica existem três cordas, sobre ela duas e fora só uma. Sobre a cáustica de Wigner e sobre \mathcal{E} , genericamente dois pares de pontos de fase estacionária coalescem e portanto o método ordinário da fase estacionária é inaplicável. Justamente o fato de pares de pontos de fase estacionária coalescerem indica que ao atravessar estas curvas o número de cordas muda. Em efeito, para sucessivos centros \mathbf{x} que se aproximam de \mathcal{E} pelo lado côncavo ($H(\mathbf{x}) < E$), a corda associada vai perdendo comprimento até anular-se sobre a curva, para logo desaparecer no lado convexo ($H(\mathbf{x}) > E$). Como a curva \mathcal{E} é o local de cordas nulas, o denominador (2.25) anula-se e a aproximação semiclássica (2.24) diverge, fazendo do toro uma cáustica da função semiclássica de Wigner. No caso da cáustica \mathcal{L} , quando \mathbf{x} a alcança desde dentro, duas cordas coalescem, desaparecendo ao centro passar para o exterior. Assim, só dois dos três

termos em (2.24) divergem sobre \mathcal{L} , pois as cordas coalescentes têm velocidades no espaço de fases, $\dot{\mathbf{x}}_+$ e $\dot{\mathbf{x}}_-$, paralelas, assim a área $D_j(\mathbf{x})$ é zero (Fig.2.1). É interessante notar a semelhança entre as divergências sobre as cáusticas, \mathcal{L} e \mathcal{E} , da aproximação semiclássica (2.24) para a função de Wigner do autoestado, e as divergências sobre as cáusticas do toro da aproximação semiclássica (2.22) para a função de onda. Em particular a divergência de (2.24) sobre o toro \mathcal{E} é equivalente à divergência de (2.22) sobre os pontos de retorno da trajetória clássica.

Além de ser divergente sobre as cáusticas, esta aproximação tem a deficiência de não estar corretamente normalizada para o caso de estados com norma finita. Nesses casos, o pré-fator em (2.24) proveniente da correta normalização das autofunções WKB, (2.22), não dá a correta normalização da função de Wigner.

A aproximação uniforme.

A consideração simultânea de pares de pontos de fase estacionária em (2.6) leva a:

$$W_{SCL}(\mathbf{x}) = \frac{\sqrt{2}}{\pi \hbar^{2/3} (\omega^{-1})} \sum_{\text{cordas}-j} \frac{1}{\sqrt{D_j(\mathbf{x})}} \left[\frac{3S_j(\mathbf{x})}{2} \right]^{1/6} \text{Ai} \left\{ - \left[\frac{3S_j(\mathbf{x})}{2\hbar} \right]^{2/3} \right\}. \quad (2.26)$$

Esta é uma aproximação uniformemente válida não só para pontos \mathbf{x} movendo-se em direção a \mathcal{E} e sobre esta curva, como também para pontos \mathbf{x} no lado convexo onde os valores estacionários e da função $S(\mathbf{x})$ são imaginários. No entanto, subseqüentes refinamentos do método da fase estacionária são necessários para uma aproximação uniformemente válida sobre \mathcal{L} .

Do lado côncavo da curva \mathcal{E} , mas não muito perto dela, $S(\mathbf{x})$ é grande comparada com \hbar , então a função de Airy pode ser substituída pela sua forma assintótica para argumento negativo grande [51],

$$\text{Ai}\{-w\} \approx \frac{1}{\sqrt{\pi}} [w]^{-1/4} \cos \left\{ \frac{2}{3} [w]^{3/2} - \frac{\pi}{4} \right\} \quad (2.27)$$

e desta forma recupera-se (2.24). Sobre o lado convexo de \mathcal{E} a função de Airy tem argumento positivo e assim a função semiclássica de Wigner decai exponencialmente desse lado da curva.

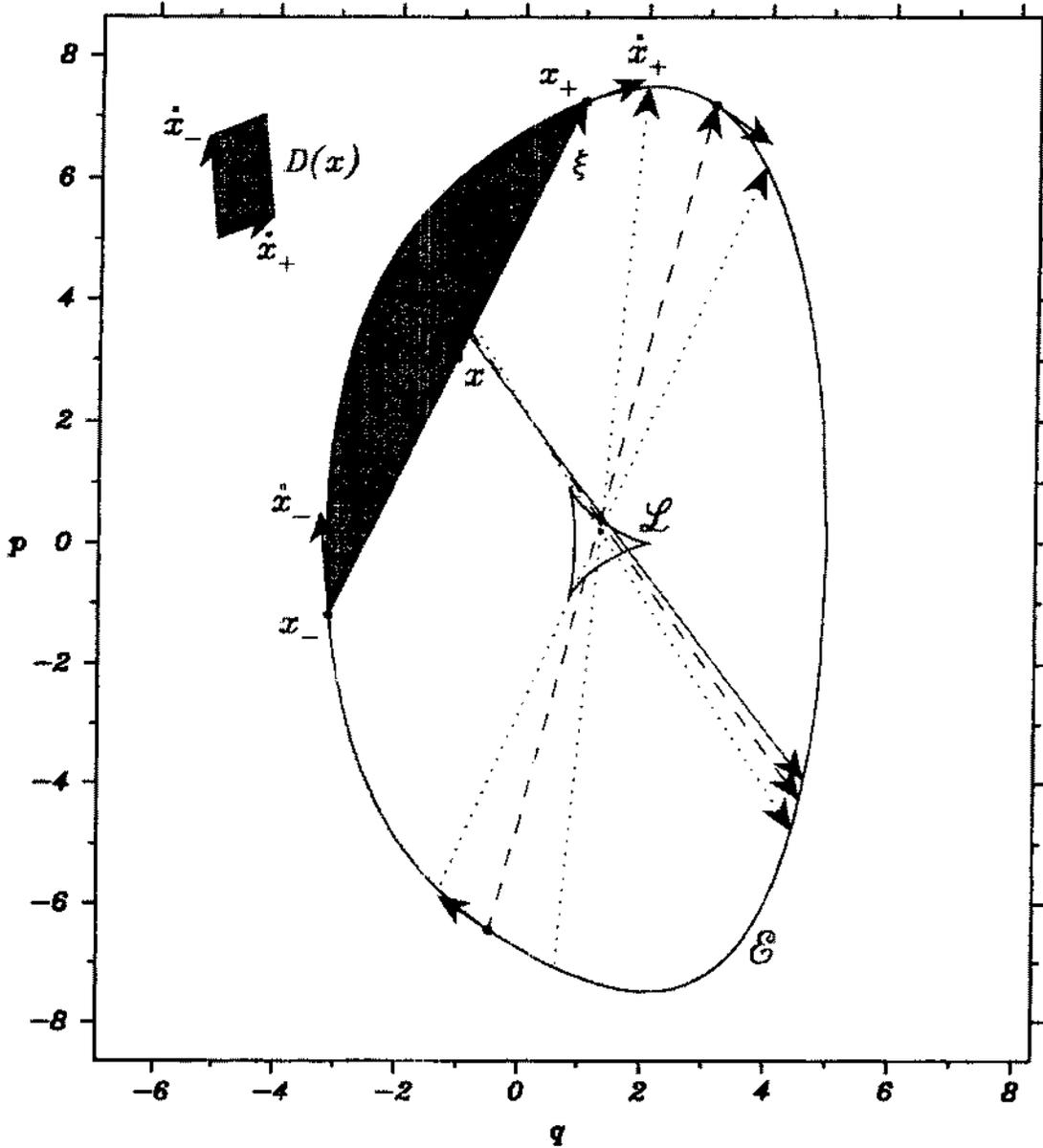


Figura 2.1: Geometria semiclássica da função de Wigner em sistemas 1-D para uma típica curva de energia constante, \mathcal{E} , suave e convexa. A ação $S(x)$ é igual à área sombreada entre a curva \mathcal{E} e a corda ξ . A corda cheia perto da cáustica de Wigner, \mathcal{L} , corresponde a um centro, x , fora dela. Quando o centro atravessa \mathcal{L} , uma bifurcação acontece. Assim, se o centro está sobre \mathcal{L} uma segunda corda aparece (cordas tracejadas). Note-se que as velocidades no espaço de fases nas pontas desta nova corda mais longa são paralelas, cancelando assim a área (2.25); para a corda mais curta isto não acontece. Finalmente, quando o centro está dentro da curva \mathcal{L} , tem-se três cordas (cordas pontilhadas). Os outros elementos da geometria estão explicados no texto.

Quando o estado tem norma finita, a função de Wigner uniforme, (2.26), está corretamente normalizada.

A aproximação de transição .

Para tornar evidente que (2.26) é uniformemente válida sobre \mathcal{E} , é preciso resolver a indeterminação devida à anulação simultânea de $D(\mathbf{x})$ e $S(\mathbf{x})$ sobre esta curva. Assim, bem perto da curva \mathcal{E} uma expansão de (2.26) conduz a

$$W_{SCL}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\pi(\omega^{-1})} \frac{2}{[\hbar^2 B(\mathbf{x})]^{1/3}} \text{Ai} \left\{ \frac{2}{[\hbar^2 B(\mathbf{x})]^{1/3}} [H(\mathbf{x}) - E] \right\}, \quad (2.28)$$

onde

$$B(\mathbf{x}) = H_q^2 H_{pp} + H_p^2 H_{qq} + 2H_{pq} H_p H_q, \quad (2.29)$$

com todas as derivadas parciais de H avaliadas em \mathbf{x} . Aquí, o denominador $B(\mathbf{x})$ mantém-se finito para pontos \mathbf{x} sobre a curva \mathcal{E} .

O limite clássico.

Este limite corresponde ao caso $\hbar = 0$ e pode ser obtido fazendo $\hbar \rightarrow 0$ em (2.28) e usando o resultado,

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{\epsilon} \text{Ai} \left(\frac{\mathbf{y}}{\epsilon} \right) = \delta(\mathbf{y}). \quad (2.30)$$

Desta forma obtém-se o resultado simples

$$W_{CL}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\pi(\omega^{-1})} \delta[H(\mathbf{x}) - E], \quad (2.31)$$

o qual representa uma distribuição uniforme ao longo da curva de energia constante E . Ao longo da cáustica de Wigner, \mathcal{L} , a função de Wigner também toma valores grandes, mas as rápidas oscilações no limite $\hbar \rightarrow 0$ cancelam a amplitude da função $-\delta$ neste caso.

Cabe lembrar que, no caso de autoestados normalizáveis, as expressões (2.28) e (2.31) também estão corretamente normalizadas. O pré-fator em (2.24) e as constantes de normalização em (2.26), (2.28) e (2.31), são para o caso de estados normalizáveis. Quando os estados não tem norma finita, as fórmulas são ainda válidas, mas aí é possível definir a

normalização usando condições de ortogonalidade se as autofunções pertencem a um conjunto ortogonal [5, 6]. Nestes casos, a frequência clássica ω não deve ser considerada nas fórmulas. Um exemplo desta situação aparecerá ao aplicarmos estas fórmulas no próximo capítulo.

Toda esta análise semiclássica para a função de Wigner para estados puros em sistemas autônomos pode ser generalizado para estados associados a toros de dimensões maiores, ou seja em sistemas integráveis com mais de um grau de liberdade. Essa análise foi fundamentalmente realizada por Ozorio de Almeida e Hannay [2], onde mostraram que o valor da função semiclássica de Wigner em qualquer ponto do espaço de fases também depende do comportamento das cordas centradas nesses pontos, cujas pontas estão sobre o toro correspondente ao autoestado em questão. A distinção com os sistemas 1-D é a multiplicidade das cordas. Por exemplo, para toros bidimensionais os autores demonstraram que o número de essas cordas é sempre par.

A generalização para mais graus de liberdade da aproximação simples (2.24) é imediata, procedendo analogamente ao caso de um grau de liberdade, mas agora usando a forma semiclássica (2.19) para as autofunções em (2.6). O resultado continua sendo uma soma de cossenos sobre as diferentes cordas centradas no ponto de avaliação da função de Wigner, com as fases sendo as áreas simpléticas dos circuitos através do toro e as respectivas cordas em unidades de h . Assim também, esta aproximação simples da função de Wigner continua divergindo sobre o toro e a “cáustica de Wigner”, que agora corresponde a uma superfície de dimensão $2L - 1$ num espaço de fases de dimensão $2L$. No caso de espaços de fases de dimensão 4, Ozorio de Almeida derivou em [3] aproximações uniformes através das cáusticas.

2.1.2 Conexão com o formalismo da mecânica clássica.

Esta “geometria semiclássica” subjacente na função de Wigner tem uma conexão íntima com o formalismo de funções geratrizes da mecânica clássica [13, 14, 12]. A conexão se baseia nas variáveis canonicamente conjugadas, $\mathbf{x} = (q, p)$ e $\boldsymbol{\xi} = (\xi_q, \xi_p)$ (os centros e as cordas respectivamente), como uma alternativa na descrição da evolução clássica.

Desta forma, ao invés de especificar os pontos $2L$ -dimensionais inicial, \mathbf{x}_- , e final, \mathbf{x}_+ , do movimento clássico no espaço de fases, pode-se dar o vetor $\boldsymbol{\xi}$, que une estes pontos, e a posição \mathbf{x} correspondendo a seu centro. A transformação canônica $\mathbf{x}_- \rightarrow \mathbf{x}_+$ estará dada implicitamente por: $\mathbf{x}_\pm = \mathbf{x} \pm \frac{1}{2}\boldsymbol{\xi}$, e pelas funções geratrizes de *centros* ou de *cordas*, das quais obtemos as correspondentes variáveis conjugadas por diferenciação :

$$\xi_q(\mathbf{x}) = -\frac{\partial S(\mathbf{x})}{\partial p} \quad ; \quad \xi_p(\mathbf{x}) = \frac{\partial S(\mathbf{x})}{\partial q} \quad , \quad (2.32)$$

ou alternativamente

$$q(\boldsymbol{\xi}) = \frac{\partial S(\boldsymbol{\xi})}{\partial \xi_p} \quad ; \quad p(\boldsymbol{\xi}) = -\frac{\partial S(\boldsymbol{\xi})}{\partial \xi_q} \quad . \quad (2.33)$$

Estas funções geratrizes, também chamadas ações de *centros* e *cordas* respectivamente, não são fundamentalmente diferentes das tradicionais funções geratrizes da mecânica clássica ¹², relacionando-se umas com as outras, e entre elas, na forma usual de inter-cambiar variáveis através de transformadas de Legendre.

Analogamente às funções geratrizes tradicionais, as funções de centros e cordas também são soluções de princípios variacionais. Assim, por exemplo, o *princípio variacional de centros no domínio temporal* estabelece que a ação de centros

$$S_t(\mathbf{x}) = \oint_{\mathbf{x}} p dq - \int H(\mathbf{x}(t)) dt \quad , \quad (2.34)$$

é estacionária ao longo da trajetória clássica percorrida num tempo t . Os caminhos clássicos a serem comparados são aqueles percorridos num tempo t , todos eles com a corda unindo o ponto inicial e final centrada em \mathbf{x} ¹³. A segunda integral sobre a Hamiltoniana

¹²Por exemplo as do tipo $S(q_+, q_-)$ que também determinam a transformação canônica $\mathbf{x}_- \rightarrow \mathbf{x}_+$ em forma implícita diferenciando:

$$p_+ = \partial S / \partial q_+ \quad , \quad p_- = -\partial S / \partial q_- \quad ;$$

ou a função geratriz (2.15) da transformação canônica que leva às variáveis de ação e ângulo cujas equações de transformação são as (2.17).

¹³Note-se que ao contrário do princípio variacional usual, definido em termos dos extremos fixos \mathbf{x}_- e \mathbf{x}_+ , aqui é o centro \mathbf{x} que é fixado.

clássica é avaliada ao longo dos caminhos, enquanto que a primeira integral define a área simplética limitada por cada caminho e sua corda.

Para o caso de sistemas autônomos sabe-se que as soluções do problema variacional são trajetórias com energia fixa, portanto neste caso usam-se os caminhos restritos à camada de energia. Pedindo ainda que os caminhos continuem sendo percorridos num tempo fixo t , nota-se que a área simplética $\oint_{\mathbf{x}} p dq$ em (2.34) não é função do tempo e sim da energia. Desta forma chega-se ao *princípio variacional de centros em energia* que estabelece que a área simplética

$$S_E(\mathbf{x}) = \oint_{\mathbf{x}} p dq , \quad (2.35)$$

para todos os caminhos sobre a camada de energia e todas as cordas centradas em \mathbf{x} , é estacionária para uma trajetória clássica. A relação entre a ação de centros no domínio temporal e a ação de centros em energia nos sistemas autônomos é simplesmente: $S_t(\mathbf{x}) = S_E(\mathbf{x}) - Et$, portanto continuam sendo válidas as relações usuais

$$E = -\frac{\partial S_t(\mathbf{x})}{\partial t} , \quad t = \frac{\partial S_E(\mathbf{x})}{\partial E} . \quad (2.36)$$

As equações de transformação (2.32) são válidas para ambas as ações .

A ação de centros $S_E(\mathbf{x})$, para uma energia fixa, é a função nas fases das expressões semiclássicas, (2.24) e (2.26), para a função de Wigner. Vemos assim, que a descrição semiclássica do autoestado dada por (2.24), ou por (2.26), é o análogo no espaço de fases da descrição no espaço de configurações que faz a aproximação WKB (2.22) para sua função de onda. Em ambos os casos as fases estão dadas por ações clássicas associadas aos toros. A divergência sobre cáusticas também é uma característica compartilhada por estas aproximações . O mecanismo pelo qual aparecem é comum a todas as fórmulas semiclássicas que são obtidas pelo método da fase estacionária. Há cáusticas quando dois ou mais pontos de fase estacionária coalescem. No caso da função de Wigner semiclássica, a cada par de pontos de fase estacionária corresponde uma corda, que desaparece quando esses pontos estacionários coalescem. Por essa razão , as cáusticas da função de Wigner semiclássica são locais onde o número de cordas muda (o toro e a cáustica de Wigner \mathcal{L}). Para a função de onda semiclássica na representação de posições os pontos estacionários

são os próprios pontos sobre o toro que coalescem na união dos vários ramos sobre o espaço de configurações (por exemplo os pontos de retorno no caso unidimensional). A forma de contornar essas singularidades nas cáusticas é através de aproximações refinadas, chamadas uniformes, aonde (2.26) é um exemplo, uniforme sobre a curva de energia constante \mathcal{E} .

2.2 A função de Husimi.

A função de Husimi é outra função de distribuição de quase-probabilidade. Corresponde ao símbolo normal do operador densidade na representação diagonal de estados coerentes [17], ou na também chamada representação de Husimi [21]. Nesta representação o símbolo normal de um operador \hat{A} é o valor médio

$$A_N(\mathbf{X}) = \langle \Omega_{\mathbf{X}} | \hat{A} | \Omega_{\mathbf{X}} \rangle . \quad (2.37)$$

onde os $|\Omega_{\mathbf{X}}\rangle$ são estados coerentes normalizados (mínima incerteza) [19, 20], autoestados do operador destruição ,

$$\hat{c} = 2^{-1/2}(\beta\hat{Q} + i\hat{P}/\beta) , \quad (2.38)$$

para o oscilador harmônico de referência:

$$\hat{H} = \hat{P}^2/2m + m\omega_r^2\hat{Q}^2/2 = \omega_r\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hbar/2 , \quad (2.39)$$

com $\beta = (m\omega_r)^{1/2}$. Estes podem ser obtidos trasladando o estado fundamental normalizado, $|\Omega_{\mathbf{X}=0}\rangle \equiv |0\rangle$, de (2.39) até a posição no espaço de fases $\mathbf{X} = (Q, P)$ de acordo com,

$$|\Omega_{\mathbf{X}}\rangle = \exp\{(i/\hbar)(P\hat{Q} - Q\hat{P})\}|0\rangle . \quad (2.40)$$

Na representação de posições o estado coerente é simplesmente (ver, por exemplo [54]):

$$\langle q | \Omega_{\mathbf{X}} \rangle = \left[\frac{\beta^2}{\pi\hbar} \right]^{1/4} \exp \left\{ -\frac{\beta^2}{2\hbar}(q - Q)^2 - i\frac{Pq}{\hbar} \right\} . \quad (2.41)$$

Desta maneira, a função de Husimi para estados puros em sistemas 1-D é

$$H(\mathbf{X}) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right) \langle \Omega_{\mathbf{X}} | \hat{\rho} | \Omega_{\mathbf{X}} \rangle = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right) |\langle \Omega_{\mathbf{X}} | \psi \rangle|^2, \quad (2.42)$$

onde o pré-fator garante a normalização à unidade sobre todo o espaço de fases. Ao contrario da função de Wigner, (2.42) mostra que a função de Husimi é sempre definida positiva exceto para alguns pontos \mathbf{X} onde pode se anular.

A representação de Husimi também pode ser vista como uma suavização Gaussiana da representação de Weyl [12]. Para ver isto, basta observar que a função de Wigner para um estado coerente é: $W_{\Omega_{\mathbf{X}}} = 1/\pi\hbar \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \|(\mathbf{x} - \mathbf{X})\|_{\beta}^2 \right\}$ ¹⁴, assim, de acordo com (2.9), temos

$$\langle \Omega_{\mathbf{X}} | \hat{A} | \Omega_{\mathbf{X}} \rangle = \int d\mathbf{x} A_W(\mathbf{x}) W_{\Omega_{\mathbf{X}}}(\mathbf{x}) = \frac{1}{\pi\hbar} \int d\mathbf{x} A_W(\mathbf{x}) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \|(\mathbf{x} - \mathbf{X})\|_{\beta}^2 \right\}, \quad (2.43)$$

onde a métrica- β está definida como

$$\|(\mathbf{x} - \mathbf{X})\|_{\beta} \equiv [\beta^2(q - Q)^2 + (p - P)^2/\beta^2]^{1/2}. \quad (2.44)$$

Então, a função de Husimi está relacionada com a função de Wigner na forma

$$H(\mathbf{X}) = \frac{1}{\pi\hbar} \int d\mathbf{x} W(\mathbf{x}) \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \|(\mathbf{x} - \mathbf{X})\|_{\beta}^2 \right\}, \quad (2.45)$$

a qual define, segundo (2.11), a projeção da função de Wigner sobre os estados coerentes. Cabe notar aqui que, enquanto a representação de Weyl é invariante frente a transformações simpléticas (transformações canônicas lineares), a introdução da métrica (2.44) implica que esta invariança simplética não se mantém na função de Husimi.

O fato dos estados coerentes serem autoestados do operador destruição dá a eles propriedades analíticas as quais são transmitidas à função de Husimi [19, 20]. A parte analítica da função de Husimi pode ser separada usando estados coerentes não normalizados $|z\rangle$, tais que $|\Omega_{\mathbf{X}}\rangle \equiv \exp\{-\bar{z}z/2\hbar\}|z\rangle$, assim temos

$$H(z) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \right) \exp\{-\bar{z}z/\hbar\} |(z|\psi)|^2, \quad (2.46)$$

¹⁴O cálculo consiste em usar a representação de posições dos estados coerentes (2.41) em (2.6); a integração que fica corresponde à transformada de Fourier de uma função Gaussiana.

onde as coordenadas,

$$z = 2^{-1/2}(\beta Q - iP/\beta) \quad , \quad \bar{z} = 2^{-1/2}(\beta Q + iP/\beta) \quad , \quad (2.47)$$

representam o espaço de fases complexo para sistemas 1-D.

A função $\langle z|\psi\rangle$ é a função de onda do estado quântico numa representação da mecânica quântica introduzida por Bargmann [18] (no caso do grupo de Heisenberg-Weyl), onde a base do espaço de Hilbert são os estados coerentes não normalizados. Na representação de Bargmann as funções de onda são funções holomórficas (enteras) na variável z ¹⁵, considerada como uma coordenada no espaço de fases. Existem representações deste tipo para varios outros grupos [19, 20], e em geral são chamadas de representações de estados coerentes. Análises semiclássicas de funções de onda para sistemas 1-D neste tipo de representações foram desenvolvidas por Voros [17], para o caso do grupo de Weyl, e por Kurchan *et.al* [23] em um tratamento unificado de varios grupos. Usando uma construção do tipo WKB para a função de onda na representação de Bargmann, Voros [17] derivou uma aproximação semiclássica para a função de Husimi em sistemas 1-D. A modo de exemplo, no Apêndice D.1, apresenta-se esta construção para o caso dos autoestados de energia no problema de uma partícula sujeita a uma força constante. No capítulo seguinte, nós derivaremos uma aproximação semiclássica para a função de Husimi baseada na “geometria semiclássica” da função de Wigner que acabamos de expôr. Para o problema da caixa, a função de Husimi obtida pelo método WKB complexo do Apêndice D.1 e nossa aproximação geométrica estão comparadas na seção 3.3.

¹⁵É simples ver que a expansão de $\langle z|\psi\rangle$ na base de autoestados, $|\pi\rangle$, do oscilador harmônico de referência (2.39) é a serie holomorfa

$$\langle z|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{z^n}{\sqrt{\hbar^n n!}} \langle \pi|\psi\rangle \quad .$$

Capítulo 3

Approximação geométrica para os zeros da função de Husimi.

O interesse fundamental neste capítulo é mostrar como a estrutura geométrica de cordas da função de Wigner, descrita no capítulo anterior, reaparece num tratamento semiclássico da função de Husimi. Mostraremos como esta estrutura permite aproximar semiclassicamente as posições dos zeros da função de Husimi. O caminho será via uma aproximação semiclássica da fórmula (2.45) que define a função de Husimi como uma projeção da função de Wigner sobre estados coerentes.

Nós aqui vamos construir uma expressão semiclássica para a função de Husimi em sistemas autônomos com um grau de liberdade, os quais necessariamente são integráveis, e vamos ver como a estrutura semiclássica de cordas obriga os zeros a se alinharem. Vamos ver também como estas linhas estão sobre *vales* rasos da função de Husimi. Assim obteremos uma explicação geométrica para a hipótese de Leboeuf e Voros para este tipo de sistema.

Apesar de termos limitado nosso estudo a sistemas 1-D autônomos, as aproximações serão igualmente válidas para mapas clássicos integráveis do plano sobre si mesmo. Como a estrutura de cordas da função de Wigner generaliza-se para toros de mais dimensões [2, 3], os métodos a serem desenvolvidos neste capítulo também serão aplicáveis em sistemas integráveis com mais de um grau de liberdade. Os resultados deste capítulo foram publicados em [27].

Como um modelo simples de nossa aproximação geométrica para a função de Husimi,

a seguir encontraremos uma expressão semiclassical para a função de Husimi no caso de uma partícula livre numa caixa com paredes rígidas.

3.1 A partícula numa caixa.

Como caixa escolhemos o potencial clássico simétrico:

$$V(q) = \begin{cases} 0 & |q| \leq \frac{l}{2} \\ +\infty & |q| > \frac{l}{2} \end{cases} \quad (3.1)$$

A distribuição de zeros analisada semiclassicamente é aquela da função de Husimi associada aos autoestados de energia, que aqui correspondem aos estados pares cujas funções de onda na representação de posições estão dadas por:

$$\langle q|\psi_n\rangle = \begin{cases} (2/l)^{1/2} \cos(p_n q/\hbar) & |q| \leq \frac{l}{2} \\ 0 & |q| > \frac{l}{2} \end{cases} \quad \text{com } p_n = \pi\hbar(n+1)/l \text{ (} n \text{ par) ,} \quad (3.2)$$

onde p_n é o módulo do momento clássico proporcional à energia da partícula livre. O limite semiclassical, para um dado p_n , corresponde ao limite de n 's grandes que correspondem a valores quantizados de $\hbar \rightarrow 0$.

A função de Husimi para cada um destes autoestados pode ser calculada em termos da função erro, $\Phi(w) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^w e^{-y^2} dy$, partindo da fórmula (2.42) que dá a função de Husimi como projeção do autoestado em estados coerentes (ver Apêndice A.1),

$$\begin{aligned} H(Q, P) = & \frac{1}{8l\beta\sqrt{\pi\hbar}} \left\{ e^{-\frac{(P-p_n)^2}{\hbar\beta^2}} \left| \Phi\left(\frac{z_1}{\sqrt{2\hbar}}\right) + \Phi\left(\frac{z_2}{\sqrt{2\hbar}}\right) \right|^2 \right. \\ & + e^{-\frac{(P+p_n)^2}{\hbar\beta^2}} \left| \Phi\left(\frac{z_3}{\sqrt{2\hbar}}\right) + \Phi\left(\frac{z_4}{\sqrt{2\hbar}}\right) \right|^2 \\ & + 2 e^{-\frac{(P^2+p_n^2)}{\hbar\beta^2}} \Re \left[e^{-\frac{i2p_n Q}{\hbar}} \left(\overline{\Phi\left(\frac{z_1}{\sqrt{2\hbar}}\right) + \Phi\left(\frac{z_2}{\sqrt{2\hbar}}\right)} \right) \right. \\ & \left. \left. \times \left(\Phi\left(\frac{z_3}{\sqrt{2\hbar}}\right) + \Phi\left(\frac{z_4}{\sqrt{2\hbar}}\right) \right) \right] \right\} , \quad (3.3) \end{aligned}$$

onde $z_1 = \beta(\frac{l}{2} + Q) - i(P - p_n)/\beta$, $z_2 = \beta(\frac{l}{2} - Q) + i(P - p_n)/\beta$, $z_3 = \beta(\frac{l}{2} + Q) - i(P + p_n)/\beta$ e $z_4 = \beta(\frac{l}{2} - Q) + i(P + p_n)/\beta$; (a sobrelinha em (3.3) indica conjugação complexa). Os

pontos onde $z_1 = z_2 = z_3 = z_4 = 0$ definem os vértices da "caixa no espaço de fases" determinada pelas linhas $Q = -l/2$ e $Q = l/2$ (nos limites da caixa nas coordenadas de posição) e os ramos da trajetória clássica (Fig.3.1).

A análise semiclássica de (3.3) pode ser feita com ajuda da expansão assintótica da função erro $\Phi(w)$ para valores de $|w|$ suficientemente grandes, i.e $\hbar \rightarrow 0$ neste caso (Apêndice A.1). Substituindo cada $\Phi(w)$ pelos primeiros termos desta expansão,

$$\Phi(w) \approx \begin{cases} 1 - \frac{e^{-w^2}}{\sqrt{\pi w}} & \Re(w) \gg 1 \\ -1 - \frac{e^{-w^2}}{\sqrt{\pi w}} & \Re(w) \ll -1 \end{cases} \quad (3.4)$$

obtem-se uma boa aproximação de (3.3) exceto numa faixa estreita ao longo das linhas $Q = -l/2$ e $Q = l/2$, a qual vai-se contraindo quando $\hbar \rightarrow 0$. Na região de interesse, ou seja dentro da "caixa no espaço de fases", isto pode ser observado comparando os gráficos (a) e (b) na Fig.3.1. No entanto a função $\Phi(w)$ aproxima-se à unidade, no limite $|w| \rightarrow +\infty$, na região $|\Im(w)| < \Re(w)$ ($\Re(w) > 0$). A interseção destas regiões para cada função erro em (3.3) define um retângulo central. Este retângulo é aquele que aparece nos gráficos (a) e (b) na Fig.3.1. Desta maneira, no limite semiclássico, a função de Husimi está bem representada por,

$$\begin{aligned} H(Q, P) &\approx \frac{1}{2l\beta\sqrt{\pi\hbar}} \left\{ e^{-\frac{(P-p_n)^2}{\hbar\beta^2}} + e^{-\frac{(P+p_n)^2}{\hbar\beta^2}} + 2 e^{-\frac{(P^2+p_n^2)}{\hbar\beta^2}} \cos(2p_n Q/\hbar) \right\} = \\ &= \frac{1}{l\beta\sqrt{\pi\hbar}} e^{-\frac{P^2}{\hbar\beta^2}} e^{-\frac{p_n^2}{\hbar\beta^2}} \left\{ \cosh(2p_n P/\beta^2\hbar) + \cos(2p_n Q/\hbar) \right\}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

dentro desse retângulo. Esta expressão é explicitamente positiva em toda parte, exceto nos seus zeros restritos ao eixo $P = 0$, onde simplifica-se para,

$$H(Q, P = 0) \approx \frac{2}{l\beta\sqrt{\pi\hbar}} e^{-\frac{p_n^2}{\hbar\beta^2}} \left\{ \cos^2(p_n Q/\hbar) \right\}. \quad (3.6)$$

Por outro lado, como vimos em 2.2 a função de Husimi pode ser obtida também como uma suavização Guassiana da função de Wigner. Assim, é possível obter uma aproximação semiclássica de (3.3) efetuando a integral com a função Guassiana (2.45) sobre uma função

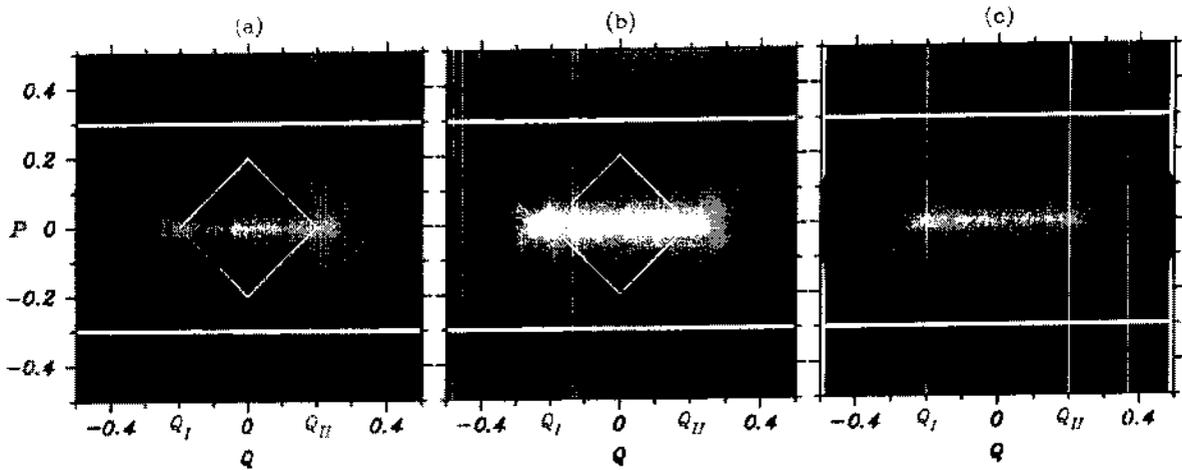


Figura 3.1: Gráficos da função de Husimi para um autoestado par no problema da partícula numa caixa com paredes rígidas. A amplitude da função em cada ponto corresponde a uma intensidade numa escala logarítmica de cores cinzas; assim os lugares mais escuros correspondem a valores crescentes da amplitude. (a) Calculada numericamente de (2.42) e (3.2). (b) Aproximando as funções erro em (3.3) por (3.4). (c) Suavizado da função de Wigner simplificada, (3.9). Os pontos brancos representam zeros. Os segmentos brancos horizontais são os ramos da trajetória clássica $|p_n| = 0.3$ entre os limites da caixa em Q , junto com os quais formam a “caixa no espaço de fases” citada no texto. O retângulo central encerra a interseção das regiões $|\Im(w)| < \Re(u)$ com $\Re(w) > 0$, para todas as funções erro em (3.3). As linhas verticais no gráfico (c) encerra a interseção das mesmas regiões para as fuções erro em (3.9).

que reproduza, nos seus aspectos essenciais, o comportamento da função de Wigner no limite semiclassico. A função de Wigner para um autoestado neste problema é zero fora da caixa, enquanto dentro está dada por [12]:

$$W(q, p) = \frac{1}{2l} \left\{ \frac{\sin(2(p - p_n)y/\hbar)}{\pi(p - p_n)} + \frac{\sin(2(p + p_n)y/\hbar)}{\pi(p + p_n)} + 2 \cos(2p_n q/\hbar) \frac{\sin(2py/\hbar)}{\pi p} \right\} \quad (3.7)$$

onde $y = \frac{l}{2} - q$ if $0 \leq q \leq \frac{l}{2}$ and $y = \frac{l}{2} + q$ if $-\frac{l}{2} \leq q < 0$ ¹. Com ajuda da fórmula $\delta(x - x_0) = \lim_{L \rightarrow +\infty} \sin[L(x - x_0)]/\pi(x - x_0)$ observa-se que, semiclassicamente, o esqueleto da função de Wigner (3.7) é

$$W(q, p) \sim \frac{1}{2l} \{ \delta(p - p_n) + \delta(p + p_n) + 2 \delta(p) \cos(2p_n q/\hbar) \} \quad (3.8)$$

Substituindo esta expressão em (2.45) e limitando a integral ao intervalo $(-l/2, l/2)$ temos

$$H_{SCL}(Q, P) = \frac{1}{4l\beta\sqrt{\pi\hbar}} \left\{ \left(e^{-\frac{(P-p_n)^2}{\hbar\beta^2}} + e^{-\frac{(P+p_n)^2}{\hbar\beta^2}} \right) \left(\Phi\left(\frac{z'_1}{\sqrt{\hbar}}\right) + \Phi\left(\frac{z'_2}{\sqrt{\hbar}}\right) \right) \right\}$$

¹Note-se que contrariamente à função de Husimi (3.3), a função de Wigner é nula fora da caixa.

$$+ 2 e^{-\frac{(p^2+p_n^2)}{h\beta^2}} \Re e \left[e^{-\frac{i2p_n Q}{h}} \left(\Phi\left(\frac{z'_3}{\sqrt{h}}\right) + \Phi\left(\frac{z'_4}{\sqrt{h}}\right) \right) \right] \Bigg\} , \quad (3.9)$$

onde $z'_1 = \beta(\frac{1}{2} + Q)$, $z'_2 = \beta(\frac{1}{2} - Q)$, $z'_3 = \beta(\frac{1}{2} + Q) - ip_n/\beta$ and $z'_4 = \beta(\frac{1}{2} - Q) + ip_n/\beta$. Neste caso podemos substituir cada função erro pela unidade só na região central entre as linhas verticais $Q_I = -l/2 + p_n/\beta^2$ e $Q_{II} = l/2 - p_n/\beta^2$ (Fig 3.1(c)) recuperando assim (3.5). Desta forma, também recuperamos a posição do k -ésimo zero ao longo do eixo,

$$Q_k = (2k + 1) \frac{\pi \hbar}{2p_n} , \quad (3.10)$$

de acordo com (3.6), levando em conta que $Q_I < Q_k < Q_{II}$. Na Fig.3.2 nós comparamos, sobre o eixo Q , o cálculo numérico da expressão (3.3), da aproximação assintótica que se obtém ao substituir em (3.3) a expansão (3.4) e nossa aproximação (3.9) baseada em (3.8).

A forma da expressão (3.5) indica porque os zeros da função de Husimi estão linearmente distribuídos dentro da curva de energia constante (neste caso a “caixa no espaço de fases”). O termo com o cosseno hiperbólico tem seus menores valores ao longo do eixo Q , os quais coincidem com a amplitude do cosseno no segundo termo. Fora do eixo $P = 0$, o cosseno hiperbólico domina, levando a soma de ambos os termos à valores positivos. Assim, forma-se um *vale* ao longo desse eixo. Os zeros ao longo do vale estão determinados pelos mínimos valores das oscilações do cosseno. O vale formado é muito raso já que a função de Husimi decai exponencialmente fora da região clássica, mas mesmo assim podemos calcular os mínimos locais. A ordem para o espaçamento dos zeros é $O(\hbar)$, dada pela fase do cosseno no segundo termo.

Como os sistemas 1-D autônomos sempre tem uma dinâmica clássica integrável, os zeros da função de Husimi estarão distribuídos ao longo de linhas, como foi sugerido em [24]. O fato destas linhas, dentro da curva de energia constante, serem *vales* da função de Husimi é uma característica geral destes sistemas como veremos também nas próximas seções deste capítulo. Parece ser uma característica geral que, quando o número de zeros é grande, os vales bifurquem-se nos casos de sistemas onde a curva de energia constante é fechada. Para uma energia fixa, em sistemas com estados ligados, espera-se que as

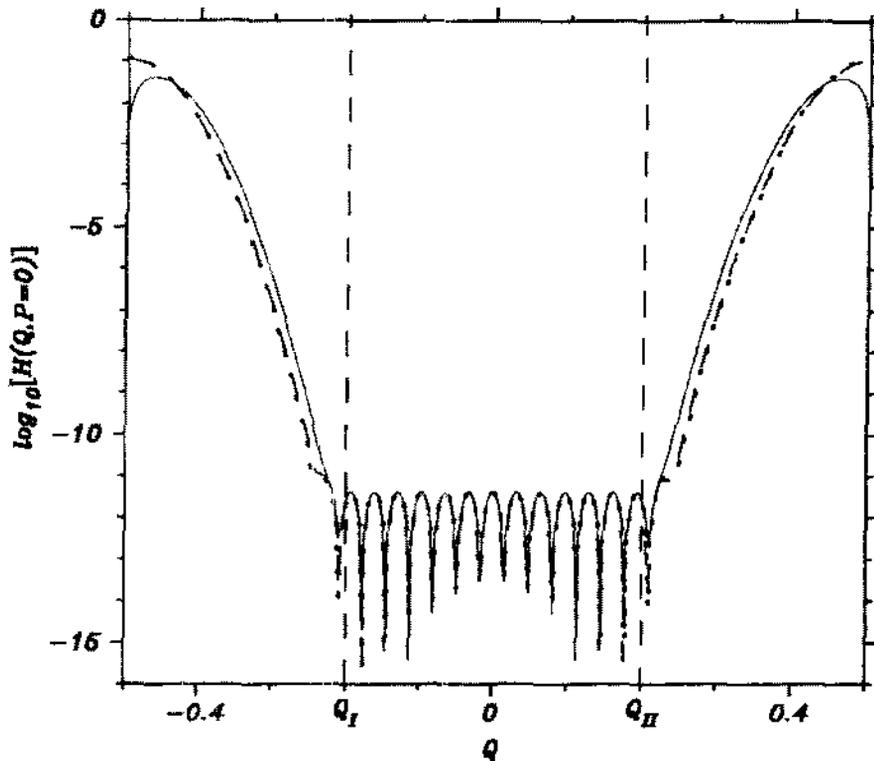


Figura 3.2: A função de Husimi sobre o eixo $P = 0$ para os gráficos da Fig.3.1. A curva **pontilhada** corresponde ao gráfico (a), a curva **tracejada** corresponde ao gráfico (b) e a **cheia** para o gráfico (c). As linhas tracejadas verticais delimitam a região de validade da aproximação (3.6).

aproximações semiclássicas funcionem bem para números quânticos grandes. Como o número de zeros da função de Husimi cresce com o número quântico [17], é de se esperar que estas bifurcações aconteçam no regime semiclássico.

Para o problema da caixa, o vale bifurca perto dos pontos Q_I e Q_{II} no eixo Q (Fig.3.1). Embora nossa aproximação (3.9) descreva os vales após a bifurcação, não existem oscilações neles que dêem uma indicação da presença de zeros (ver gráficos (c) da Fig.3.1). A ausência de zeros nestes vales mostra que a aproximação (3.8) para a função de Wigner não é válida perto das bordas da caixa. De fato, enquanto a função de Wigner (3.7) decresce até anular-se nas bordas da caixa, a expressão (3.8) não decresce na direção do eixo Q e não se anula sobre este.

É importante notar que a única aproximação usada para obter (3.9) foi tomar (3.8) como a função de Wigner. Nenhuma aproximação foi feita na integral da suavização

Gaussiana. Se estendermos os limites de integração para infinito, no suavizado da função de Wigner, obtem-se a expressão (3.5) para todos os pontos dentro da caixa. Nesta aproximação não existem bifurcações do vale. Mas estender os limites de integração para infinito é equivalente a aproximar as funções erro em (3.9) pela unidade, o qual sabemos que não é válido nas regiões onde acontecem as bifurcações na função de Husimi.

3.2 Nossa aproximação geométrica.

No exemplo da caixa nós obtivemos uma aproximação para a função de Husimi suavizando uma expressão que representa o esqueleto da função de Wigner no limite semiclássico (3.8). Isto deu-nos o comportamento geral dentro da curva de energia e permitiu-nos encontrar a distribuição de zeros, embora não muito perto das bordas da caixa. Aqui, vamos aplicar um esquema similar em funções de Husimi associadas a autoestados de energia em sistemas onde as aproximações semiclássicas de Berry às funções de Wigner sejam válidas (ver 2.1.1).

A aproximação semiclássica para a função de Wigner ideal para usar na suavização Gaussiana (2.45) seria a aproximação uniforme (2.26), mas o problema está na dificuldade da integração. Um caminho alternativo para evitar essa dificuldade está baseado na observação de que o esqueleto da aproximação uniforme essencialmente consiste num pico do tipo função de Airy perto da curva \mathcal{E} , o qual no limite semiclássico vira uma função delta (2.31) ao longo dela, e oscilações dentro que estão bem representadas pela aproximação simples de Berry (2.24) enquanto nos afastarmos de \mathcal{E} . Assim, para os pontos de avaliação, \mathbf{X} , perto da curva de energia, a função de Husimi estará bem representada só pela integral

$$I(\mathbf{X}) = \frac{1}{2\pi^2\hbar(\omega^{-1})} \int d\mathbf{x} \delta[H(\mathbf{x}) - E] \exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\|(\mathbf{x} - \mathbf{X})\|_\beta^2\right\}, \quad (3.11)$$

já que a integral sobre a parte oscilatória da função de Wigner é desprezível ali. Esta função é positiva em toda parte, suave, e concentra-se ao longo da curva de energia \mathcal{E} onde tem seus máximos. Evidentemente, esta integral é dominada pela região onde $\|(\mathbf{x} - \mathbf{X})\|_\beta^2$ é mínimo: aproximadamente $\frac{D}{\sqrt{2\pi\hbar}} \exp\left\{-\frac{1}{\hbar}\|(\mathbf{x}_c(\beta) - \mathbf{X})\|_\beta^2\right\}$, onde $\mathbf{x}_c(\beta)$ é o ponto sobre

\mathcal{E} mais perto do ponto \mathbf{X} no sentido da norma $\|\cdot\|_{\beta}$. Assim, perto da curva de energia, esta integral é essencialmente a aproximação semiclássica de uma função Gaussiana ao redor do toro, primeiramente encontrada por Takahashi [22] numa abordagem de tipo geométrica, e rederivada por Kurchan *et. al.* [23] no contexto da representação de Bargmann.

Nenhuma destas aproximações têm oscilações que indiquem a presença de zeros. Portanto, para os pontos de avaliação da função de Husimi afastados de \mathcal{E} , nós adicionamos à integral da função delta, uma integral local sobre a aproximação simples (2.24). Isto está em acordo com o espírito da expressão (3.8) do problema da partícula dentro da caixa. A única diferença é que neste caso as oscilações do cosseno estão espalhadas dentro do toro \mathcal{E} ao invés de concentrar-se como uma função delta ao longo do eixo Q , pela particular geometria da região clássica na caixa. A integração (2.45) sobre a aproximação simples, dentro de \mathcal{E} , pode ser calculada analiticamente fazendo algumas aproximações adicionais (para mais detalhes ver Apêndice B.1). A função Gaussiana em (2.45) define uma área efetiva para a integração centrada em \mathbf{X} . Esta área efetiva para o suavizado, pode ser caracterizada como a área de valor $2\pi\hbar$ encerrada pela elipse,

$$\frac{1}{\hbar} \|(\mathbf{x} - \mathbf{X})\|_{\beta}^2 = 2 \quad (3.12)$$

Então, dentro desta área podemos aproximar a ação em (2.24) por

$$S(\mathbf{x}) \approx S(\mathbf{X}) + \xi(\mathbf{X}) \wedge (\mathbf{x} - \mathbf{X}), \quad (3.13)$$

no limite semiclássico. Como o denominador em (2.24) não depende de \hbar , nos tomamos a aproximação mais simples,

$$D(\mathbf{x}) \approx D(\mathbf{X}). \quad (3.14)$$

Desta maneira o resultado para nossa aproximação à função de Husimi é

$$H_{SCL}(\mathbf{X}) = \frac{2}{\pi\sqrt{2\pi\hbar}(\omega^{-1})} \frac{\exp\{-\|\xi(\mathbf{X})\|_{\beta}^2/4\hbar\}}{\sqrt{D(\mathbf{X})}} \cos\left\{\frac{S(\mathbf{X})}{\hbar} - \frac{\pi}{4}\right\} + I(\mathbf{X}). \quad (3.15)$$

Como encontramos no problema da caixa, os zeros da função de Husimi dentro da curva de energia estão localizados num vale em sistemas 1-D. A aproximação (3.15) contém todos os ingredientes geométricos para entender a origem deste vale. Entanto que $I(\mathbf{X})$ é aproximadamente uma Gaussiana de argumento proporcional à distância desde \mathbf{X} até a camada de energia, a amplitude do termo oscilatorio é proporcional a uma Gaussiana cujo argumento é proporcional à metade do comprimento da corda centrada em \mathbf{X} . Longe da camada ambas as Gaussianas serão pequenas, mas a amplitude das oscilações será menor porque $\|\xi(\mathbf{X})\|_\beta \geq 2 \|(\mathbf{x} - \mathbf{X})\|_\beta$. Só quando a fase das oscilações é $(2k \pm 1/2)\pi$ e $\|\xi(\mathbf{X})\|_\beta$ toma seu valor máximo, sujeita a essa restrição, é que temos mínimos relativos isolados em (3.15). Logo, o vale onde estes mínimos estão define-se introduzindo um multiplicador de Lagrange λ e minimizando a função clássica

$$\|\xi(\mathbf{X})\|_\beta - \lambda S(\mathbf{X}), \quad (3.16)$$

para sucessivos valores de S .

As oscilações adicionadas ao vale pelo primeiro termo em (3.15) comumente geram mínimos ao invés de zeros ao longo dele. Estes mínimos aproximam-se dos zeros da função de Husimi quando $\hbar \rightarrow 0$. No entanto, alguns destes mínimos podem ser negativos nesta aproximação. Para solucionar este problema incluímos o termo de segunda ordem, $\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{X}) \mathcal{H}(\mathbf{X})(\mathbf{x} - \mathbf{X})^t$, na expansão da ação de centros (3.13), com a matriz Hessiana sendo

$$\mathcal{H}(\mathbf{X}) = \begin{bmatrix} \partial_{qq}^2 S = \partial_q(\xi_p) & \partial_{qp}^2 S = \partial_p(\xi_p) \\ \partial_{pq}^2 S = -\partial_q(\xi_q) & \partial_{pp}^2 S = -\partial_p(\xi_q) \end{bmatrix}, \quad (3.17)$$

e onde já aplicamos as relações (2.32) para o gradiente de $S(\mathbf{x})$. Desta forma, nossa aproximação refinada é

$$H_{SCL}(\mathbf{X}) = \frac{2}{\pi \sqrt{2\pi\hbar}(\omega^{-1})} \frac{\exp\{-\Theta(\mathbf{X})/4\hbar\}}{\sqrt{|D(\mathbf{X})| \det \mathcal{A}(\mathbf{X})|}} \times \cos \left\{ \frac{S(\mathbf{X})}{\hbar} - \frac{\pi}{4} + \frac{\Phi(\mathbf{X})}{4\hbar} - \frac{\arg[\det \mathcal{A}(\mathbf{X})]}{2} \right\} + I(\mathbf{X}), \quad (3.18)$$

² "t" significa transposição.

onde $\mathcal{A}(\mathbf{X})$ é a matriz complexa,

$$\mathcal{A}(\mathbf{X}) = - \begin{bmatrix} \beta^2 & 0 \\ 0 & 1/\beta^2 \end{bmatrix} + \frac{i}{2} \mathcal{H}(\mathbf{X}), \quad (3.19)$$

o argumento da exponencial é

$$\Theta(\mathbf{X}) = \frac{\|\xi(\mathbf{X})\|_\beta^2 (1 - \det \mathcal{H}(\mathbf{X})/4) + \frac{1}{2} \xi(\mathbf{X}) \mathcal{H}(\mathbf{X}) \xi^t(\mathbf{X}) (\partial_q(\xi_p)/2\beta^2 - \beta^2 \partial_p(\xi_q)/2)}{|\det \mathcal{A}(\mathbf{X})|^2}, \quad (3.20)$$

e a fase do cosseno:

$$\Phi(\mathbf{X}) = \frac{-\|\xi(\mathbf{X})\|_\beta^2 (\partial_q(\xi_p)/2\beta^2 - \beta^2 \partial_p(\xi_q)/2) + \frac{1}{2} \xi(\mathbf{X}) \mathcal{H}(\mathbf{X}) \xi^t(\mathbf{X}) (1 - \det \mathcal{H}(\mathbf{X})/4)}{|\det \mathcal{A}(\mathbf{X})|^2} \quad (3.21)$$

³. Se usarmos só a aproximação em primeira ordem para a ação de centros (3.13), a matriz Hessiana se anula, então, $\det \mathcal{A}(\mathbf{X}) = -1$, $\Theta(\mathbf{X}) = \|\xi(\mathbf{X})\|_\beta^2$ e $\Phi(\mathbf{X}) = 0$ e recuperamos assim a aproximação (3.15). Todas as correções a (3.15) dependem só do Hamiltoniano clássico e o parâmetro β . A última correção à fase em (3.18) é semiclassicamente pequena. No caso de estados não normalizáveis, os pré-fatores em (3.11), (3.15) e (3.18), mudam de acordo com a definição de normalização para este tipo de estados, como já antecipamos em 2.1.1 (na seção 3.3 mostra-se um exemplo).

As expressões (3.15) e (3.18) são válidas somente dentro da curva de energia e dependem só das propriedades da curva \mathcal{E} , como no caso da função de Wigner semiclassical. A aproximação de segunda ordem à ação de centros, com a qual obtivemos (3.18), só introduz pequenas correções ao argumento da exponencial e especialmente à fase do cosseno. Estas correções à fase do cosseno melhoram as posições dos mínimos sobre o vale e desta forma a aproximação dos zeros da função de Husimi.

Como fundamentalmente estamos interessados na distribuição de zeros dentro da curva de energia, o fato do denominador em (3.15) anular-se sobre \mathcal{E} não constitui em problema sério já que só as pontas do vale estão perto desta curva. Nessa região, a aproximação simples (2.24) mais a função delta (2.31) não representam uma boa aproximação da função de Wigner. Portanto, as aproximações (3.15) e (3.18) não são válidas perto da curva \mathcal{E}

³Para mais detalhes desta derivação ver o Apêndice B.1

onde é preferível usar simplesmente (3.11). O ponto de avaliação x , da função de Wigner, que efetivamente contribui ao suavizado (2.45), está dentro da elipse (3.12) centrada no ponto de avaliação X , da função de Husimi. É por esta razão que nossas aproximações baseadas no esqueleto da função de Wigner deixam de ser válidas onde a elipse de centro X aproxima-se de \mathcal{E} . Como a forma da elipse depende do parâmetro β , as regiões onde a aproximação geométrica é válida também dependerão deste parâmetro.

Vamos analisar agora o fato das aproximações geométricas (3.15) e (3.18) contérem só a contribuição de uma única corda, mesmo para pontos dentro da cáustica de Wigner, os quais são centros de três cordas diferentes (Fig.2.1). Como a dependência no comprimento da corda é Gaussiana as amplitudes dos primeiros termos em (3.15) e (3.18), são desprezíveis para as cordas compridas ⁴, isto permite manter só a corda mais curta na função de Husimi. Mais ainda, nós não temos que considerar nem mesmo a cáustica pois o vale de zeros não é afetado por esta, como mostraremos nas próximas seções deste capítulo. Embora a aproximação simples (2.24), usada na suavização Gaussiana para obter os primeiros termos de (3.15) e (3.18), falha ao longo da cáustica, predizendo uma singularidade espúria, o pico tipo Airy correto não contraria o fato das cordas coalescentes, responsáveis por esta catástrofe, serem maiores que a terceira corda que sobrevive, pois a curva \mathcal{L} é o local de cordas máximas. Portanto, a função de Husimi estará dominada por essa única corda isolada sobre \mathcal{L} , a qual gera oscilações do tipo cosseno bem descritas pela teoria "simples". Assim, a soma sobre diferentes cordas, que aparece na aproximação simples (2.24), não é necessária em (3.15) e (3.18). Nós só temos que considerar a corda que é continua através de cada um dos dois lados de \mathcal{L} que cortam o vale (ver Fig.2.1).

Nas próximas duas seções deste capítulo apresentamos dois exemplos para mostrar como (3.15) e (3.18) operam. O primeiro exemplo corresponde a um problema não ligado cuja curva de energia é aberta e não tem uma cáustica de Wigner \mathcal{L} . Neste problema a maior parte dos cálculos podem ser realizados analiticamente. O segundo, é um problema ligado com uma curva fechada de energia que é suave e convexa. Este exemplo tem uma cáustica de Wigner. Todos os cálculos neste problema foram feitos numericamente.

⁴Com o comprimento definido através da norma (2.44).

3.3 A partícula sujeita a uma força constante.

Aplicamos nossa aproximação geométrica ao problema da partícula sujeita a uma força constante, F , cuja função Hamiltoniana clássica é: $H(\mathbf{x}) = p^2/2m - Fq$. Este é um problema não ligado com espectro de energia contínuo onde as autofunções podem ser normalizadas a uma função delta (i.e., $\int_{-\infty}^{+\infty} \langle \psi_{E'} | q \rangle \langle q | \psi_E \rangle dq = \delta(E' - E)$), [6],

$$\langle q | \psi_E \rangle = \frac{1}{|F|^{1/2}} \left[\frac{2m|F|}{\hbar^2} \right]^{1/3} \text{Ai} \left\{ -(q - q_r) \left[\frac{2mF}{\hbar^2} \right]^{1/3} \right\}, \quad (3.22)$$

com o valor $q_r = -E/F$ correspondendo ao ponto de retorno da trajetória clássica para uma energia E . A função de Wigner neste caso é dada por [5, 6]

$$W(\mathbf{x}) = \left[\frac{8m}{\hbar^2 F^2} \right]^{1/3} \text{Ai} \left\{ \left[\frac{8m}{\hbar^2 F^2} \right]^{1/3} (H(\mathbf{x}) - E) \right\}. \quad (3.23)$$

É fácil verificar que esta expressão coincide com (2.28) (com o pré-fator igual à unidade para este problema não ligado, de acordo à normalização escolhida acima), portanto a aproximação de transição para a função de Wigner é exata neste caso.

A função de Husimi pode ser calculada analiticamente (Apêndice C.1),

$$\begin{aligned} H(\mathbf{X}) &= |B|^2 \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \left(\frac{P^2}{\beta^2} + \frac{2mF}{\beta^2} Q \right) \right\} \times \\ &\times \left| \text{Ai} \left\{ -\left(Q - Q_* - iP/\beta^2 \right) \left[\frac{2mF}{\hbar^2} \right]^{1/3} \right\} \right|^2, \end{aligned} \quad (3.24)$$

onde $Q_* = q_r + mF/2\beta^4$ e $|B|^2$ é a constante de normalização. A distribuição de zeros, no lado côncavo da curva \mathcal{E} , é mostrada na Fig.3.3.

Como os zeros são aqueles da função de Airy em (3.24), que só existem para argumento real negativo, a distribuição de zeros é ao longo do eixo Q ⁵. Para uma energia E o ponto de retorno clássico está fixado e assim também Q_* , então mudando a escala das coordenadas \mathbf{X} podemos fazer a função de Airy em (3.24) invariante frente a mudanças de \hbar . Devido a

⁵Cabe notar aqui que os zeros que podem ser observados, no lado convexo da curva \mathcal{E} na Fig.3.3 (cantos superior e inferior esquerdos), aparecem devido ao cálculo numérico da expressão (3.24). Estes não são zeros da função de Husimi deste problema, os quais somente estão no eixo Q no lado côncavo da curva de energia.

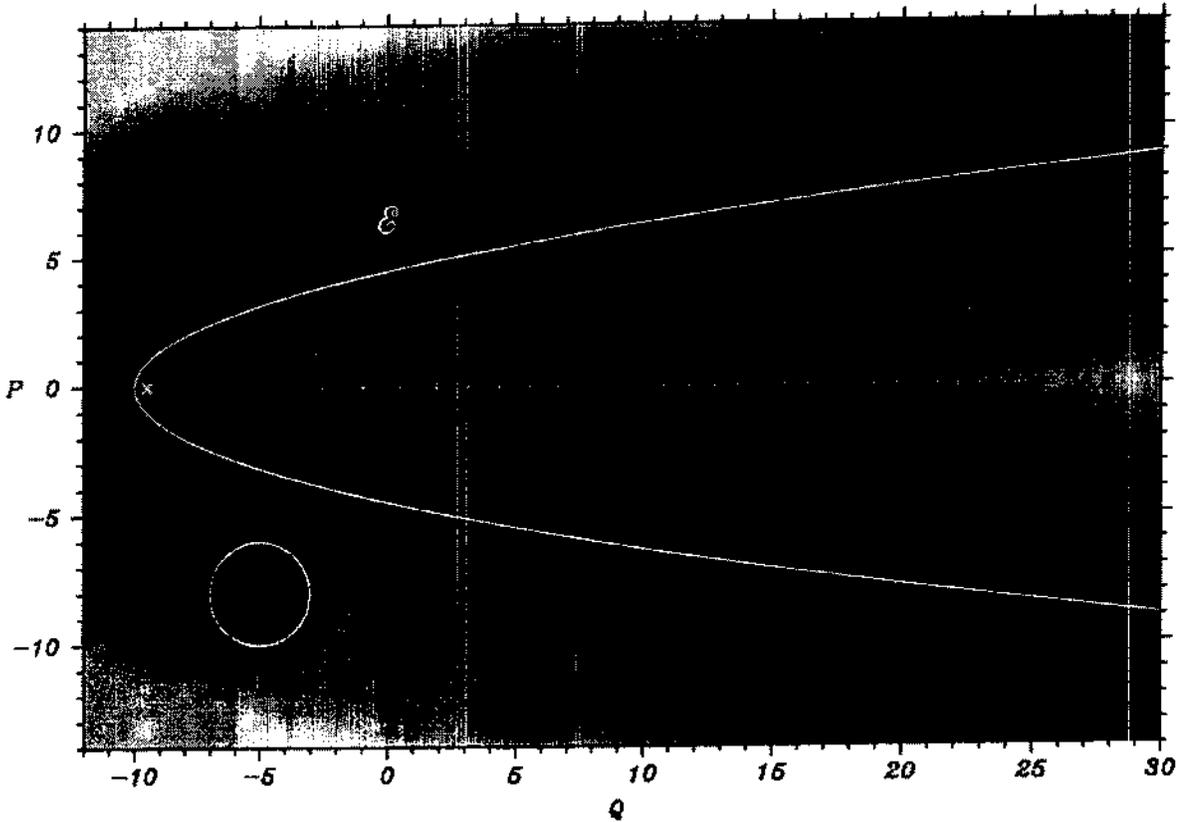


Figura 3.3: A função de Husimi de um autoestado de energia para o problema da partícula sujeita a uma força constante. A amplitude em cada ponto está representada numa escala logarítmica de intensidades de cores cinzas, com os lugares mais escuros correspondendo a valores crescentes da amplitude. A parábola \mathcal{E}_a é a curva de energia constante. Os pontos brancos sobre o eixo $P = 0$ são os zeros da função. O círculo no canto inferior esquerdo representa a curva (3.12) onde o suavizado Gaussiano (2.45) é significativo. O símbolo (\times) em $P = 0$ indica o ponto Q_* . Os valores para os parâmetros usados são : $E = 10$, $F = 1$, $\hbar = 2$, $\beta = 1$ e $m = 1$.

esta propriedade de escala, nós podemos analisar semiclassicamente a distribuição de zeros para um \hbar fixo para valores crescentes de $|Q - Q_*|$. Desta maneira, substituindo a função de Airy em (3.24) por sua forma assintótica (2.27) obtemos

$$\begin{aligned}
 H(X) \approx & |B'|^2 \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \left(\frac{P^2}{\beta^2} + \frac{2mF}{\beta^2} Q \right) \right\} \left| \left(\left(\beta Q - i \frac{P}{\beta} \right) - \frac{\beta}{\sqrt{2}} Q_* \right)^{-1/4} \right|^2 \times \\
 & \times \left| \cos \left\{ \frac{2}{3\hbar} \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\beta Q - i \frac{P}{\beta} \right) - \frac{\beta}{\sqrt{2}} Q_* \right)^{3/2} \left[\frac{8mF}{\sqrt{2}\beta^3} \right]^{1/2} - \frac{\pi}{4} \right\} \right|^2. \quad (3.25)
 \end{aligned}$$

O mesmo resultado obtem-se ao construir a função de Husimi (2.46), com a aproximação à função de Bargmann (D.10) obtida no Apêndice D.1 pelo método WKB complexo.

Assim, a análise semiclássica direta da expressão (3.24), ou a aplicação do método WKB complexo, dão a mesma distribuição de zeros. Esta é dada pelos zeros do cosseno em (3.25) sobre o eixo real,

$$Q_k = \frac{[3\pi\hbar(2k + 3/2)]^{2/3}}{2^{5/3}(mF)^{1/3}} + Q_*, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (3.26)$$

A ordem para o espaçamento entre o k -ésimo zero e o $k + 1$ -ésimo é $O(\hbar^{2/3})$. No entanto, estes zeros acumulam sobre Q_* à medida que $\hbar \rightarrow 0$, de maneira que é mais relevante calcular assintoticamente o espaçamento perto de uma posição fixa Q . Da fórmula (3.25) é imediato que este espaçamento é $O(\hbar)$, de acordo com Leboeuf e Voros [24].

Para comparar estes resultados com nossa aproximação geométrica note-se que a ação de centros $S(\mathbf{X})$ e o produto das velocidades no espaço de fase $D(\mathbf{X})$ (2.25), podem ser calculados analiticamente neste problema. Como aqui a função de Wigner coincide com a forma da aproximação de transição (2.28), e esta é uma expansão da aproximação uniforme (2.26), (3.23) deve ter também a forma da aproximação uniforme. Desta maneira, basta comparar os argumentos das funções de Airy em (2.26) e (2.28) para obter

$$S(\mathbf{X}) = \frac{2}{3} \left(\frac{8m}{F^2} \right)^{1/2} [-(H(\mathbf{X}) - E)]^{3/2}, \quad (3.27)$$

e comparando as amplitudes (ou aplicando diretamente a fórmula (2.25)),

$$D(\mathbf{X}) = \frac{F}{m} (p_+ - p_-) = \frac{F}{m} \xi_p = \left(\frac{8F^2}{m} \right)^{1/2} [-(H(\mathbf{X}) - E)]^{1/2}. \quad (3.28)$$

Assim em nossas aproximações para a função de Husimi (3.15) e (3.18) o primeiro termo pode ser calculado analiticamente, onde o pré-fator constante é $(8/\pi\hbar)^{1/2}$ devido à particular normalização neste caso. A integral do segundo termo sobre o limite clássico (2.31) da função de Wigner (que aqui pode ser obtido diretamente aplicando a fórmula (2.30) na expressão (3.23)) se reduz a uma integral sobre a curva \mathcal{E} ,

$$I(\mathbf{X}) = \frac{1}{\pi\hbar|F|} \int dp \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} [\beta^2(q_E(p) - Q)^2 + (p - P)/\beta^2] \right\} \quad (3.29)$$

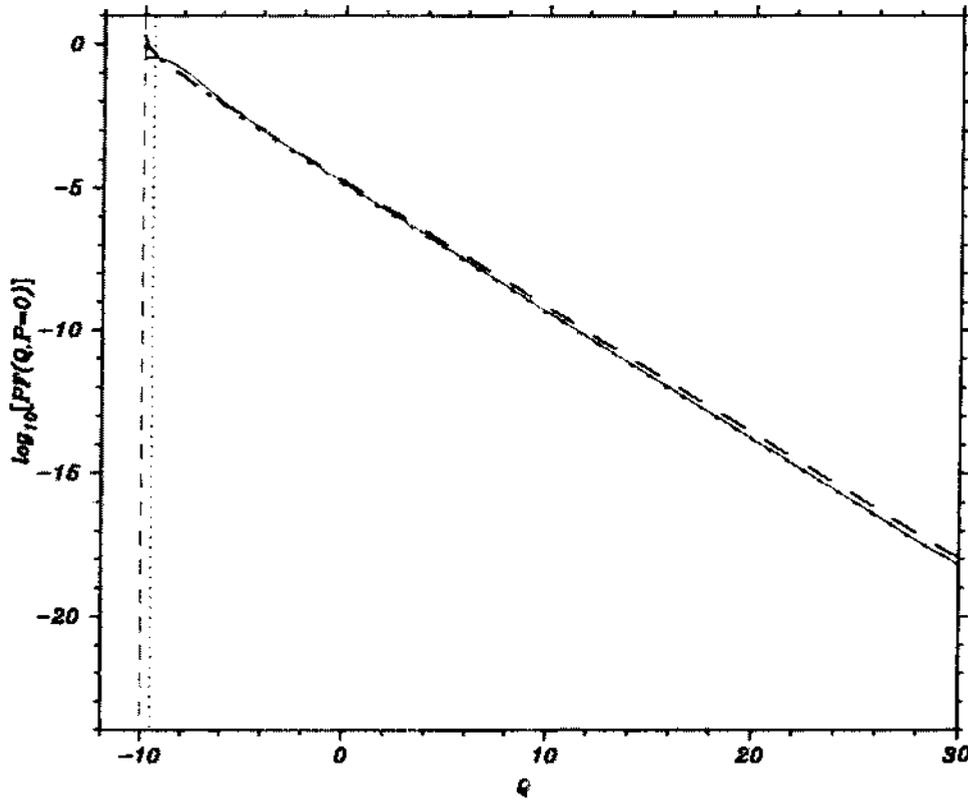


Figura 3.4: Comparação numérica, ao longo do eixo Q , dos pré-fatores do cosseno em (3.18) (linha pontilhada) e em (3.15) (linha tracejada), com o valor da integral (3.29) (linha cheia). Note-se que quando Q cresce, o pré-fator em (3.15) é maior que o valor da integral (3.29). A linha tracejada vertical está na posição q_r e a pontilhada na posição Q_* .

onde $q_E(p) = p^2/2mF + q_r$. Esta função é não oscilatoria, suave e tem um pico ao longo de \mathcal{E} decrescendo em forma monótona a medida que nos afastarmos da curva de energia.

A origem geométrica do vale de zeros ao longo do eixo $P = 0$, no lado côncavo de \mathcal{E} , pode agora ser entendido com a ajuda de nossa aproximação (3.15). Ao longo do eixo Q , a Fig.3.4 mostra que a amplitude do cosseno em (3.15) tem quase o mesmo valor que a integral (3.29). A amplitude deste termo oscilatório é essencialmente uma função Gaussiana no comprimento da corda, como fora do eixo o comprimento da corda aumenta, isto faz o termo tão pequeno que o segundo termo domina a soma, criando assim um vale. Ao longo desse vale as oscilações do cosseno geram uma sequencia de mínimos locais. Entretanto, as posições destes mínimos locais estão deslocadas, com respeito às posições dos zeros da função de Husimi, aproximadamente por uma distância $(Q_* - q_r)$ (Fig.3.5).

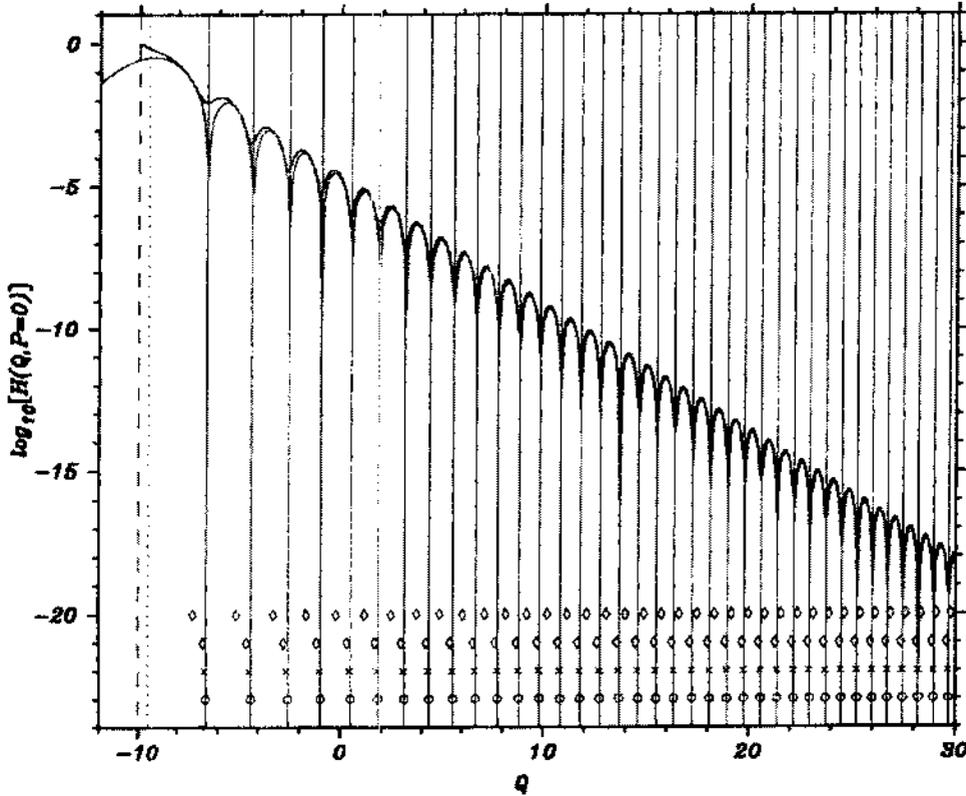


Figura 3.5: O logaritmo de nossa aproximação (3.18) (curva preta) e da função de Husimi (curva cinza) para a partícula, baixo a ação de uma força constante, ao longo do eixo Q dentro da curva de energia constante. Os mínimos relativos da curva preta indicam zeros da função de Husimi, e os da curva cinza mínimos de (3.18). As linhas cheias verticais realçam as posições dos zeros da função de Husimi. A linha tracejada indica a posição q_r e a linha pontilhada a posição Q_* . Os (o) indicam a posição em Q para os mínimos de nossa aproximação (3.15) e os (x) para os mínimos de (3.18). A segunda linha de (o) são os mínimos de (3.15) deslocados uma distância $(Q_* - q_r)$. Os (o) são para as posições em Q dos zeros da aproximação semiclássica da função de Husimi obtida pelo método WKB na representação de Bargmann, (3.26).

Além disso, para pontos Q afastados de Q_* , estes mínimos locais tornam-se negativos já que nesses pontos o pré-fator do cosseno é maior que a integral, como mostra a Fig.3.4.

As correções dadas por nossa aproximação de segunda ordem (3.18) resolvem estes problemas. Assim, a correção (3.20) ao argumento da exponencial garante que os mínimos locais sejam positivos sobre o eixo, e a correção (3.21) à fase do cosseno melhora a posição dos mínimos relativas aos zeros da função de Husimi (ver Fig.3.4 e Fig.3.5). Nós comparamos também, na Fig.3.5, o comportamento geral de (3.18) e da função de Husimi calculada em forma numérica sobre o eixo $P = 0$. Ali, podemos observar uma concordância geral que melhora à medida que Q se afasta de Q_* (o equivalente ao limite $\hbar \rightarrow 0$ neste prob-

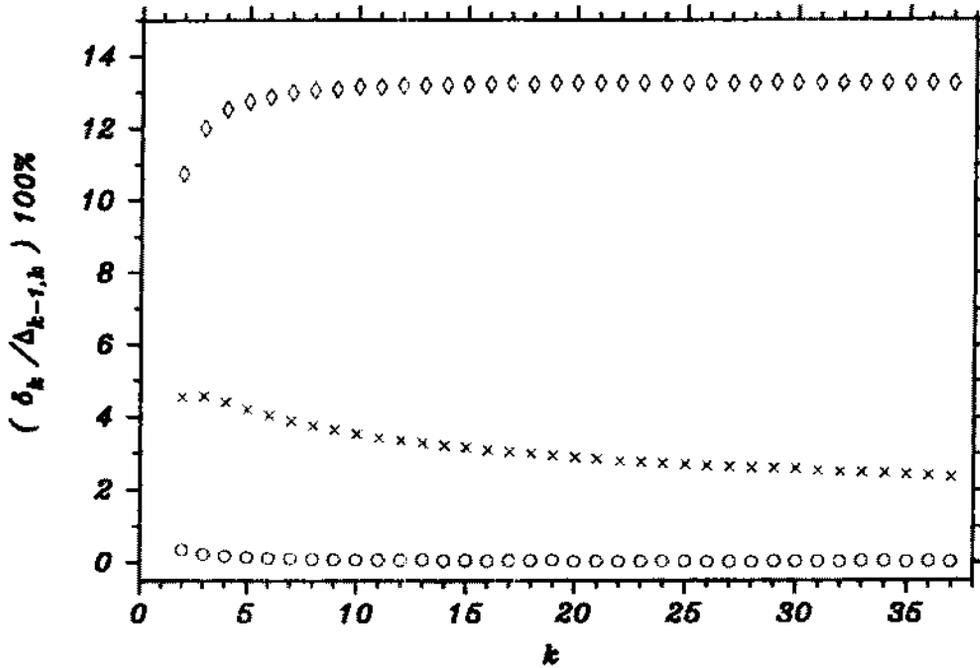


Figura 3.6: Erro relativo percentual, $(\delta_k / \Delta_{k-1,k}) 100\%$, entre as posições dos zeros da função de Husimi (calculados numericamente) e as posições dadas por algumas das aproximações. Os zeros estão contados da esquerda para a direita, sendo δ_k a distância sobre o eixo Q entre o k -ésimo zero da função de Husimi e a posição dada por alguma das aproximações, enquanto que $\Delta_{k-1,k}$ é a distância entre o $k - 1$ e o k -ésimo zero da função de Husimi. (\circ) são os zeros (3.26) da função de Wigner semiclássica obtida pelo método WKB na representação de Bargmann, (\times) para os mínimos de nossa aproximação (3.18) e os (\diamond) para aqueles da aproximação (3.15) deslocados uma distância $(Q_* - q_r)$.

lema). Neste limite semiclássico, a mesma figura mostra como os mínimos vão a zero. Na Fig.3.6 mostra-se o erro relativo entre a posição dos zeros da função de Husimi (calculados numericamente), a posição dos mínimos de (3.18) e (3.15) (deslocados uma distância $(Q_* - q_r)$) e os zeros (3.26). Como era de se esperar, nossa aproximação (3.18) não funciona bem perto da curva de energia onde a função de Wigner simplificada, usada na suavização Guassiana para obter a função de Husimi, não é uma boa aproximação.

3.4 Caso genérico.

Nesta seção aplicaremos nosso esquema geométrico no problema de uma partícula com um potencial anarmônico e assimétrico. A função Hamiltoniana clássica é

$$H(\mathbf{x}) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega_0^2}{2} (q - q_0)^2 + \frac{\lambda}{2} q^4. \tag{3.30}$$

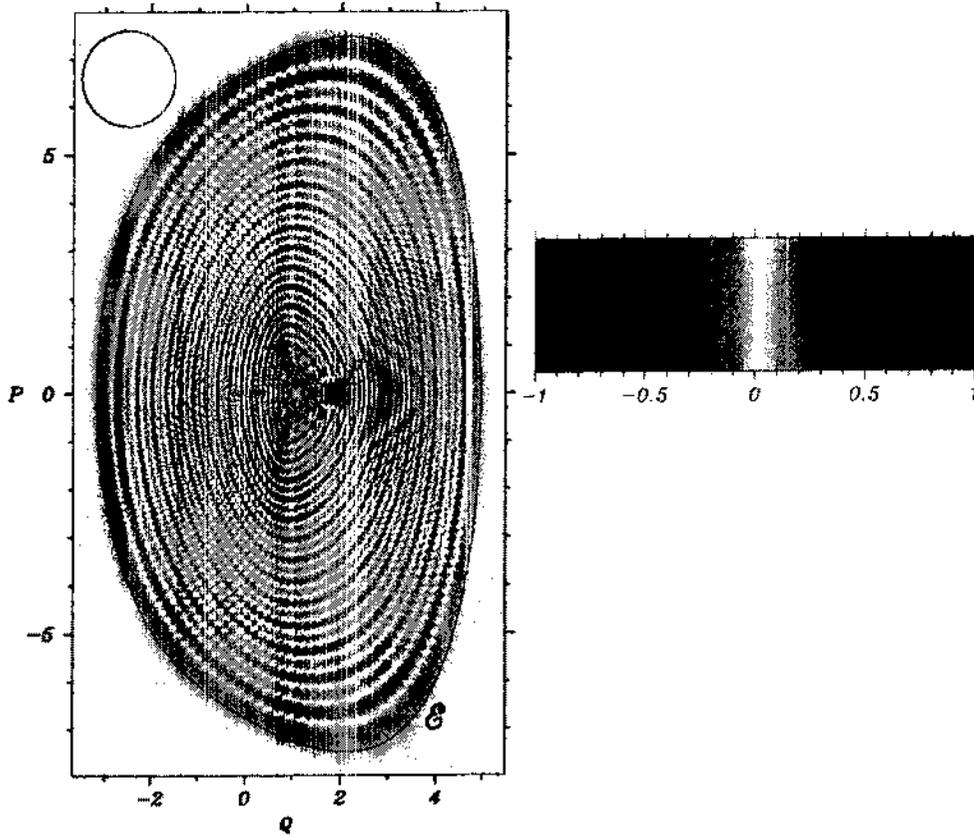


Figura 3.7: Função de Wigner para o autoestado $n = 30$ do problema de uma partícula num potencial anarmônico e assimétrico, (3.30), cujos parâmetros foram fixados nos valores: $m = \omega_0 = 1$, $q_0 = 4.0$ e $\lambda = 0.1$. A curva de energia \mathcal{E} corresponde a um valor $E \approx 30.8175$ para a constante de Planck $\hbar \approx 0.508236$. O gráfico foi realizado normalizando a função e representando a amplitude resultante para cada ponto do espaço de fases, de acordo com a escala linear de intensidades de cores mostrada à direita. As tonalidades vermelhas correspondem a valores positivos da função enquanto que as tonalidades azuis são para valores negativos. A função passa por zero nas regiões brancas. O círculo no canto superior esquerdo corresponde à área efetiva de valor $2\pi\hbar$ encerrada pela curva (3.12).

Este sistema é um exemplo de um sistema geral com uma curva de energia, \mathcal{E} , fechada e convexa, que possui uma cáustica de Wigner, \mathcal{L} . Típicas curvas \mathcal{E} e \mathcal{L} neste sistema são mostradas na Fig.2.1. A função de Wigner de um autoestado neste sistema, mostrada na Fig.3.7, é um exemplo da aparência geral das funções de Wigner para autoestados associados a curvas de energia convexas.

Neste problema ligado, fixamos a curva de energia clássica em $E \approx 30.8175$ e calculamos numericamente a distribuição de zeros da função de Husimi dentro dessa curva para dois autoestados. Estes correspondem a dois valores de \hbar quantizados: o autoestado

$n = 30$ para um valor de $\hbar \approx 0.508236$, e o segundo correspondendo a $n = 45$ para um valor de $\hbar \approx 0.340691$. Para simplificar os cálculos, todos os valores dos parâmetros (incluído o β) foram fixados à unidade, exceto $q_0 = 4.0$ e $\lambda = 0.1$.

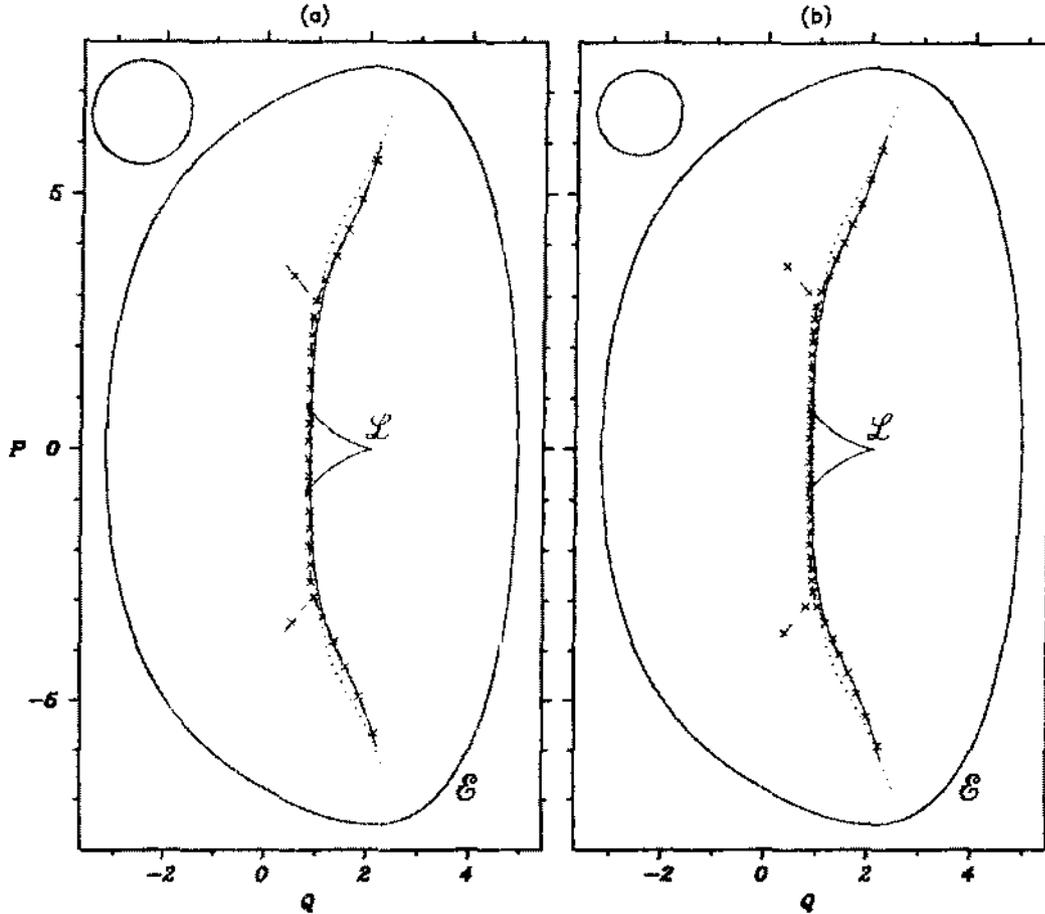


Figura 3.8: Distribuição de zeros da função de Husimi, dentro da curva de energia \mathcal{E} (com $E \approx 30.8175$), para dois autoestados de energia do problema de uma partícula num potencial anarmônico e assimétrico, (3.30). O símbolo (\times) indica a posição dos zeros. (a) para o autoestado $n = 30$ correspondendo a um valor quantizado de $\hbar \approx 0.508236$ e (b) para o autoestado $n = 45$ cujo valor de $\hbar \approx 0.340691$. A curva \mathcal{L} representa a cáustica de Wigner. A linha tracejada representa o vale de zeros da função de Husimi. A linha pontilhada representa o vale de mínimos locais de nossa aproximação (3.15) e a linha cheia para o vale de mínimos de (3.18). O círculo no canto superior esquerdo de cada figura corresponde à área efetiva de valor $2\pi\hbar$ encerrada pela curva (3.12).

A distribuição de zeros para estes estados é a mostrada na Fig.3.8. Os zeros estão ditribuidos ao longo de linhas, como era de se esperar para um sistema com uma dinâmica clássica integrável [24]. Estas linhas são vales muito rasos da função de Husimi, fazendo do cálculo dos zeros um delicado problema computacional. Como a curva de energia é

simétrica com respeito ao eixo Q , a distribuição de zeros também mantém esta característica.

Ao estudar a distribuição de zeros da função de Husimi no problema da partícula dentro da caixa (seção 3.1), antecipamos, como uma característica geral em sistemas ligados com curvas de energia fechadas, a bifurcação dos vales de zeros no regime semiclassical. Aqui, nós temos um exemplo genérico onde o vale *principal* de zeros bifurca em cada semi-plano (Fig.3.8). A assimetria no comprimento destes vales bifurcados reflete a assimetria da curva \mathcal{E} com respeito ao eixo P . Para cada número quântico n , a maior parte dos zeros da função de Husimi pertence ao vale principal. Para o parâmetro β escolhido, o vale principal estende-se paralelo ao lado vertical da cáustica \mathcal{L} . A região central do seu comprimento jaz muito perto do lado vertical, mas na parte externa de \mathcal{L} , para então atravessar as duas cúspides nas pontas desse lado da cáustica (ver Fig.3.8). Isto mostra que a distribuição de zeros não é afetada pela presença da cáustica.

O fundo do vale, dado pelos mínimos de (3.16) é obtido graficamente seguindo o comprimento da corda ao longo das curvas de nível da ação de centros, as quais são essencialmente as curvas de fase constante do cosseno no termo oscilatório em (3.15) ⁶. Pode-se observar mínimos locais do comprimento da corda restritos às curvas de fase constante, determinados pela interseção tangencial entre os dois conjuntos de curvas de nível, nas Fig.3.9 e Fig.3.10 ⁷. A medida que nos afastarmos do vale, o comprimento da corda aumenta, fazendo o termo oscilatório tão pequeno que o segundo termo, suave, domina a soma. Isto também acontecia no problema da força constante (seção 3.3) onde o eixo Q era o local dos mínimos para o comprimento da corda restritos às curvas de nível da ação de centros que atravessam o eixo em forma ortogonal. Ao longo do vale, as oscilações do cosseno produzem uma serie de mínimos locais de (3.15) que indicam, em primeira aproximação, a posição dos zeros da função de Husimi. As posições destes mínimos estão muito perto dos pontos onde o cosseno toma seu menor valor, sendo estas

⁶Cabe lembrar aqui que quando falamos do comprimento da corda sempre é no sentido da norma (2.44).

⁷Note-se como as curvas de fase constante do cosseno no termo oscilatório em (3.15), desenhadas com linhas cheias no gráfico (a) na Fig.3.9, têm a forma das oscilações da função de Wigner exata da Fig.3.7. Isto mostra que as oscilações da função de Wigner dentro da curva \mathcal{E} estão bem descritas pela aproximação simples (2.24), da qual provêm o termo oscilatório em (3.15).

ligeiramente modificadas quando considerarmos a soma de ambos os termos. Nas Fig.3.9 e Fig.3.10 ilustra-se, para os números quânticos $n = 30$ e $n = 45$ respectivamente, o método geométrico para localizar o vale e os mínimos da função de Husimi.

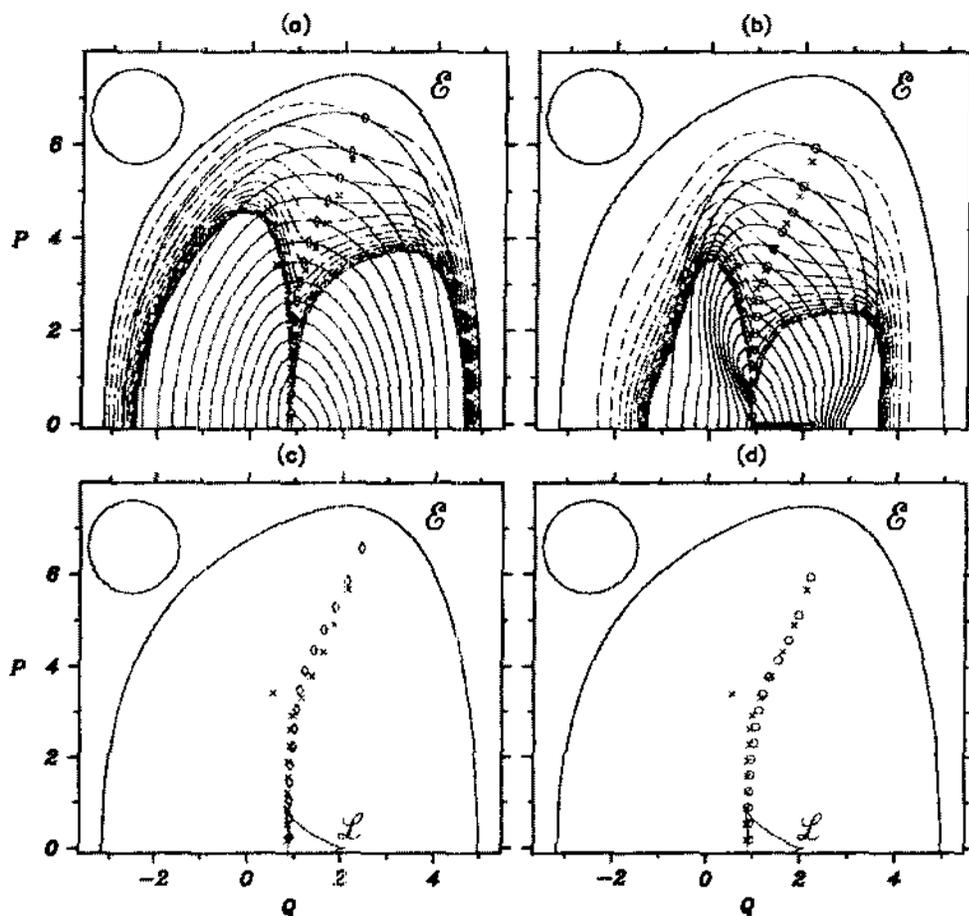


Figura 3.9: Método geométrico para a localização dos mínimos locais, ao longo do vale das aproximações (3.15) (a) e (3.18) (b), dados implicitamente pelas equações (3.16) e (3.31) respectivamente. O valor de \hbar corresponde ao número quântico $n = 30$. (a): as linhas **cheias** são as curvas de nível da ação de centros para valores mínimos do termo oscilatório, enquanto que as curvas de nível para o comprimento da corda correspondem às linhas **tracejadas** (ver (3.16)). (b): as linhas **cheias** são as curvas de nível da fase para valores mínimos do cosseno em (3.18), enquanto que as curvas de nível do argumento da função exponencial são as linhas **tracejadas** (ver (3.31)). Em (c) e (d) nós comparamos a posição dos zeros da função de Husimi (x) com a posição aproximada dos mínimos locais de (3.15) (o) e (3.18) (o) dada pela interseção tangencial dos dois conjuntos de curvas (3.16) e (3.31) respectivamente.

A comparação entre o vale de mínimos de (3.15) e os zeros da função de Husimi mostra que nossa aproximação ao vale principal de zeros é boa até a bifurcação (ver Fig.3.8). Embora esta aproximação ao vale mais comprido continue após a bifurcação, ela não dá conta da bifurcação em si.

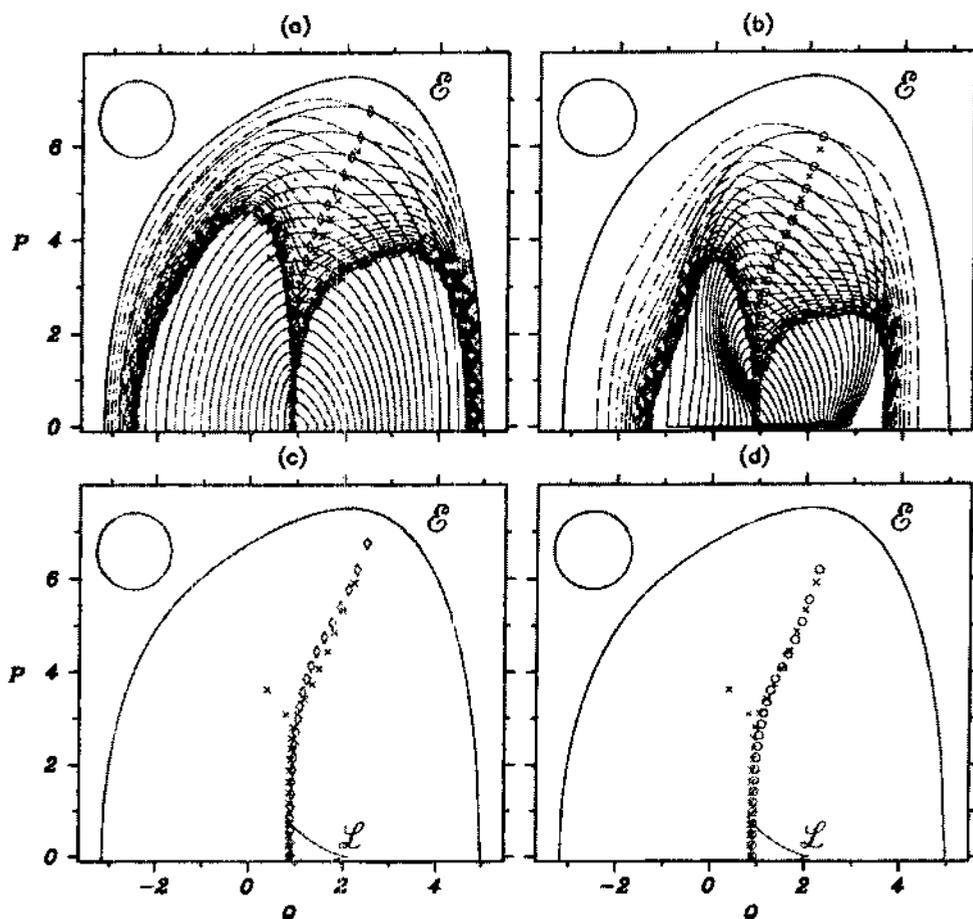


Figura 3.10: Idem Fig.3.9 para um valor de \hbar correspondendo ao número quântico $n = 45$.

Os mínimos locais de (3.15) ao longo do vale principal têm quase o mesmo espaçamento que os zeros da função de Husimi. No entanto, a posição para os zeros assim predita não é muito precisa (ver Fig.3.9 (c) e Fig.3.10 (c)). Além disso, alguns destes mínimos tornam-se negativos, porque o pré-fator do cosseno fica maior que a integral no segundo termo da aproximação. Nós encontramos a mesma situação quando aplicamos (3.15) na seção 3.3, e então usamos aqui novamente nossa aproximação refinada (3.18). Esta fornece correções ao comprimento da corda no argumento da função exponencial e à ação de centros na fase do cosseno. Assim, podemos usar o mesmo método geométrico para achar as posições aproximadas dos zeros da função de Husimi, mínimos locais de (3.18) no

regime semiclassico. Agora, a equação para o vale está dada pelos mínimos de

$$\Theta(\mathbf{X}) + \lambda \left[S(\mathbf{X}) + \frac{\Phi(\mathbf{X})}{4} - \frac{\hbar \arg[\det \mathcal{A}(\mathbf{X})]}{2} \right], \quad (3.31)$$

para sucessivos valores da quantidade entre colchetes, que determina os mínimos restritos do argumento da exponencial em (3.18) ao longo das curvas de nível da fase do cosseno (Fig.3.9 (b) e Fig.3.10 (b)). É claro que esses pontos pertencem a um vale pois, fora da linha que passa através de todos os mínimos restritos, o segundo termo em (3.18) domina a soma exponencialmente. Desta forma, quando a restrição entre colchetes é escolhida igual a $(2k \pm 1/2)\pi$, o cosseno toma seu menor valor muito perto dos mínimos de (3.18). Comparando esses pontos com os zeros da função de Husimi (Fig.3.9 (d) e Fig.3.10 (d)), vemos que são uma muito boa aproximação dos zeros ao longo do vale principal até a bifurcação .

Nossa aproximação (3.18) não dá conta da bifurcação dos vales. O vale de mínimos locais novamente é uma muito boa aproximação do vale principal da função de Husimi, mas agora também representa com precisão a continuação ao longo do vale bifurcado mais comprido (ver Fig3.8). Entretanto, ao longo deste vale bifurcado não há mínimos locais de (3.18) que indiquem a presença de zeros, porque ali o pré-fator do termo oscilatório é suficientemente menor que a integral no segundo termo. Isto pode ser observado nas Fig.3.11 e Fig.3.11 onde graficamos o logaritmo de nossa aproximação e a função de Husimi ao longo do vale de mínimos locais de (3.18), para os números quânticos $n = 30$ e $n = 45$ respectivamente. Nós tínhamos uma situação similar na seção 3.1, para a partícula na caixa, exceto que naquele caso a aproximação (3.9) descrevia bem a posição de ambos os vales bifurcados.

Já vimos que o vale de zeros da função de Husimi não é afetado pela cáustica de Wigner. O vale principal, que corre paralelo e por fora ao lado vertical de \mathcal{L} , atravessa as cúspides da cáustica nas pontas desse lado (Fig3.8), mas em nossas aproximações (3.15) e (3.18) somente a contribuição de uma única corda dentro da cáustica de Wigner é necessária, devido a sua dependencia Gaussiana no comprimento da corda.

Para concluir esta seção , note-se que a consideração de estados correspondendo a uma energia fixa, que são quantizados variando \hbar , leva a um espaçamento dos zeros da

ordem $O(\hbar)$. Da aproximação (3.15) para uma posição fixa ao longo do vale classicamente determinado, verificamos essa ordem para o espaçamento já que o comprimento de onda das oscilações que determinam os mínimos é proporcional a \hbar , uma vez que $S(x)$ é a ação clássica.

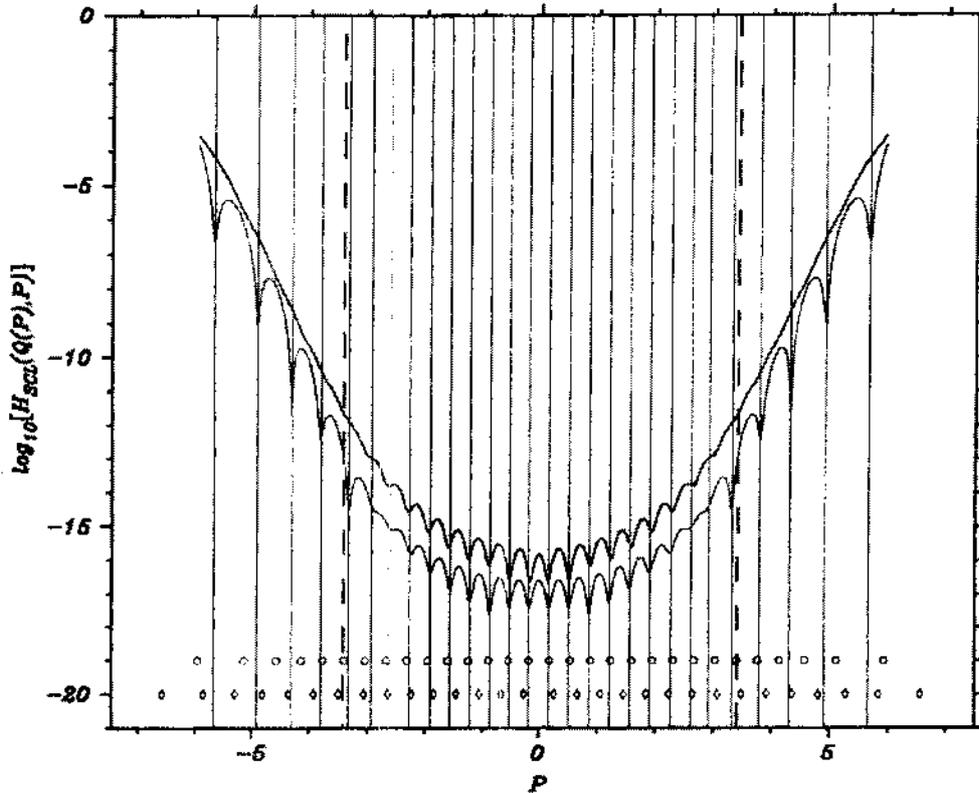


Figura 3.11: O logaritmo de nossa aproximação (3.18) (curva **preta**) e da função de Husimi do autoestado $n = 30$ (curva **cinza**) ao longo do vale de mínimos locais (linha **cheia** na FIG.3.7). As curvas estão projetadas sobre o eixo P . As linhas verticais dão ênfase à posição dos zeros da função de Husimi sobre o eixo P ; as linhas cheias são para os zeros no vale principal e as linhas tracejadas são para os zeros no vale bifurcado menor. Os símbolos (o) e (o) marcam a posição sobre o eixo P dos pontos em Fig.3.8 (c) e (d).

Neste capítulo obtivemos uma aproximação geométrica para a função de Husimi, baseada na estrutura semiclassica de cordas herdada da função de Wigner, aplicando-a para explicar a distribuição dos zeros interiores à curva de energia constante em sistemas 1-D ⁸. Desta forma, mostramos que a estrutura de cordas obriga os zeros interiores a alinharem-se ao longo de vales rasos da função de Husimi. Caberia a pergunta de que

⁸Ou no caso de problemas não ligados, onde a curva de energia é não fechada (como no exemplo da seção (3.3), na parte côncava da curva de energia.

acontece com a distribuição dos zeros exteriores à curva de energia no caso de existirem. Estes zeros em princípio poderiam ser importantes, por exemplo, no caso de querer reconstruir o estado quântico a partir da reconstrução da função de onda $\langle z|\psi\rangle$, na representação de Bargmann, por intermédio da fórmula de factorização de Hadamard para funções inteiras [53]. Esta fórmula permite determinar a função de onda ínteira na representação de Bargmann, a partir do conhecimento de todos seus zeros com suas multiplicidades [25].

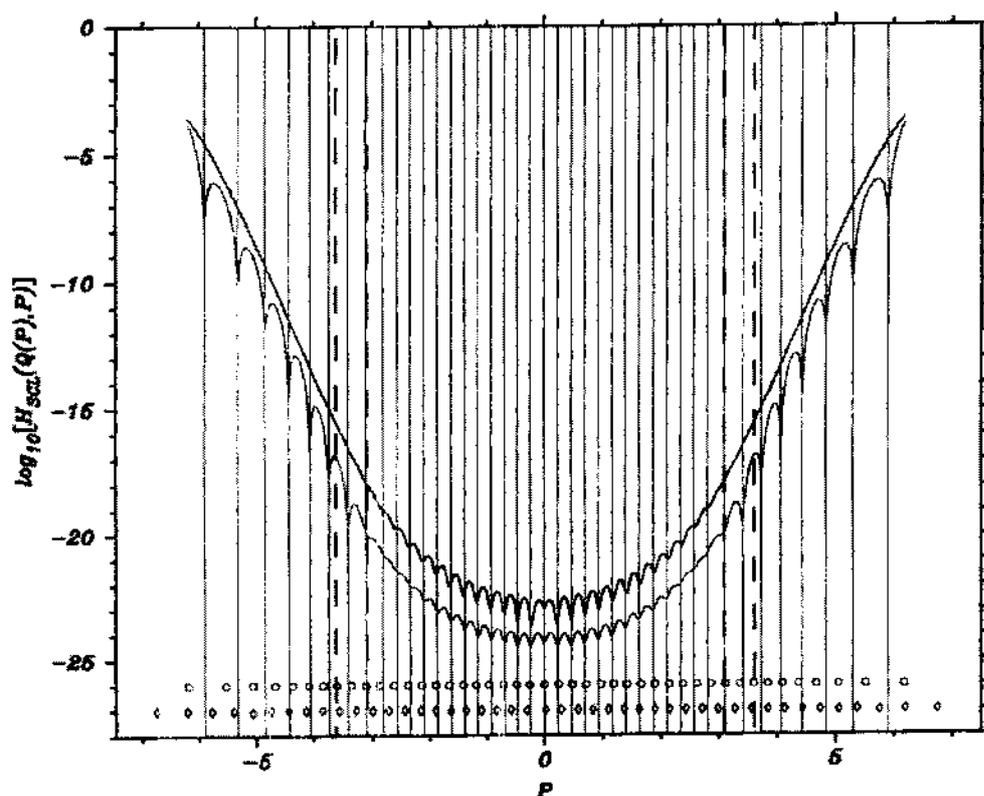


Figura 3.12: Idem Fig.3.11 para um valor de \hbar correspondendo ao número quântico $n = 45$.

De acordo com esta factorização, as funções de onda dos estados quânticos podem ser essencialmente parametrizadas no espaço de fases pela distribuição dos seus zeros na representação de Bargmann, que são os mesmos da função de Husimi correspondente. Isto dá lugar a uma nova descrição de funções de onda no espaço de fases chamado de “representação estelar” [26]. Como a função de Bargmann relaciona-se com a função de Husimi através de (2.46), esta representação estelar pode ser usada para reconstruir a própria função de Husimi.

Um trabalho com resultados parciais sobre a reconstrução da função de Husimi a partir da representação estelar, desenvolvido nestes anos de doutorado, indicaria que os zeros exteriores à curva de energia, não afetariam a forma final da função ⁹. Ou seja, se considerarmos só os zeros interiores na representação estelar para obter a função de Husimi (com o parâmetro β escolhido apropriadamente), esta distribuição continua se concentrando no “toro” clássico e decaindo exponencialmente em ambos os lados desta curva.

⁹Além de ter resultados parciais, este trabalho não foi incluído nesta tese por não estar diretamente relacionado com o tema geral resumido no título.

Capítulo 4

A função de Wigner em sistemas não integráveis.

No Capítulo 2, vimos como a estrutura de toros invariantes do espaço de fases nos sistemas integráveis determina a forma das autofunções semiclássicas dos autoestados de energia, assim como a função de Wigner que descreve estes estados no espaço de fase. Aqui vamos tratar de sistemas não integráveis e do fenômeno de cicatrizes de órbitas periódicas instáveis sobre autoestados caóticos. No caso de sistemas integráveis a concentração da probabilidade nas órbitas estáveis, dentro dos toros invariantes, nada mais é do que uma consequência do fato destes serem o suporte das funções de onda dos autoestados (seção 2.1.1). Para sistemas classicamente ergódicos, esta correspondência entre autoestados individuais e órbitas periódicas clássicas não é possível, pelo menos nas mesmas bases que nos sistemas integráveis. A ferramenta no estudo de cicatrizes no âmbito do espaço de fases vai ser a função de Wigner espectral. A seguir exporemos os pontos essenciais da teoria de cicatrizes desenvolvida para esta função em [46, 12], e apresentaremos as fórmulas que serão usadas no nosso estudo de cicatrizes.

4.1 Função de Wigner espectral.

Ao contrario do problema do limite semiclássico de estados estacionarios, onde não existe uma teoria semiclássica completa que sirva tanto nos casos integráveis como nos casos não integráveis, dispomos de tal teoria para o limite do operador evolução para Hamiltonianos quânticos arbitrarios, afora cáusticas [44, 45, 12]. Esta teoria consiste em

aproximações semiclássicas do operador de evolução na forma de propagador quântico em alguma representação, sendo a mais conhecida a representação de posições [44, 45]. As aproximações em geral são obtidas expressando o propagador como algum tipo de integral de caminhos, a qual é avaliada pelo método da fase estacionária ao redor das trajetórias clássicas.

Este esquema também é aplicável ao propagador na representação de Weyl, *i.e.* o símbolo de Weyl para o operador evolução, $U_t(\mathbf{x})$, obtido por Ozorio de Almeida [12]. Assim, para cada ponto $\mathbf{x} = (\mathbf{q}, \mathbf{p})$ do espaço de fases $2L$ -dimensional, o propagador na representação de Weyl pode ser expressado como uma integral sobre todos os caminhos percorridos num tempo t e cujos extremos formem uma corda centrada em \mathbf{x} . A fase de cada contribuição é a ação clássica (2.34) para o caminho, em unidades de \hbar . A avaliação da integral pelo método da fase estacionária seleciona os caminhos que coincidem com as trajetórias clássicas que vão de uma ponta até a outra da corda, no tempo de propagação especificado. O resultado é ¹

$$U_t(\mathbf{x})_{SCL} = \sum_j \frac{2^L}{\sqrt{|\det(1 + \mathcal{M}_j(\mathbf{x}))|}} \exp \left\{ i \frac{S_{tj}(\mathbf{x})}{\hbar} + i \lambda_j \right\}, \quad (4.1)$$

onde j indica a soma sobre todas as trajetórias clássicas percorrida num tempo t cujas pontas estão unidas por uma corda $\xi_j(\mathbf{x})$ centradas em \mathbf{x} . $S_{tj}(\mathbf{x})$ é a ação de centros (2.34) para cada trajetória periódica. A matriz simplética $\mathcal{M}_j(\mathbf{x})$ corresponde ao mapa linear, $\delta \mathbf{x}_{j+} = \mathcal{M}_j \delta \mathbf{x}_{j-}$, resultado da linearização do movimento na vizinhança das pontas, $\mathbf{x}_{j\pm}$, da corda j , também chamada de matriz de estabilidade. O λ_j , é uma fase associada ao número de vezes que a trajetória j atravessa uma cáustica, *i.e.* toda vez que a matriz $\mathcal{M}_j(\mathbf{x})$ tem um autovalor -1 . Se existir só uma trajetória clássica contribuindo ao propagador (4.1) então o índice de Morse é nulo.

A forma de conectar a teoria semiclássica para o propagador com um estudo semiclássico dos autoestados é através da decomposição espectral do operador evolução. Para o caso

¹Esta fórmula para o propagador de Weyl semiclássico foi encontrada primeiro por Berry em [46] mas a partir da transformação de Weyl (2.1) (agora L -dimensional) do propagador semiclássico na representação de posições.

de problemas autônomos ligados, onde o espectro de energia é discreto, temos a decomposição espectral

$$\hat{U}_t = \exp\left\{-\left(it/\hbar\right)\hat{H}\right\} = \sum_n |n\rangle\langle n| \exp\left\{-\left(it/\hbar\right)E_n\right\} \quad (t \geq 0) , \quad (4.2)$$

onde os $|n\rangle$ são autoestados do Hamiltoniano, e $\hat{U}_t = 0$ para $t < 0$. O uso apropriado desta fórmula permite tratar coletivamente os estados dentro de uma janela de energia e assim formular aproximações semiclássicas para o conjunto, como uma forma de se aproximar da compreensão do limite semiclássico de estados individuais nos sistemas com análogos clássicos não integráveis.

Consideremos a soma de operadores densidade $\hat{\rho}_n = |n\rangle\langle n|$ para os autoestados,

$$\sum_n \delta_\varepsilon(E - E_n) |n\rangle\langle n| = \sum_n \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{(E - E_n)^2 + \varepsilon^2} |n\rangle\langle n| , \quad (4.3)$$

onde $\delta_\varepsilon(E - E_n)$ corresponde a uma função Lorentziana centrada na autoenergia E_n . A largura ε da função Lorentziana pode ser considerada arbitrariamente pequena, sendo que no limite $\varepsilon \rightarrow 0$ vira uma delta de Dirac. A decomposição espectral (4.2) permite-nos relacionar a soma (4.3) ² com a transformada de Fourier temporal do operador evolução, multiplicado pelo fator de amortecimento $e^{-\varepsilon t/\hbar}$:

$$\sum_n \delta_\varepsilon(E - E_n) |n\rangle\langle n| = \frac{1}{\pi\hbar} \Re e \int_0^\infty e^{-\varepsilon t/\hbar} \hat{U}_t \exp\left\{\frac{i}{\hbar}Et\right\} dt . \quad (4.4)$$

Considerando esta relação na representação de posições, $|\mathbf{q}\rangle$, usando a expressão semiclássica para o propagador nessa representação e avaliando a integral por fase estacionária, chega-se à fórmula de cicatrizes de Bogomolny para a sobreposição coletiva de funções de onda numa janela de energia [47].

Nós aqui, estamos interessados na representação de Weyl da relação (4.4) que permite um tratamento semiclássico no espaço de fases. Desta forma, aplicando a transformação de Weyl (2.1) ³ em ambos os membros de (4.4) temos a *função de Wigner espectral* [46]:

$$W(\mathbf{x}; E, \varepsilon) = (2\pi\hbar)^L \sum_n \delta_\varepsilon(E - E_n) W_n(\mathbf{x}) = \frac{1}{\pi\hbar} \Re e \int_0^\infty e^{-\varepsilon t/\hbar} U_t(\mathbf{x}) \exp\left\{\frac{i}{\hbar}Et\right\} dt . \quad (4.5)$$

²Também conhecida como *operador espectral*.

³Agora para um espaço de fases de dimensão $2L$.

Para uma energia fixa E , esta função pode ser considerada como a função de Wigner mista para o grupo de estados selecionados pela função chapeu δ_ε , *i.e.* a função de Wigner associada ao operador densidade que é combinação linear dos $\hat{\rho}_n$ dentro da janela de energia determinada por δ_ε . Entretanto, podemos esperar obter informação dos autoestados individuais forçando $\varepsilon \sim \overline{\Delta E}$, o espaçamento médio dos níveis de energia, *i.e.* tomando um tempo suficientemente grande no fator de amortecimento $e^{-\varepsilon t/\hbar}$.

Agora podemos calcular uma aproximação semiclássica para a função de Wigner espectral, seguindo Ozorio de Almeida em [12], substituindo o propagador semiclássico na representação de Weyl (4.1) na integral temporal em (4.5). A integral estará dominada pelos pontos de fase estacionária ⁴, de maneira que

$$\frac{d}{dt}[S_{t_j}(\mathbf{x}) + Et] = 0 \quad (4.6)$$

Isto determina os $t_j(E)$ para os quais

$$S_{t_j}(\mathbf{x}) + Et_j(E) = S_{E_j}(\mathbf{x}) \quad (4.7)$$

onde $S_{E_j}(\mathbf{x})$ é a ação de centros em energia (2.35), que representa a área simplética para o circuito tomado ao longo da trajetória clássica indo desde um ponto \mathbf{x}_{j-} até outro \mathbf{x}_{j+} , sobre a camada de energia C (correspondendo à energia fixa E), e voltando ao longo de $-\xi_j$ (ver Fig.4.1). Observamos assim que, enquanto para o propagador semiclássico (4.1) contribuem todas as trajetórias percorridas num tempo t cujas pontas estão unidas por uma corda centrada em \mathbf{x} , para a aproximação semiclássica da função de Wigner espectral a condição de fase estacionaria (4.6) seleciona aquelas trajetórias, dentro de uma mesma camada de energia C , cujas cordas $\xi_j(\mathbf{x}) = \mathbf{x}_{j+} - \mathbf{x}_{j-}$ estão centradas em $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_{j+} + \mathbf{x}_{j-})/2$, sendo t_j o tempo para cada trajetória (Fig.4.1).

⁴Cabe lembrar que para avaliar uma integral complexa com fase oscilatoria o método da fase estacionaria estabelece que

$$I(\hbar) = \int_a^b f(t) \exp\{i\phi(t)/\hbar\} \approx (2\pi\hbar)^{1/2} f(t_o) \left| \frac{d^2\phi}{d^2t} \right|_{t=t_o}^{-1/2} \exp\{i\phi(t_o)/\hbar + i\nu_o\pi/4\},$$

para o parâmetro $\hbar \rightarrow 0$, onde $(d\phi/dt)_{t=t_o} = 0$ e $\nu_o = \text{sign}[d^2\phi/d^2t]_{t=t_o}$, com $a < t_o < b$. A aproximação é válida se t_o estiver suficientemente afastado de a e de b .

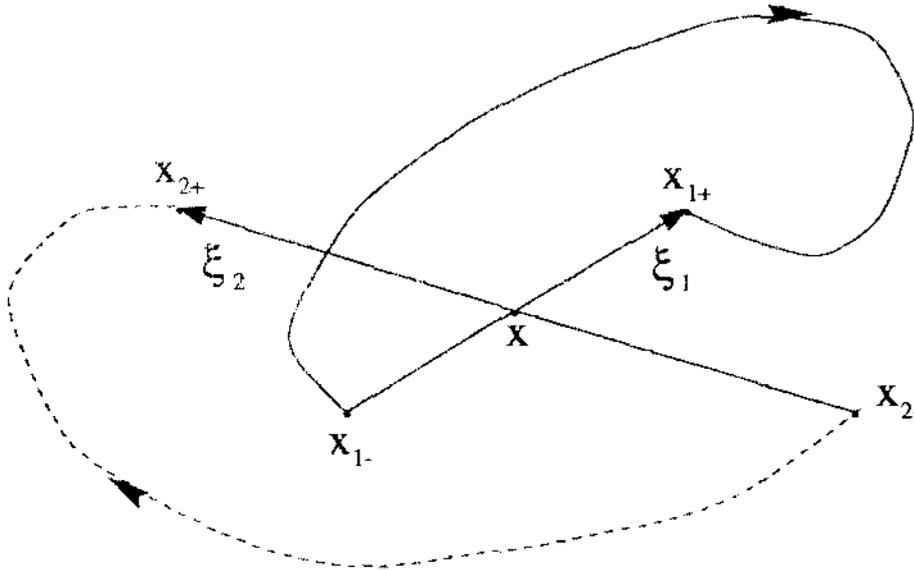


Figura 4.1: Em geral existem muitos segmentos de trajetórias, na camada de energia \mathcal{C} , com extremos \mathbf{x}_{j-} e \mathbf{x}_{j+} unidos por cordas ξ_j contradas num dado ponto \mathbf{x} . O circuito, fechado pela corda $-\xi_j = \mathbf{x}_{j-} - \mathbf{x}_{j+}$, define a fase da contribuição semiclassical a (4.8).

Se todas estas cordas estiverem suficientemente separadas, podemos proseguir com a avaliação da integral pelo método da fase estacionaria para então obter

$$W_{SCL}(\mathbf{x}; E, \varepsilon) = \frac{2^{(l+1)}}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \sum_j \left| \frac{dt_j}{dE} \right|^{\frac{1}{2}} \frac{e^{-\varepsilon t_j/\hbar}}{\sqrt{|\det(1 + \mathcal{M}_j(\mathbf{x}))|}} \cos \left\{ \frac{S_{E_j}(\mathbf{x})}{\hbar} + \nu_j \frac{\pi}{4} + \lambda_j \right\}, \quad (4.8)$$

onde $\nu_j = \text{sign}[d^2 S_{t_j}/d^2 t]$ e $d^2 S_{t_j}/d^2 t = -dE_j/dt = (dt_j/dE)^{-1}$. A fase de Maslov λ_j está associada ao número de caústicas da aproximação, *i.e.* ao número de vezes que a matriz \mathcal{M}_j tem um autovalor igual a -1 . O determinante nesta fórmula pode ser simplificado se usarmos coordenadas canônicas locais ao redor de cada segmento de trajetória. Estas são: a energia E , sua coordenada conjugada o tempo t ao longo da trajetória, e para o resto qualquer conjunto de coordenadas canônicas no subespaço ortogonal ao plano conjugado formado pelos gradientes de E e t respectivamente. Assim, ao invés do mapa linear $\delta \mathbf{x}_{j+} = \mathcal{M}_j \delta \mathbf{x}_{j-}$, podemos considerar o mapa equivalente $\delta \mathbf{w}_{j+} = \mathcal{M}'_j \delta \mathbf{w}_{j-}$, com os

deslocamentos $\delta\mathbf{w} = (\delta\mathbf{x}', \delta t, \delta E)$. É fácil ver que a estrutura de \mathcal{M}'_j é ⁵

$$\mathcal{M}'_j = \left(\begin{array}{c|cc} m_j & & 0 \\ \hline 0 & 1 & 0 \\ & 0 & 1 \end{array} \right) , \quad (4.9)$$

onde agora m_j é de $(2L - 2) \times (2L - 2)$. A partir de (4.9) temos

$$\det(1 + \mathcal{M}_j) = \det(1 + \mathcal{M}'_j) = 4 \det(1 + m_j) , \quad (4.10)$$

considerando que a relação de semelhança entre \mathcal{M}_j e \mathcal{M}'_j não afeta o determinante.

Substituindo em (4.8), temos para a aproximação semiclássica da função de Wigner espectral

$$W_{SCL}(\mathbf{x}; E, \varepsilon) = \frac{2^L}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \sum_j \left| \frac{dt_j}{dE} \right|^{\frac{1}{2}} \frac{e^{-\varepsilon t_j/\hbar}}{\sqrt{|\det(1 + m_j(\mathbf{x}))|}} \cos \left\{ \frac{S_{E_j}(\mathbf{x})}{\hbar} + \nu_j \frac{\pi}{4} + \lambda_j \right\} . \quad (4.11)$$

Como sempre acontece com fórmulas semiclássicas obtidas pelo método da fase estacionária, existem cáusticas toda vez que duas contribuições coalescem, causando uma divergência na amplitude em (4.11).

A primeira observação a se fazer é que fixando um valor da largura da janela de energia ε , sobre a qual superpomos as funções de Wigner dos estados individuais em (4.5), os segmentos de trajetórias que contribuem significativamente na aproximação (4.11) são aqueles com $t_j < \hbar/\varepsilon$. Agora, para um ponto \mathbf{x} arbitrário, em princípio parece não ser sempre possível encontrar segmentos de trajetórias que contribuam a (4.11), caracterizados por cordas unindo seus extremos simétricos com respeito de \mathbf{x} . Por exemplo, se a camada de energia \mathcal{C} for fechada e convexa, e \mathbf{x} ficar fora da camada, não existe nenhuma corda centrada em \mathbf{x} com pontas na camada. Entretanto, para esse tipo de camada \mathcal{C} , e para \mathbf{x} dentro, sempre existirá pelo menos uma corda com uma trajetória clássica viajando pela camada desde uma ponta até a outra [12]. Estas cordas serão menores a

⁵Os blocos nulos seguem da invariância clássica tanto do plano $\delta E - \delta t$ como do subespaço ortogonal, $\delta\mathbf{x}'$, que é tangente à camada de energia \mathcal{C} à qual a trajetória em questão pertence. O bloco identidade corresponde à relação evidente $\delta t_- = \delta t_+$, que junto com a conservação da área simplética $\delta t \wedge \delta E$, pelo movimento clássico, dá $\delta E_- = \delta E_+$.

medida que \mathbf{x} ficar mais perto de \mathcal{C} . Nesse limite, existe uma trajetória curta que pode ser aproximada pela corda pequena perto da camada ⁶. Essa corda pequena coalesce com a corda, também pequena, associada à trajetória de reversão temporal, produzindo assim uma cáustica. Considerando o suavizado $\varepsilon \gg \overline{\Delta E}$, de maneira de cancelar todas as outras possíveis contribuições de trajetórias exceto a curta, com corda centrada em \mathbf{x} bem perto da camada \mathcal{C} , pode-se fazer uma aproximação uniforme da função de Wigner espectral, cujo resultado é uma função de Airy. Esta descreve a função de Wigner espectral como tendo oscilações no interior da camada de energia que acabam num pico muito perto e no interior de \mathcal{C} , para logo decair exponencialmente fora [46, 12] ⁷. No limite $\hbar \rightarrow 0$, a função de Airy vira uma delta de Dirac sobre \mathcal{C} , dando uma distribuição uniforme para a função de Wigner espectral sobre a camada de energia no limite semiclássico. Este é o quadro da hipótese de Berry e Voros [40, 41] para a função de Wigner de um autoestado correspondendo a um sistema com trajetórias clássicas caóticas, só que agora vemos que esta verifica-se para a função de Wigner de um conjunto grande de estados ($\varepsilon \gg \overline{\Delta E}$).

Podemos entender melhor o que acontece quando diminuirmos o suavizado ε de maneira a permitir trajetórias mais longas contribuindo em (4.11), mesmo para pontos \mathbf{x} perto da camada \mathcal{C} , se olharmos (4.11) no caso de um grau de liberdade. Tomemos por exemplo, o caso onde a camada \mathcal{C} corresponda à curva de energia constante \mathcal{E} da seção 2.1.1. Como já vimos, para pontos \mathbf{x} perto de \mathcal{E} existe uma única corda, mas de uma ponta até a outra viajam muitas trajetórias dando voltas à curva \mathcal{E} , que é uma órbita periódica. Todas estas repetições devem ser consideradas em (4.11) pois são trajetórias diferentes, com t_j diferentes, mas que compartilham a mesma corda. No caso de considerarmos a função de Wigner de um só autoestado, como em 2.1.1, Berry mostrou usando a aproximação simples (2.24), que a correta condição de quantização (2.20) para a ação S_p da órbita \mathcal{E} , pode-se inferir da identificação das funções de Wigner associadas a cada uma destas repetições. Num grau de liberdade a aproximação simples (2.24), para a função de

⁶Para estas trajetórias curtas $\lambda_j = 0$.

⁷Uma situação similar já vimos que acontecia para um grau de liberdade na seção 2.1.1, onde a divergência sobre a cáustica \mathcal{E} , da aproximação simples (2.24) para a função de Wigner, era concertada pela aproximação uniforme (2.26), que também é uma função de Airy. A diferença está em que nesse caso a aproximação era para a função de Wigner de um autoestado, enquanto que aqui é para a função de Wigner de um conjunto grande de autoestados, pois $\varepsilon \gg \overline{\Delta E}$.

Wigner de um autoestado, pode-se obter a partir de (4.11) fazendo $\varepsilon \rightarrow 0$, considerando que neste caso a matriz m_j tem dimensão nula.

Para $L > 1$, se reduzirmos o suavizado a $\varepsilon \sim \tau/\hbar$, onde τ é da ordem do período da órbita periódica mais curta sobre a camada de energia, e tomarmos \mathbf{x} perto da camada como centro de uma corda com pontas nessa órbita periódica, também teremos contribuições de trajetórias que deram voltas à órbita periódica na viagem de uma ponta até a outra da corda. Mas se deslocarmos o ponto \mathbf{x} , ainda perto de \mathcal{C} , deveremos levar em conta pares de cordas pequenas para trajetórias que orbitam muito perto ao redor da órbita periódica, e cujas ações são muito parecidas com a ação S_p da órbita periódica, e com períodos também parecidos [12]. Este par de cordas coalescem no limite de $\mathbf{x} \rightarrow \mathcal{C}$, ou quando \mathbf{x} for tal que os períodos das trajetórias orbitando entre suas pontas são idênticos, produzindo duas novas cáusticas. As aproximações uniformes associadas a estas novas cáusticas são fornecidas pela fórmula de cicatrizes para a função de Wigner espectral primeiro desenvolvida por Berry [46] e refinada por Ozorio de Almeida [12]. Esta fórmula, para pontos \mathbf{x} perto da camada de energia e perto de uma órbita periódica compatível com o suavizado considerado, consiste num cosseno como em (4.11), mas cuja fase é uma média das ações degeneradas das trajetórias associadas ao par de cordas extras expandidas a partir da ação S_p da órbita periódica, modulado por uma função de Airy. O conjunto produz um pico de intensidade extra perto da órbita periódica na camada de energia, e um padrão de oscilações devido à função de Airy, mesmo na direção sobre \mathcal{C} , que se tornam evanescentes ao atravessar as cáusticas.

Para terminar esta seção observemos que as cáusticas são as contribuições dominantes na função de Wigner espectral para valores grandes do suavizado ε comparados com o espaçamento médio dos níveis de energia $\overline{\Delta E}$. Se houver varios segmentos de trajetórias contribuindo para tempos $t < \hbar/\varepsilon$, então precisamos teorias semiclássicas mais sofisticadas como as de Berry e Ozorio de Almeida [46, 12]. Nosso objetivo na próxima seção é diferente. Estaremos preocupados com pontos \mathbf{x} perto dos centros associados a órbitas periódicas mas bem dentro da camada de energia.

Capítulo 5

Estudo de cicatrizes na função de Wigner.

5.1 Cicatriz na superfície central.

Vamos chamar de *superfície central* aquela formada por todos os pontos \mathbf{x} que são centros de cordas com pontas numa órbita periódica. É claro que a órbita pode ser muito mais complicada do que aquela esquematizada na Fig.5.1. Por exemplo, pode ser uma das órbitas periódicas na interseção homoclínica de uma órbita simples, mas de qualquer modo todas as cordas ainda definem uma superfície bidimensional através de seus pontos médios. De fato existem duas cordas $\xi_{in} = -\xi_{out}$ para cada centro, definindo duas ações $S_{in}(\mathbf{x})$ e $S_{out}(\mathbf{x})$ respectivamente ¹ (ver Fig.5.1). Para estas ações temos

$$S_p = S_{in} + S_{out} \quad , \quad (5.1)$$

onde S_p é a ação da órbita periódica ².

Se \mathbf{x} ficar perto da órbita ($S_{in} \rightarrow 0$), o par de ações S_{in} e $-S_{in}$ coincidem com as ações das trajetórias curtas que levam á aproximação de Airy sobre a camada de energia descrita na seção anterior. Se considerarmos segmentos de órbita com corda ξ_{in} , mas com ação $S_{long} = S_p + S_{in}$, junto com S_{out} , temos os ingredientes para a teoria assimpótica de cicatrizes perto da camada de energia (ver seção 4.1 e [12]). Nós agora não vamos tomar

¹Aqui preferimos seguir a notação em [12] a despeito do português.

²Omitimos aqui o subíndice E , para todas as ações, mas tem que ser lembrado que estamos no domínio de energias.

o limite onde x aproxima-se da camada, portanto podemos usar a aproximação simples (4.11) para a função de Wigner espectral e considerar as muitas contribuições com corda ξ_{in} e ações $S_{in} + nS_p$, assim como também as com corda ξ_{out} e ações $S_{out} + nS_p = -S_{in} + (n + 1)S_p$, onde n é o número de voltas sobre a órbita periódica do segmento em questão .

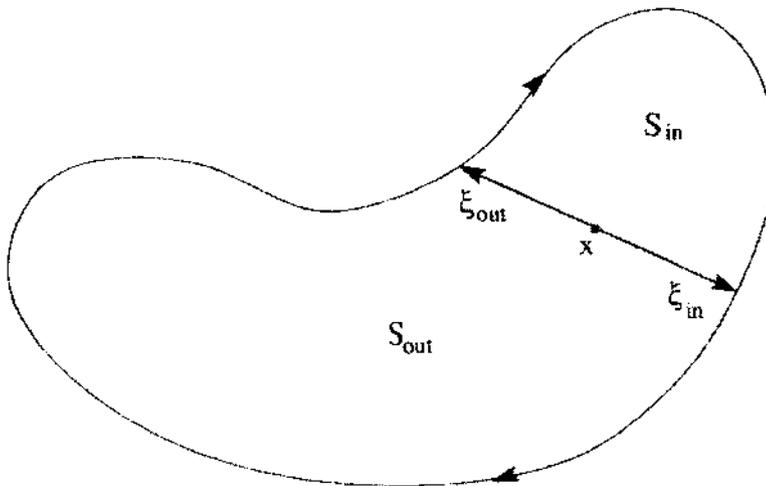


Figura 5.1: A curva desenhada esquematiza uma órbita periódica. Os centros x cujas cordas têm pontas na órbita periódica formam uma superfície bidimensional que chamamos de *superfície central*. Em cada ponto x , na superfície central, estão centradas pelo menos duas cordas tal que $\xi_{in} = -\xi_{out}$. Estas cordas dividem a órbita em dois segmentos cujas ações associadas são as áreas simpléticas S_{in} e S_{out} . Em (5.8), nós somamos as repetições destes segmentos, que se constroem dando voltas à órbita periódica indo de um mesmo ponto inicial até o mesmo ponto final.

Como aqui estamos tratando com órbitas periódicas instáveis, *i.e.* em regiões de movimento caótico no espaço de fases, não nos preocuparemos pela fase de Maslov λ_j em (4.11). Esta é nula para o segmento de órbita curto, de maneira que não adicionamos nenhuma fase à ação S_{in} . Para todas as outras contribuições, simplesmente temos que somar o mesmo índice de Maslov correspondente à órbita periódica de ação S_p , como no caso de somar as repetições de órbitas periódicas instáveis na fórmula do traço de Gutzwiller [44, 45]. Em particular, somamos λ_j para a ação clássica S_{out} . Assim, podemos usar os métodos em [50] para determinar a fase λ_j . A maneira mais simples de obter este resultado é lembrando que a fórmula do traço pode ser obtida integrando a fórmula de cicatrizes para a função de Wigner espectral desenvolvida em [46, 12]³. A integração não

³A estrutura desta fórmula foi comentada na seção 4.1. Aqui só lembremos que para pontos de

adiciona nenhuma nova fase nos casos onde a órbita é hiperbólica com ou sem reflexão, i.e. instável com índice de Maslov par ou ímpar respectivamente. A partir de agora incorporaremos a fase de Maslov na ação da órbita periódica S_p . Para $\nu_j = \text{sign}[d^2 S_{ij}/d^2 t]$ em (4.11) simplesmente notemos que é negativo para todas as contribuições "in" e positivo para todas as "out".

Vamos agora estimar a amplitude para as diferentes contribuições das repetições dos segmentos de órbita em (4.11):

$$A_j(E) = \frac{2^L}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \left| \frac{dt_j}{dE} \right|^{1/2} |\det(1 + m_j(\mathbf{x}))|^{-1/2} . \quad (5.2)$$

Definindo m_{in} e m_{out} como as matrizes de estabilidade reduzidas correspondentes à linearização do movimento ao redor de cada segmento de órbita periódica, obtemos a matriz de estabilidade reduzida m_p , para a órbita periódica, como um produto ⁴

$$m_p = m_{in} m_{out} = m_{out} m_{in} . \quad (5.3)$$

Desta forma, como no caso das ações, podemos decompor todas as matrizes de estabilidade associadas aos segmentos de corda ξ_{in} como

$$m_j = m_p^n m_{in} \quad (5.4)$$

e para os segmentos de corda ξ_{out} como

$$m_j = m_{out} m_p^n = m_{in}^{-1} m_p^{n+1} . \quad (5.5)$$

Portanto, se λ_p for o expoente de Lyapunov da órbita periódica ⁵, e τ_p seu período,

$$|\det(1 + m_j(\mathbf{x}))|^{-1/2} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} [C_{in} \text{ ou } C_{out}] e^{-n\lambda_p \tau_p/2} \quad (5.6)$$

avaliação \mathbf{x} bem dentro da camada de energia essa fórmula se reduz a (4.11).

⁴A matriz m_p também é chamada de matriz de monodromia reduzida.

⁵Em dois graus de liberdade ($L = 2$), a matriz de monodromia reduzida m_p tem autovalores, $e^{\pm u}$, se a órbita for hiperbólica sem reflexão e, $-e^{\pm u}$, se for com reflexão. O expoente de Lyapunov neste caso será $\lambda_p = u/\tau_p$. Para $L > 2$, o λ_p no texto corresponde ao maior de todos os expoentes de Lyapunov.

onde C_{in} ou C_{out} dependem de m_{in} e m_{out} , respectivamente, assim como também da matriz que diagonaliza m_p .

Para os tempos de voo t_j no expoente real em (4.11) podemos escrever

$$t_j = \left\{ \begin{array}{c} t_{in} \\ t_{out} \end{array} \right\} + n\tau_p . \quad (5.7)$$

Em princípio, isto também teria que ser levado em conta na derivada com respeito à energia na amplitude (5.2), mas para as cordas mais curtas, dt_{in}/dE ou $dt_{out}/dE \gg d\tau_p/dE$, o que justifica desprezar a dependência em n numa primeira aproximação.

Agora, podemos estimar as múltiplas contribuições dos segmentos de órbita periódica associados às cordas ξ_{in} e às ξ_{out} somando uma serie geométrica

$$\begin{aligned} W_p(\mathbf{x}; E, \varepsilon) &\approx \frac{2^L}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \sum_{n=0}^{\infty} \left[a_{in}(\mathbf{x}; E, \varepsilon) e^{-n(\frac{\lambda_p \tau_p}{2} + \frac{\varepsilon \tau_p}{\hbar})} \cos \left\{ \frac{S_{in}(\mathbf{x})}{\hbar} - \frac{\pi}{4} + \frac{nS_p}{\hbar} \right\} + \right. \\ &+ \left. a_{out}(\mathbf{x}; E, \varepsilon) e^{-n(\frac{\lambda_p \tau_p}{2} + \frac{\varepsilon \tau_p}{\hbar})} \cos \left\{ \frac{S_{out}(\mathbf{x})}{\hbar} + \frac{\pi}{4} + \frac{nS_p}{\hbar} \right\} \right] = \\ &= \frac{2^L}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \Re e \left[a_{in} \sum_{n=0}^{\infty} \left(e^{-i(\frac{\lambda_p \tau_p}{2} + \frac{\varepsilon \tau_p}{\hbar}) + i\frac{S_p}{\hbar}} \right)^n \exp \left\{ i \left(\frac{S_{in}}{\hbar} - \frac{\pi}{4} \right) \right\} + \right. \\ &+ \left. a_{out} \sum_{n=0}^{\infty} \left(e^{-i(\frac{\lambda_p \tau_p}{2} + \frac{\varepsilon \tau_p}{\hbar}) + i\frac{S_p}{\hbar}} \right)^n \exp \left\{ i \left(\frac{S_{out}}{\hbar} + \frac{\pi}{4} \right) \right\} \right] = \\ &= \frac{2^L}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \Re e \left[\left(1 - \exp \left\{ i \left(\frac{\lambda_p \tau_p}{2} + \frac{\varepsilon \tau_p}{\hbar} \right) + i\frac{S_p}{\hbar} \right\} \right)^{-1} \times \right. \\ &\times \left. \left(a_{in} \exp \left\{ i \left(\frac{S_{in}}{\hbar} - \frac{\pi}{4} \right) \right\} + a_{out} \exp \left\{ i \left(\frac{S_{out}}{\hbar} + \frac{\pi}{4} \right) \right\} \right) \right] , \quad (5.8) \end{aligned}$$

onde as amplitudes reais $a_{in}(\mathbf{x})$ e $a_{out}(\mathbf{x})$ são quantidades puramente clássicas⁶. À medida que movemos \mathbf{x} para dentro da superfície central, a amplitude decrece gradualmente. Bem dentro da superfície central $a_{in}(\mathbf{x})$ e $a_{out}(\mathbf{x})$ são da mesma ordem de magnitude e isto também vale perto da órbita periódica se o expoente de Lyapunov é pequeno. Mas, para uma órbita muito instável temos aproximadamente que $a_{in}(\mathbf{x})/a_{out}(\mathbf{x}) \rightarrow e^{\lambda_p \tau_p / 2}$ perto da órbita periódica.

⁶De agora em diante omitiremos a dependência em, E e ε , destas quantidades.

O caso mais simples de analisar é aquele onde a órbita periódica está Bohr-quantizada, *i.e.* $S_p = 2\pi m\hbar$ (com o índice de Maslov incluído em S_p). Para este caso (5.8) se reduz a

$$W_p(\mathbf{x}; E, \varepsilon) \approx \frac{2^L}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \frac{a_{in}(\mathbf{x}) + a_{out}(\mathbf{x})}{\left(1 - \exp\left\{\left(\frac{\lambda_p \tau_p}{2} + \frac{\varepsilon \tau_p}{\hbar}\right)\right\}\right)} \cos\left\{\frac{S_{in}(\mathbf{x})}{\hbar} - \frac{\pi}{4}\right\}. \quad (5.9)$$

A superfície central apresenta assim uma sequência de anéis concêntricos de sucessivas amplitudes positivas e negativas que seguem as curvas com S_{in} constante. A amplitude alcança um pico ao longo da órbita periódica que é uma caústica como mencionamos na seção anterior. Dentro da curva de energia, as contribuições coletivas dos diversos segmentos de órbita periódica somados em (5.9), podem prevalecer sobre aqueles correspondentes a outras órbitas, com cordas também na superfície central, mas cujas fases não estejam Bohr-quantizadas.

Um outro limite simples é aquele onde a órbita é do tipo “anti-Bohr”, *i.e.* $S_p = 2\pi m\hbar + \pi$, de maneira que neste caso temos

$$W_p(\mathbf{x}; E, \varepsilon) \approx \frac{2^L}{(2\pi\hbar)^{1/2}} \frac{a_{in}(\mathbf{x}) - a_{out}(\mathbf{x})}{\left(1 + \exp\left\{\left(\frac{\lambda_p \tau_p}{2} + \frac{\varepsilon \tau_p}{\hbar}\right)\right\}\right)} \cos\left\{\frac{S_{in}(\mathbf{x})}{\hbar} - \frac{\pi}{4}\right\}, \quad (5.10)$$

onde usamos (5.1). Aqui também temos o padrão de anéis, mas a amplitude é da mesma ordem de magnitude que para uma corda só (se \mathbf{x} está perto da órbita periódica), enquanto que $W_p \rightarrow 0$ na região central da superfície central onde $a_{in} \approx a_{out}$. Desta forma não devemos esperar que esta estrutura de anéis seja discernível na presença de outras cordas, mesmo que as fases dos segmentos de órbita associados não estejam Bohr-quantizadas.

No caso geral (5.8) representa oscilações com curvas de fase constante para S_{in} constante. No entanto, haverá um corrimento de fase com respeito ao padrão de anéis do caso (5.9) ou do (5.10). A amplitude global ficará entre estes extremos de maneira que o padrão de anéis poderá ser observado mesmo para uma órbita periódica que não esteja Bohr-quantizada se o expoente de Lyapunov não for muito grande.

Para finalizar esta seção discutiremos a possibilidade do padrão de anéis persistir para pontos de avaliação \mathbf{x} da função de Wigner espectral, fora da superfície central até uma

certa distância. Por continuidade temos garantida a existência de trajetórias que orbitam perto da órbita periódica um número grande de voltas. Os diversos segmentos dessas trajetórias centrados em \mathbf{x} , perto da superfície central da órbita periódica, contribuem coletivamente como aqueles da própria órbita periódica. No entanto, nem as cordas nem as fases destes segmentos coincidem exatamente com as da órbita periódica, embora sejam parecidas.

A diferença de fase pode ser expressada, no caso de cordas curtas, como uma forma quadrática [12],

$$\delta S_j = \delta \mathbf{x}' \mathcal{B}_j \delta \mathbf{x}' \quad , \quad (5.11)$$

onde $\delta \mathbf{x}' = \mathbf{x}' - \mathbf{x}'_p$ e \mathbf{x}'_p está na superfície central da órbita periódica. A linha significa que são coordenadas canônicas no subespaço ortogonal ao plano conjugado formado pelos gradientes de E e t (ver parágrafo acima de (4.9)). A matriz simétrica \mathcal{B}_j , de $2L-2 \times 2L-2$, é a parametrização de Cayley do mapa linearizado de Poincaré perto do segmento j da órbita periódica [12]:

$$\mathcal{J}\mathcal{B}_j = [1 - m_j][1 + m_j]^{-1} \quad , \quad m_j = [1 - \mathcal{J}\mathcal{B}_j][1 + \mathcal{J}\mathcal{B}_j]^{-1} \quad , \quad (5.12)$$

onde

$$\mathcal{J} = \left(\begin{array}{c|c} 0 & 1 \\ \hline -1 & 0 \end{array} \right) \quad , \quad (5.13)$$

e cada bloco unidade é de $L-1 \times L-1$ ⁷.

Tomamos o caso em que os pontos \mathbf{x}' e \mathbf{x}'_p estão perto da órbita periódica, pela relação (5.4), podemos aproximar m_j por m_p^n . Consideremos agora, para facilitar a argumentação, que estamos em dois graus de liberdade ($L=2$), portanto a matriz m_p tem autovalores $(\pm e^{\lambda_p \tau_p}, \pm e^{-\lambda_p \tau_p})$ para uma órbita hiperbólica com ou sem reflexão respectivamente. Usando (5.12), que $\mathcal{J}^{-1} = -\mathcal{J}$, e a matriz que diagonaliza m_p , temos

$$\mathcal{B}_j \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \left(\begin{array}{c|c} 0 & 1 \\ \hline 1 & 0 \end{array} \right) \quad , \quad (5.14)$$

⁷Aqui invertemos o lugar dos blocos na matriz \mathcal{J} com respeito a [12], pois nós consideramos os vetores no espaço de fases ordenados com as posições na frente dos momentos.

nas coordenadas apropriadas. Desta maneira achamos que enquanto o corrimento de fase (5.11) cresce quadraticamente com $\delta x'$, o efeito de sucessivas repetições ao redor da órbita satura exponencialmente. Em efeito, nas coordenadas apropriadas, (5.11) é $\tanh(n\lambda_p\tau_p)qp$ para uma órbita hiperbólica sem reflexão, e $\coth(n\lambda_p\tau_p)qp$ para uma com reflexão. A maior variação para expoentes de Lyapunov menores no último caso, pode levar uma largura menor da cicatriz. De qualquer maneira, mostramos que não há acumulação de incoerência de fase nas sucessivas repetições para pontos perto da superfície central da órbita periódica, dentro da aproximação quadrática. Esta análise qualitativa implica que a estrutura de cicatrizes em forma de anéis não é imediatamente destruída à medida que x é movido para fora da superfície central.

5.2 Exemplos para autoestados do Hamiltoniano NELSON.

Para verificar qualitativamente o esquema teórico desenvolvido na seção anterior escolhemos como sistema de estudo a Hamiltoniana clássica de um oscilador não linear acoplado com dois graus de liberdade

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{(p_1^2 + p_2^2)}{2} + 0.05 q_1^2 + \left(q_2 - \frac{q_1^2}{2} \right)^2, \quad (5.15)$$

mais conhecida como “Hamiltoniana NELSON” (onde $(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = (q_1, q_2, p_1, p_2)$). As órbitas periódicas deste sistema foram estudadas em [48] junto com a topologia dos gráficos $E - \tau$ (τ período da órbita). Esta Hamiltoniana é muitas vezes usado como exemplo de sistema com “caos suave”, ou seja com uma dinâmica mista onde regiões do espaço de fases regulares, caracterizadas por órbitas periódicas estáveis dentro de toros invariantes, coexistem com regiões predominantemente caóticas cujas órbitas periódicas são instáveis características do movimento hiperbólico. A transição entre o movimento essencialmente regular para o movimento essencialmente caótico acontece para energias da ordem 0.1 [48, 49]. No entanto, ilhas de regularidade encontram-se para qualquer energia superior. A simetria de reversão temporal de (5.15) determina duas classes diferentes de órbitas periódicas. Aquelas que coincidem com sua reversa temporal são chamadas de *librações*

e as outras de *rotações*. Por coincidir com sua reversa temporal as librações seguem a mesma curva no espaço de configurações com pontos de retorno nas extremidades, enquanto que as rotações seguem curvas fechadas rodando numa direção e na direção contrária para sua reversa temporal.

Um estudo do espectro de energias do correspondente Hamiltoniano quântico junto com uma discussão das cicatrizes nas autofunções encontra-se em [49]. Ali também comparam-se os resultados semiclassicos da aplicação da fórmula de cicatrizes de Bogomolny com os cálculos quânticos, numa janela de energias onde as ilhas de estabilidade são muito pequenas e todas as órbitas periódicas de período mais baixo são instáveis.

Nosso cálculo das funções de Wigner neste sistema é para autoestados na janela de energia considerada em [49], *i.e.* $0.753 < E < 0.837$, com igual valor para a constante de Plank, $\hbar = 0.05$. Da mesma forma, seguindo [49], as autofunções $\langle \mathbf{q} | n \rangle$ da versão quântica de (5.15) foram computadas usando a base de autofunções $\phi_{n_1}^{(q_1)}(q_1) \phi_{n_2}^{(q_2)}(q_2 - q_1^2/2)$, correspondendo a osciladores harmônicos nas coordenadas q_1 e $q_2 - q_1^2/2$ respectivamente ⁸. Comparando o quadrado da função de onda para o estado $n = 294$ mostrado na Fig.5.7, com o gráfico que aparece em [49], vemos a concordância das computações. As funções de Wigner para cada estado foram então calculadas diretamente da dupla integral sobre $\mathbf{Q} = (Q_1, Q_2)$:

$$W_n(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int d\mathbf{Q} \langle \mathbf{q} + \mathbf{Q}/2 | n \rangle \langle n | \mathbf{q} - \mathbf{Q}/2 \rangle \exp\{-i\mathbf{p} \cdot \mathbf{Q}/\hbar\}. \quad (5.16)$$

A órbita periódica mais simples para investigar o esquema de anéis na superfície central é a libração chamada de "órbita vertical". Para diferentes energias a família de órbitas verticais folheia o plano invariante $q_1 = p_1 = 0$ de simetria de reflexão da Hamiltoniana (5.15). A Hamiltoniana restrita a este plano é a de um oscilador harmônico, portanto o movimento é isócrono a diferentes energias sendo o período $\tau_v \approx 4.4428$. Fixando a energia, esta órbita é isolada, sendo elíptica (estável) para energias E menores que algum valor limítrofe entre 0.1 e 0.2, acima do qual atravessa uma bifurcação de duplicação de período tornando-se hiperbólica (instável) com reflexão [48].

⁸Foram usados $n_1 = 240$ osciladores na direção q_1 e $n_2 = 26$ na direção q_2 , exatamente como em [49].

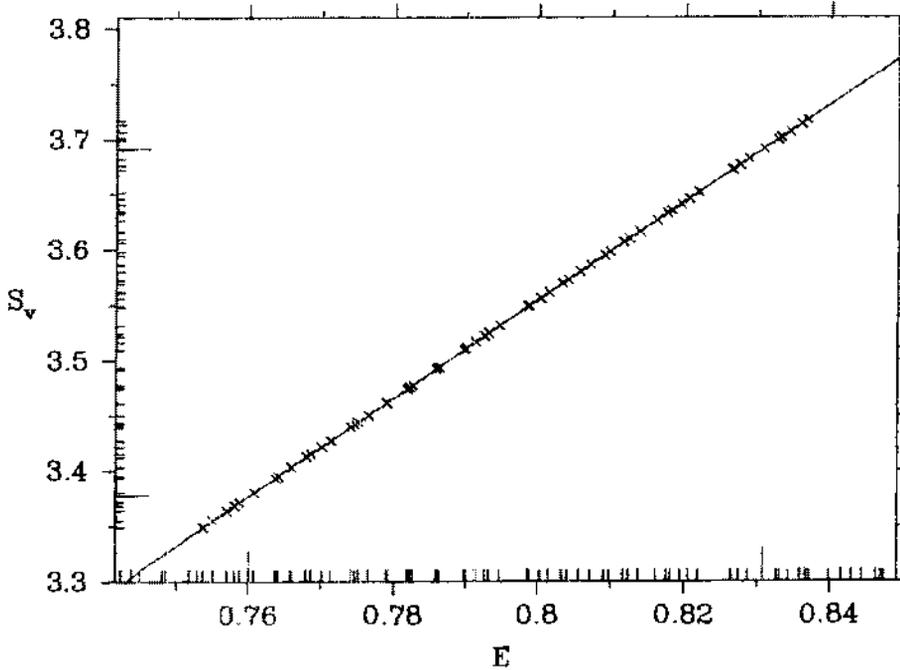


Figura 5.2: Gráfico da ação S_v da órbita vertical como função da energia. O movimento isócrono desta órbita para diferentes energias reflete-se na linearidade da relação, onde o declive da reta é: $\partial S_v / \partial E = \tau_v \approx 4.4428$ (τ_v o período da órbita). As pequenas linhas verticais no eixo das abscissas correspondem ao espectro de autoenergias. As pequenas linhas no eixo das ordenadas são as ações para as autoenergias na janela $0.753 < E < 0.837$. Dentro desta janela existem 59 estados com números quânticos que vão de $n = 252$ até $n = 311$. As cruzeiros sobre a reta são uma guia para o olho. As ações Bohr-quantizadas, $2\pi\hbar(m + \mu/4)$, são as duas linhas mais compridas no eixo vertical com $m = 10$ e $m = 11$, e as energias Bohr-quantizadas correspondentes são as duas linhas mais compridas no eixo horizontal. O valor do índice de Maslov desta libração é $\mu = 3$, sendo ímpar por ser uma órbita hiperbólica com reflexão [50]. O valor da constante de Planck é $\hbar = 0.05$.

Evidentemente, a superfície central para a órbita vertical é simplesmente a parte do plano invariante interior à órbita. Se as únicas cordas contribuindo fossem aquelas com pontas na órbita vertical, nós esperaríamos que a função de Wigner sobre o plano se parecesse com a de um oscilador harmônico sem a necessidade desta ser uma órbita Bohr-quantizada para nenhum dos estados. Mas aqui trata-se de um sistema com dois graus de liberdade onde os pontos x na superfície central no plano invariante podem também ser centros de cordas cujas pontas não estão na órbita vertical. Sendo assim, vamos começar olhando a estrutura da função de Wigner espectral no plano $q_1 = p_1 = 0$.

Dada uma energia correspondente a uma ação Bohr-quantizada da órbita vertical ⁹,

⁹ Chamaremos a estas energias de Bohr-quantizadas.

existem muitos estados com autoenergias perto dela como mostra a Fig.5.2. Calculando a média das funções de Wigner para os estados dentro de uma pequena janela ao redor de cada energia Bohr-quantizada da Fig.5.2 obtemos a função de Wigner espectral para essas energias (Fig.5.3 (a) e (c)). Isto é mais conveniente que calcular a média com a função Lorentziana, (4.5), e obtém-se essencialmente o mesmo resultado.

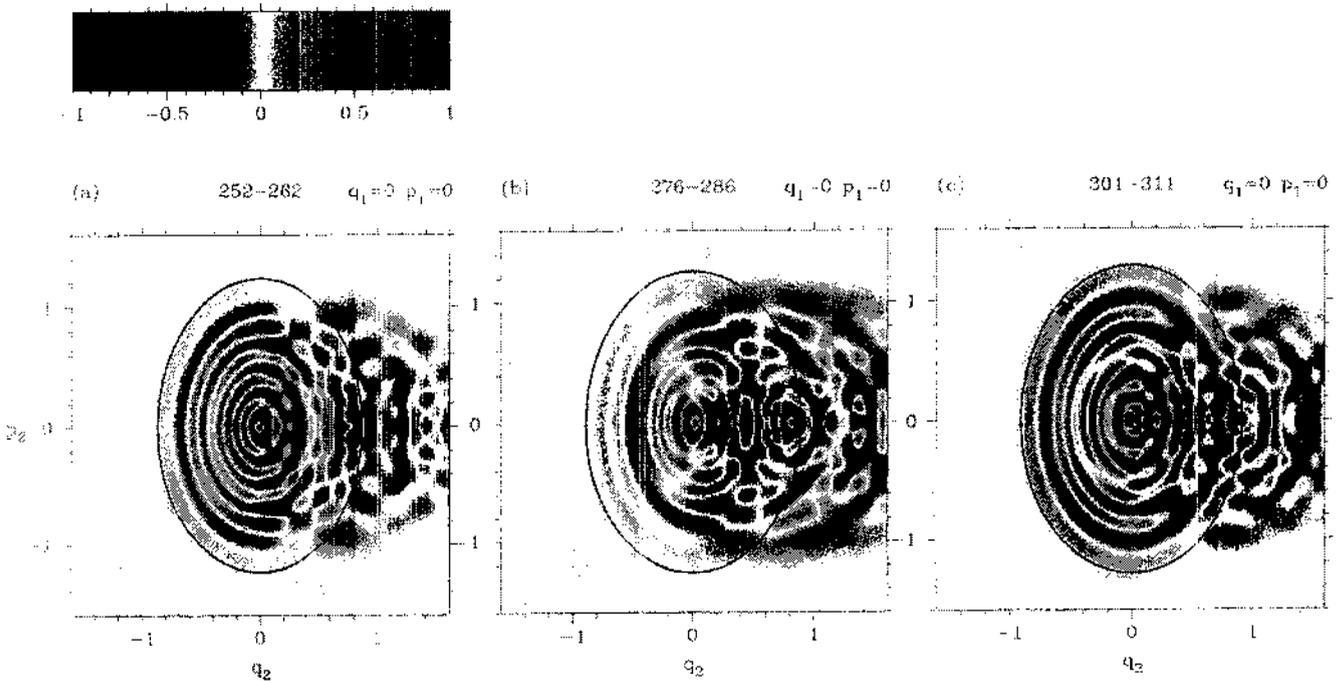


Figura 5.3: Seções da função de Wigner espectral sobre o plano invariante $q_1 = p_1 = 0$, para autoestados do Hamiltoniano NELSON. Foram calculadas como médias sobre estados em pequenas janelas de energia. A faixa de números quânticos, n , dentro de cada uma destas janelas está indicada acima de cada gráfico. (a) para os estados ao redor da primeira energia Bohr-quantizada da Fig.5.2 e (c) para a segunda. (b) é para os estados ao redor de uma energia no centro entre essas duas (Fig.5.2). As elipses pretas em cada gráfico são as camadas de energia constante no plano invariante para cada uma das autoenergias dos estados considerados nas médias. Note-se que a proximidade delas faz com que se confundam numa única curva. As órbitas periódicas verticais coincidem com estas elipses. O interior de cada elipse é a chamada “superfície central”, i.e. os centros $\mathbf{x} = (0, q_2, 0, p_2)$ de todas as cordas com pontas na órbita vertical. O esquema de representação colorida é o mesmo que foi usado na Fig.3.7.

Observa-se que para aproximadamente $q_2 < 0$ a função de Wigner espectral é marcadamente regular, exatamente como se esperaria para um oscilador harmônico de um grau de liberdade, de acordo com (5.9). Se agora superpomos as funções de Wigner numa janela de energias já não centrada numa energia Bohr-quantizada, obtemos uma função

de Wigner espectral como na Fig.5.3 (b). Novamente, obtém-se a mesma regularidade para $q_2 < 0$, embora a fase das oscilações tendo um corrimento com respeito ao caso de um oscilador harmônico simples. Qualitativamente, isto está em concordância com a discussão da fórmula (5.8). Na Fig.5.4 graficamos uma sequência de seções bidimensionais paralelas ao plano invariante onde a função de Wigner espectral foi calculada a partir dos estados do caso (a) da Fig.5.3. Pode-se observar que a cicatriz com estrutura de anéis, associada à órbita periódica, tem uma largura.

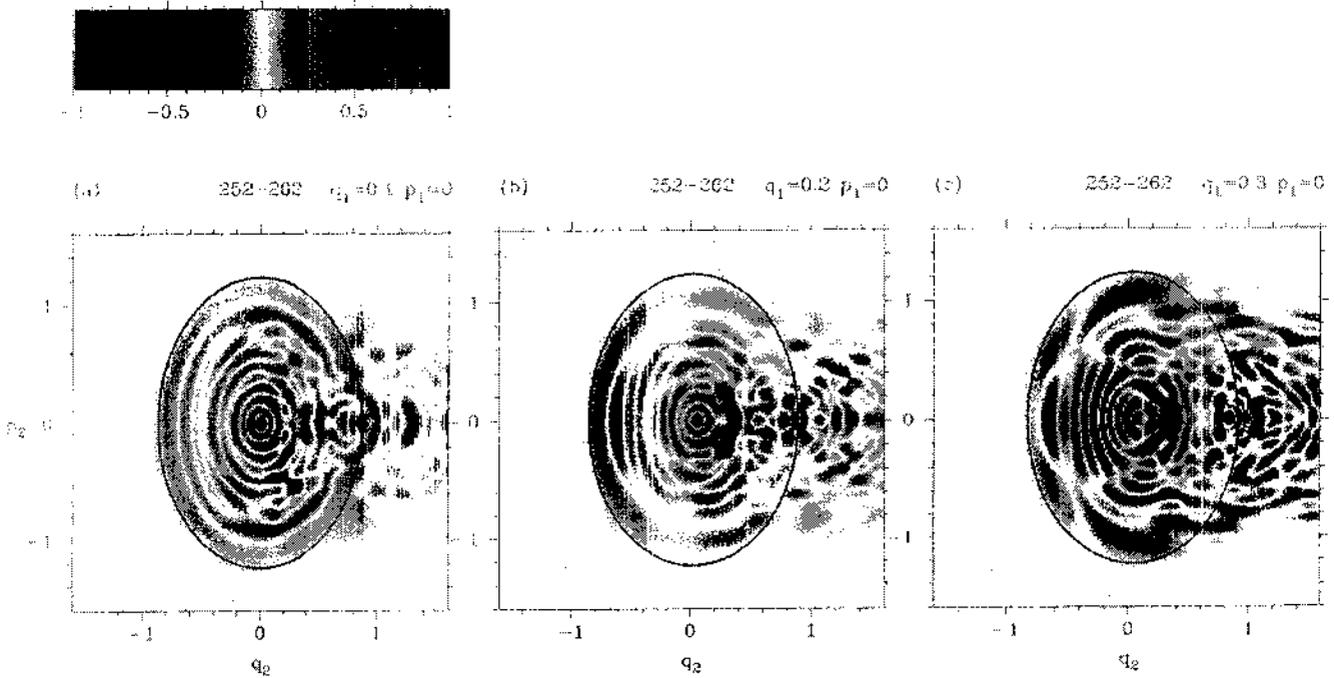


Figura 5.4: Seções bidimensionais da função de Wigner espectral paralelas ao plano invariante $q_1 = p_1 = 0$. Foram calculadas como médias sobre os estados do gráfico (a) da Fig.5.3.

As figuras apresentadas sugerem que na região de regularidade (*i.e.* $q_2 < 0$) não existem outros segmentos de trajetórias com cordas centradas nessa região do plano que contribuam à função de Wigner espectral com tempo de vôo t_j menor que o tempo de corte conjugado à largura da janela de energias onde a média foi realizada¹⁰. Parece ser uma tarefa dura, mas que valeria a pena, verificar esta hipótese com cálculos sobre as trajetórias clássicas.

¹⁰Ver discussão após a fórmula (4.11).

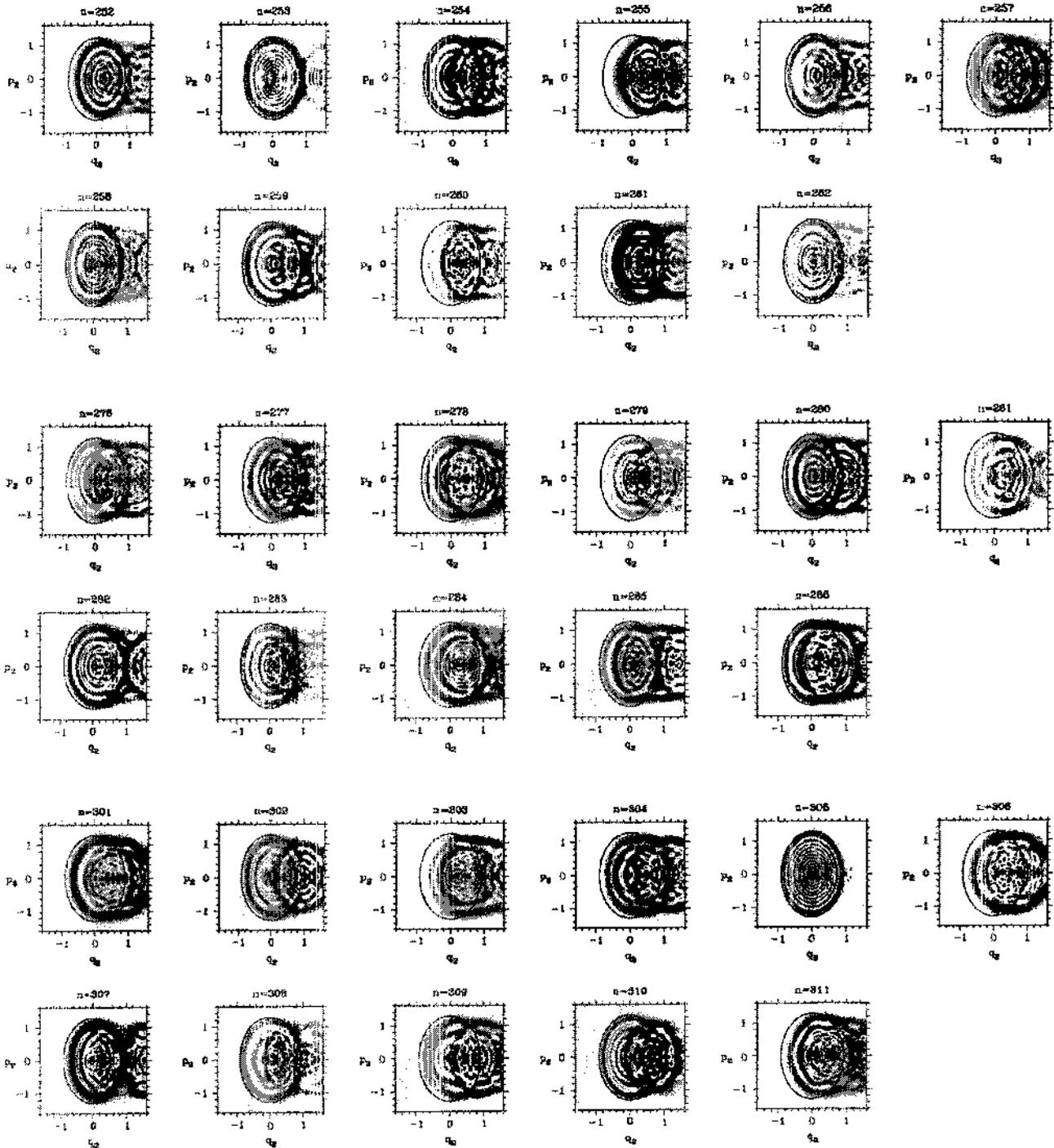


Figura 5.5: Seções das funções de Wigner individuais sobre o plano invariante $q_1 = p_1 = 0$, para os estados usados no cálculo das seções da função de Wigner espectral da Fig.5.3. As duas primeiras fileiras horizontais são para os estados do gráfico (a) da Fig.5.3, as duas seguintes para o gráfico (b) e as últimas para o (c). Os números quânticos n de cada estado estão indicados acima de cada gráfico.

As funções de Wigner para cada estado individual, usadas para obter as médias das figuras apresentadas, são ainda mais surpreendentes (ver Fig.5.5). Novamente encontramos a mesma regularidade para $q_2 < 0$. Então, poderíamos extrapolar nossa conclusão previa dizendo que parece não haver outros segmentos de trajetórias, com centros em essa região do plano, que contribuam às funções de Wigner individuais com tempos de vôo menores que o tempo de Heisenberg ¹¹. Esta regularidade das cicatrizes sobre funções de Wigner individuais surpreende mais se notamos que existe mesmo que as funções de onda não apresentem nenhum sinal de cicatriz, independentemente da energia considerada.

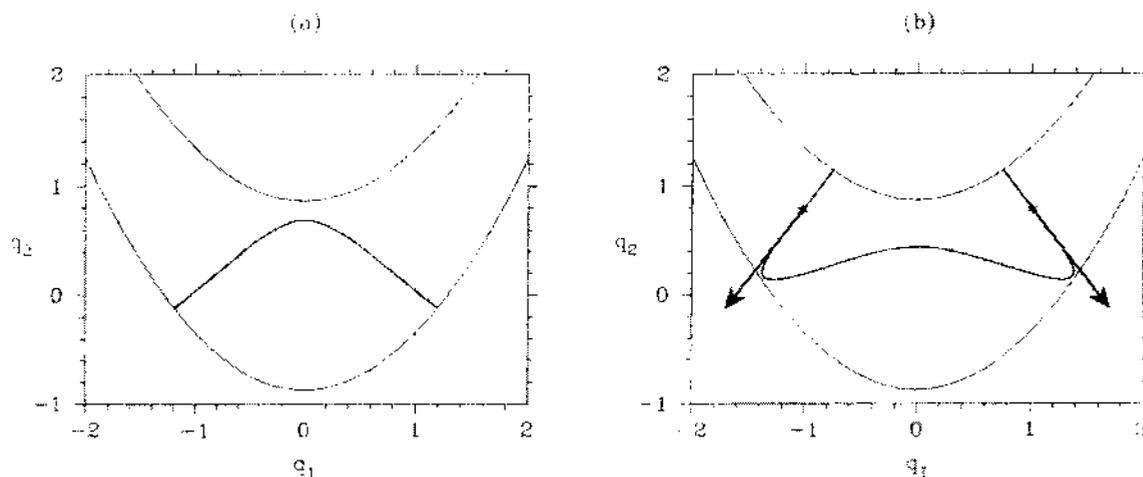


Figura 5.6: Projeções sobre o espaço de configurações de duas librações simétricas da Hamiltoniana (5.15). Os pontos de retorno estão sobre as curvas que representam as projeções da camada de energia constante. No espaço de fases estas órbitas têm cordas centradas no plano $q_1 = p_1 = 0$. Um exemplo é aquela unindo o par de pontos desenhados numa das figuras, onde os momentos correspondem aos vectores tangentes. Pontos equivalentes podem facilmente ser encontrados para a órbita “horizontal” (a). Segmentos de órbita com pontas nestas cordas podem contribuir para formar o padrão de interferência para $q_2 \geq 0$ nas Fig.5.3 e Fig.5.5, no plano invariante $q_1 = p_1 = 0$.

Discutiremos agora o padrão de interferência para $q_2 \geq 0$. Neste caso facilmente podemos achar outras cordas com centros nesta região que não estão associadas à órbita vertical e que também poderiam contribuir. De fato estas unem segmentos de outras librações que são simétricas com respeito ao plano invariante antes considerado. A Fig.5.6 mostra as projeções no espaço de configurações de duas dessas órbitas periódicas. O par

¹¹O tempo conjugado ao espaçamento médio de níveis, i.e. $t_H \sim \hbar/\Delta E$.

de vetores tangentes desenhados estão associados a dois possíveis pontos no espaço de fase unidos por uma corda centrada no plano invariante. A órbita mais simples é a horizontal, pertencente à família “boomerang” que começa na bifurcação de duplicação de período da órbita vertical para energias da ordem 0.1 (Fig.5.6 (a)).

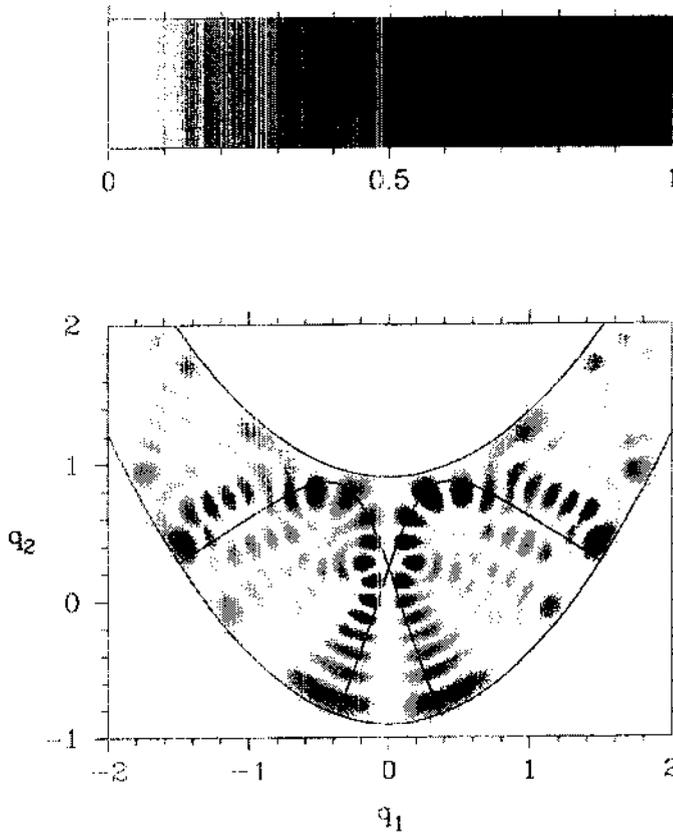


Figura 5.7: Densidade de probabilidade $|\langle q|n\rangle|^2$ para o autoestado $n = 294$. Este estado aparece em [49] como exemplo do único estado que tem uma cicatriz clara, no espaço de configurações, sobre uma órbita periódica. Esta órbita corresponde à libração assimétrica no gráfico.

Começa estável para logo inestabilizar-se após uma bifurcação isócrona para alguma energia entre 0.2 e 0.3. Volta a ser estável para energias da ordem 10.0, portanto na janela de energia considerada em nossos cálculos ela é hiperbólica sem reflexão. Para valores crescentes da energia esta órbita fica mais e mais horizontal podendo ser identificada a um outro oscilador harmônico não acoplado. A outra órbita periódica pertence a uma família que começa a partir de uma bifurcação de quadruplicação de período da órbita vertical para uma energia da ordem 0.02 (Fig.5.6 (b)). Ela é elíptica até uma bifurcação

isócrona numa energia entre 0.1 e 0.2, passando a ser hiperhólica sem reflexão para energias maiores. Note-se que esta órbita alcança regiões onde q_2 é maior que quaisquer dos valores dessa coordenada na órbita vertical. Isso explica a existência do padrão de interferência fora da camada de energia nas figuras apresentadas (elipses negras nas figuras).

Para verificar que o padrão de anéis na superfície central não se deve à simetria da órbita vertical, nós também estudamos a libração assimétrica mostrada na Fig.5.7. Neste caso a superfície central não é plana e seria um trabalho árduo tentar calcular a função de Wigner para os diferentes autoestados nessa superfície. Ao invés, examinamos seções em p para um dado q localizado sobre a projeção da órbita no espaço de posições. A camada de energia clássica é seccionada num círculo, sobre o qual a órbita periódica aparece como um par de pontos, simétricos com respeito à origem (já que trata-se de uma libração).

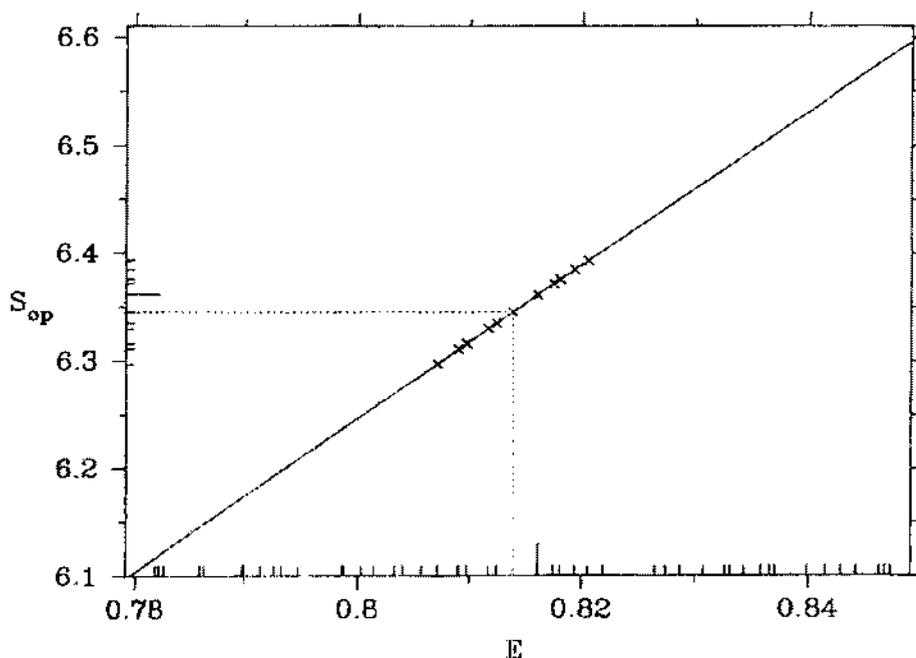


Figura 5.8: Gráfico da ação S_{op} da libração assimétrica da Fig.5.7 como função da energia. Para os valores considerados no eixo das abscissas a relação é praticamente linear, sendo o declive da reta $\partial S_{op}/\partial E = \tau_{op} \approx 7.14$. As pequenas linhas verticais no eixo das abscissas correspondem ao espectro de autoenergias. As pequenas linhas horizontais no eixo das ordenadas são as ações dos estados usados no cálculo das seções da função de Wigner espectral da Fig.5.10. As autoenergias destes estados estão ao redor do valor para o estado $n = 294$. A linha pontilhada une a autoenergia deste estado com o valor da ação da órbita para essa energia. A energia Bohr-quantizada, $m = 19$, está indicada com uma linha mais comprida, como sua correspondente ação (considerando que o índice de Maslov da órbita em questão é $\mu = 5$).

Este tipo de seções apresentam três pontos que correspondem a centros na superfície central: dois sobre a própria órbita periódica (com cordas de comprimento nulo), e um com $p = 0$ (centro de um par de cordas conectando ambos os pontos sobre a órbita periódica). Mudando a posição q ao longo da projeção da órbita periódica podemos seguir a função de Wigner ao longo de três linhas sobre a superfície central.

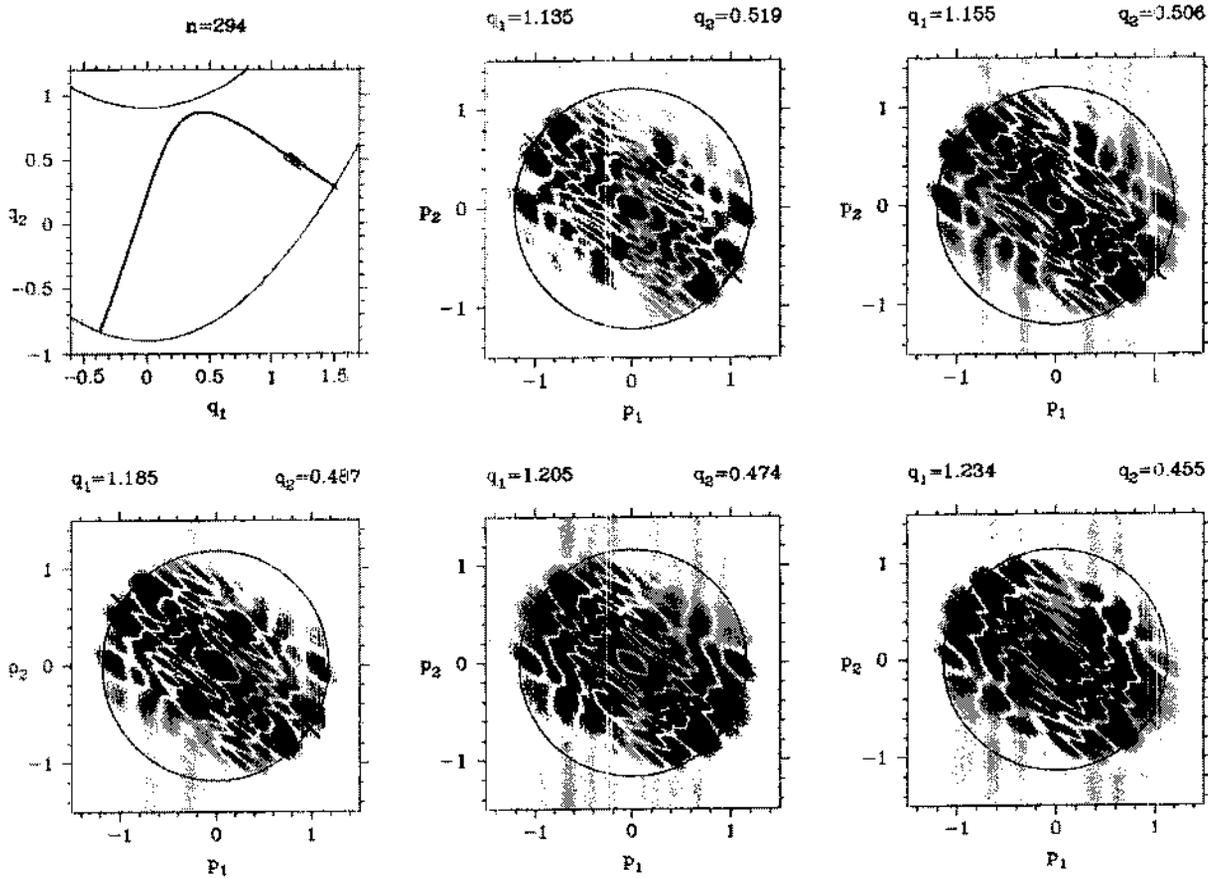


Figura 5.9: Seções da função de Wigner do autoestado $n = 294$, cada uma calculada para um $q = (q_1, q_2)$ fixo sobre a projeção no espaço de configurações da órbita periódica da Fig.5.7 (também desenhada nesta figura). Os diferentes pontos q usados estão marcados com pequenos círculos sobre a projeção da órbita, e os valores correspondentes estão acima de cada seção da função de Wigner. Neste tipo de seções em p , a camada de energia é um círculo. Nestes gráficos podemos acompanhar a função de Wigner em três pontos correspondentes a centros na superfície central da órbita: dois indicados com cruzeiros que indicam a passagem desta pela camada de energia em forma simétrica com respeito à origem (por tratar-se de uma libração), e o outro com $p = 0$. Para os dois primeiros pontos obviamente a corda associada é nula, enquanto que para o terceiro as cordas, com $\xi_q = 0$, vão de um ponto até o outro da órbita periódica.

Os centros ao longo da órbita deveriam estar perto de máximos da função de Wigner, se a órbita tiver uma ação perto de um valor Bohr-quantizado para todo q . Isto está

confirmado na Fig.5.9 onde graficamos as seções em \mathbf{p} da função de Wigner do estado $n = 294$ para uma sequência de pontos \mathbf{q} sobre a libração assimétrica. Na Fig.5.8 vemos que o valor da ação desta órbita para a autoenergia do estado $n = 294$ esta perto do valor Bohr-quantizado. Para $\mathbf{p} = 0$, temos oscilações que podem ser interpretadas com a teoria desenvolvida na seção 5.1. Primeiro notemos que este esquema de cicatrizes sobre as três linhas de centros na superfície central persiste nas seções da função de Wigner espectral.

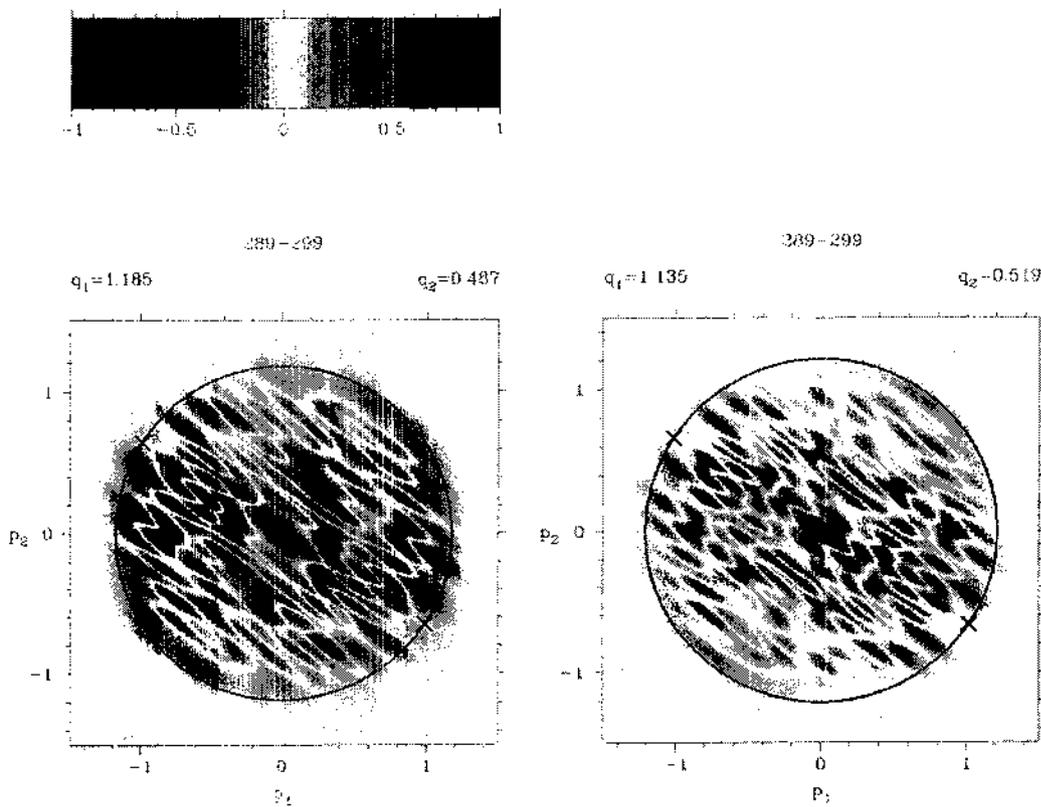


Figura 5.10: Seções da função de Wigner espectral calculada como uma média sobre os estados com autoenergias ao redor da correspondente ao estado $n = 294$ (ver Fig.5.8), para dois pontos \mathbf{q} fixos sobre a projeção da órbita periódica (Fig.5.9). Os círculos são as camadas de energia para as diferentes autoenergias, e a passagem da órbita periódica em cada uma delas são as cruzes sobre os círculos.

Calculando a média das funções de Wigner sobre as seções em \mathbf{p} , para os autoestados ao redor do estado $n = 294$, obtêm-se as seções da função de Wigner espectral. Duas destas seções são apresentadas na Fig.5.10 correspondendo a dois dos valores de \mathbf{q} sobre a projeção da órbita periódica. A fase das oscilações em $\mathbf{p} = 0$, tanto para a função de Wigner espectral como para a função de Wigner individual, é essencialmente aquela

dada pela fórmula (5.9) como mostramos na Fig.5.12. A largura destas cicatrizes foram estudadas removendo o ponto \mathbf{q} da projeção da órbita periódica encontrando-se a mesma ordem de magnitude que no caso da órbita vertical.

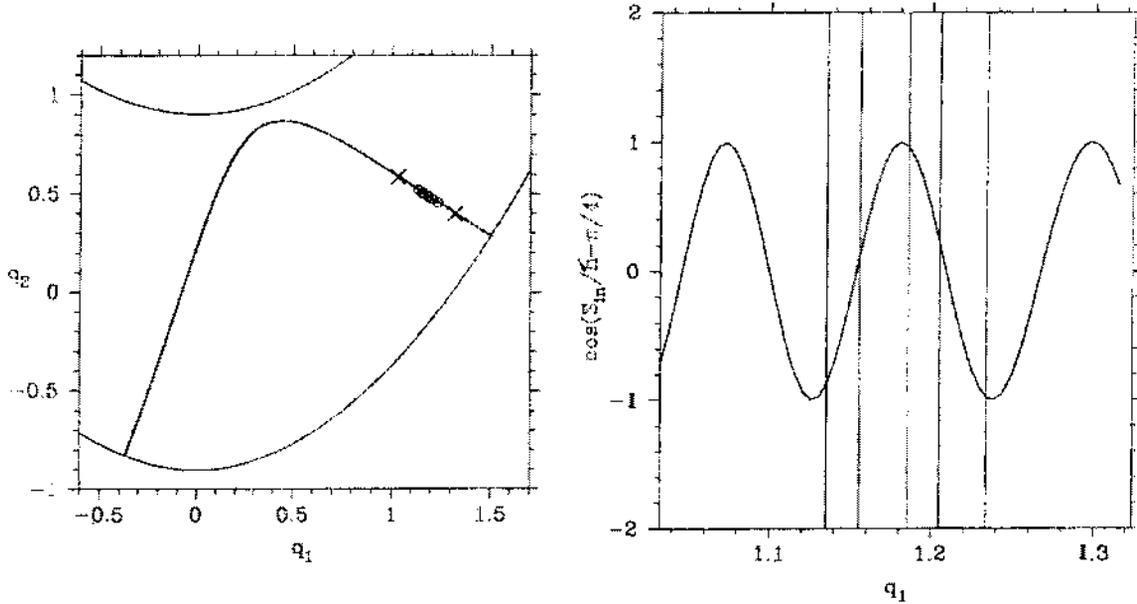


Figura 5.11: Comparação entre a fase das oscilações da função de Wigner espectral (ou equivalentemente da função de Wigner para o estado $n = 294$), sobre a linha de centros $\mathbf{x} = (\mathbf{q}, 0)$ na superfície central da órbita periódica (desenhada no gráfico à esquerda), e a dada pela fórmula (5.9). As ações S_{in} são para os segmentos de órbita com cordas centradas em $\mathbf{x} = (\mathbf{q}, 0)$. As linhas verticais no gráfico à direita marcam as coordenadas q_1 dos pontos indicados com pequenos círculos sobre a projeção da órbita à esquerda. Para cada um destes pontos foram calculadas as seções das figuras 5.9 e 5.10.

Na região onde a órbita periódica assimétrica aproxima-se do plano de reflexão, as seções em \mathbf{p} ficam mais desordenadas e confusas. Nessa região, não foram encontradas oscilações claras em \mathbf{q} , na linha de centros com $\mathbf{p} = 0$, tanto para a função de Wigner espectral como para a função de Wigner individual (ver Fig.5.12). Mas, deve-se lembrar que esta é a região onde as cicatrizes na órbita vertical sofrem múltiplas interferências. Sendo assim, deve ser em circunstâncias muito especiais onde os únicos segmentos de órbita que contribuam, centrados num dado ponto, pertencam a uma mesma órbita.

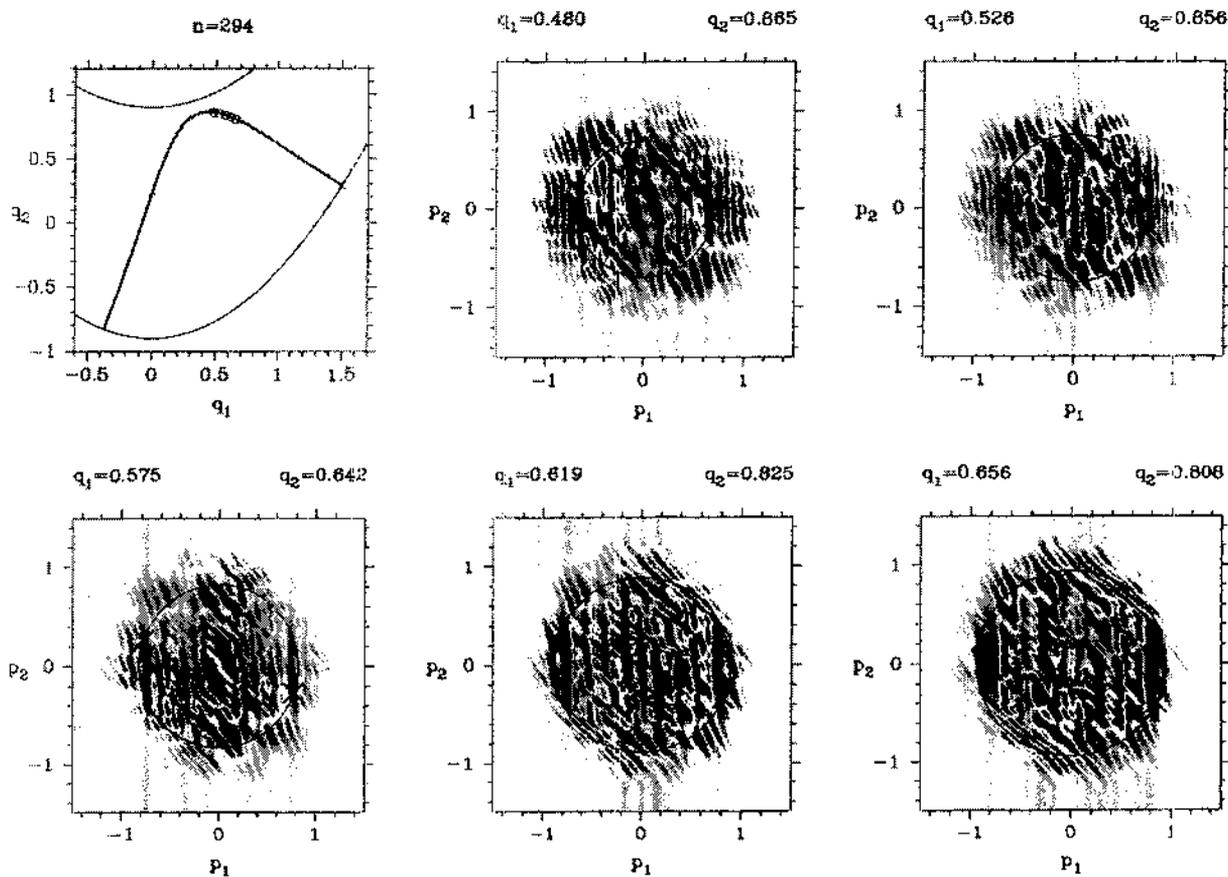


Figura 5.12: Idem Fig.5.9 mas para os novos pontos q indicados com pequenos círculos sobre a projeção da órbita periódica no espaço das posições .

Capítulo 6

Conclusão

Nesta tese foram desenvolvidos dois trabalhos baseados na geometria semiclássica de centros e cordas que a função de Wigner possui, por ser o símbolo para representar os estados no espaço de fases na representação de Weyl da mecânica quântica. O primeiro deles foi no âmbito dos sistemas Hamiltonianos integráveis e o segundo para os caóticos.

Em primeiro lugar achamos uma aproximação semiclássica da função de Husimi em sistemas com um grau de liberdade, integrando a função de Wigner com uma janela Gaussiana. Isto não é fundamentalmente diferente do cálculo das densidades de probabilidades de posições e momentos como projeções da função de Wigner, exceto que neste caso a projeção é sobre os estados coerentes. Em cada projeção obtém-se uma aproximação clássica substituindo a função de Wigner por uma função δ ao longo da região classicamente permitida. No nosso caso, isto leva a um pico de intensidade estreito ao longo da região clássica, o qual foi suplementado por um termo oscilatório derivado da estrutura de centros e cordas dentro da curva de energia. As oscilações deste último termo, ao longo do vale raso clássico, combinam-se com o primeiro para formar uma série de mínimos locais, que indicam as posições dos zeros da função de Husimi dentro da curva de energia. Esta explicação geométrica da distribuição dos zeros da função de Husimi não deve ser forçada ao ponto de predizer a posição absoluta dos zeros, no entanto não deixa de ser uma surpresa que as posições encontradas sejam assintoticamente precisas embora sendo obtidas pela subtração de dois termos exponencialmente pequenos.

A vantagem de ter derivado a aproximação intermediária (3.15) é que a localização

do vale tem uma dependência simples sobre as cordas mínimas ao longo das curvas de ação de centros constante. A curva determinada pelo vale é puramente clássica, uma vez que a excentricidade β dos estados coerentes define a métrica no espaço de fases. As correções adicionadas à fórmula completa (3.18) são também clássicas. Elas corrigem a distribuição dos zeros ao longo do vale. Desta maneira, encontramos que os vales de zeros estão basicamente determinados pelas estruturas clássicas em concordância com Leboeuf e Voros [24].

É uma surpresa que a cáustica de Wigner \mathcal{L} não afete a posição dos zeros, levando em conta que a cáustica ao longo do toro manifestou-se fundamental na determinação destes. No entanto, este fato está de acordo com cálculos prévios sobre projeções da função de Wigner [3]. Em cada caso a integração isola uma corda só que contribui na função de Wigner semiclassica, ignorando qualquer outra corda singular. Assim, nós podemos compreender a complexidade da função de Wigner que resulta da necessidade de levar em conta as diferentes projeções .

Temos limitado nossa análise aos sistemas Hamiltonianos autônomos com um grau de liberdade, os quais são necessariamente integráveis. No entanto, nossas aproximações são igualmente válidas para mapas clássicos integráveis do plano em si mesmo, onde o resultado continuará sendo: os zeros estão sempre ao longo das curvas de cordas mínimas, onde cada mínimo é avaliado ao longo das linhas de fase constante da função de Wigner. Como a estrutura de cordas generaliza-se para toros de mais dimensões [2], nosso método também pode ser estendido para estudar funções de Husimi em sistemas integráveis com mais de um grau de liberdade. Em particular, o método pode ajudar a definir as variedades de ordem zero onde os zeros da função de Husimi encontram-se. Como vimos na segunda parte desta tese a estrutura de cordas e centros também está presente na função de Wigner nos sistemas caóticos, embora envolva órbitas individuais. O desafio para encontrar a sua relação com a distribuição dos zeros da função de Husimi neste tipo de sistemas permanece em aberto.

O segundo trabalho corresponde a um novo esquema de cicatrizes de órbitas periódicas instáveis para a função de Wigner espectral. Nosso principal resultado aqui é que os

segmentos individuais destas órbitas periódicas representam um papel muito importante na estrutura desta função, mesmo para pontos de avaliação bem dentro da camada de energia. De fato, mostramos como eles podem ser somados coerentemente para formar um padrão de anéis concêntricos na superfície bidimensional formada por todos os centros (pontos de avaliação da função de Wigner espectral) de cordas com pontas numa órbita periódica, a qual chamamos de superfície central. No caso em que a órbita periódica está Bohr-quantizada a amplitude do padrão de anéis é maior e alcança um máximo na própria órbita. Isto, permite-nos construir um quadro da estrutura semiclássica da função de Wigner espectral em sistemas caóticos, no qual esta pode ser vista como uma sobreposição aleatória de contribuições de muitas cordas sobre a qual destacam-se as contribuições de cordas suportadas por órbitas periódicas Bohr-quantizadas.

É surpreendente que as seções das funções de Wigner de autoestados individuais do Hamiltoniano estudado, apresentem a mesma regularidade de anéis na superfície central que sua sobreposição coletiva *i.e.* a função de Wigner espectral. Este resultado nos encoraja a extrapolar o quadro semiclássico da função de Wigner espectral também para as funções de Wigner de autoestados caóticos. Este quadro, prefigurado por Ozorio de Almeida em [16], muda a visão semiclássica da função de Wigner para este tipo de autoestados, que vinha sendo o de um pico estreito perto da camada de energia, dada pela hipótese de Berry e Voros [40, 41], modulado por cicatrizes de órbitas periódicas da teoria de Berry [46]. No entanto, a alta variabilidade do corrimento de fases do padrão de anéis para as funções de Wigner entre estados vizinhos assim como também a marcada diferença da nitidez do padrão de estado em estado, não permite que esta extrapolação chegue ao ponto de considerar que o padrão de anéis das funções de Wigner individuais pode ser descrito simplesmente fazendo $\varepsilon \rightarrow 0$ na fórmula (5.8). Somente em casos muito especiais isto será verdadeiro.

Caberia a pergunta de qual é a influência das oscilações do padrão de anéis nas projeções da função de Wigner. Como vimos nesta tese, a amplitude da projeção da função de Wigner sobre os estados coerentes *i.e.* a função de Husimi, decrece exponen-

cialmente com o comprimento da corda ¹ centrada no ponto de avaliação da projeção . Portanto, quanto mais interior à camada de energia estiver o ponto de avaliação , menor será a amplitude deste tipo de projeção . O caso da projeção da função de Wigner que dá a distribuição de probabilidades nas posições (2.12), pode ser emulado considerando as projeções sobre estados coerentes “alongados” (onde $\beta \rightarrow \infty$) ². Neste caso as projeções da função de Wigner estão dominadas por as cordas curtas, que correspondem à borda do padrão de anéis na superfície central (o qual é o objeto da teoria de Berry sobre cicatrizes [46]), e pelas cordas longas, com Δq pequeno, que são as responsáveis pelas oscilações nas cicatrizes no espaço das configurações tratadas por Bogomolny [47].

No entanto, o padrão de cicatrizes encontrado na função de Wigner, como assim também na função de Wigner espectral, apresentam as cicatrizes de órbitas periódicas sobre autoestados caóticos no espaço de fases com muita maior clareza que suas projeções no espaço das configurações , onde facilmente podem ser confundidas com o fundo aleatório. Em efeito, basta lembrar que na fórmula de cicatrizes de Bogomolny para uma sobreposição de quadrados de autofunções , para poder observar as cicatrizes devemos efetuar previamente uma suavização para eliminar o fundo aleatório, enquanto que não é necessário suavizar para observar a estrutura de anéis que domina a função de Wigner sobre a superfície central de uma órbita Bohr-quantizada.

Finalmente, cabe destacar que apesar dos vários estudos computacionais sobre cicatrizes em funções de onda (ver extensa lista em [34]) e até experimentais que incluem, por exemplo, cavidades de microondas [36], junções de tunelamento [37] e átomos de hidrogênio em campos magnéticos intensos uniformes [38], esta tese contém o primeiro esforço para observar cicatrizes nas funções de Wigner individuais ou coletivas.

¹No sentido da norma (2.44).

²Se considerarmos $\beta \rightarrow \infty$ em (2.41), exceto pela necessidade de redefinir a normalização , temos $\langle q | \Omega_{\mathbf{x}} \rangle \rightarrow \delta(q - Q)$, i.e. o estado coerente $|\Omega_{\mathbf{x}}\rangle$ vira autoestado do operador posição . Desta forma, podemos considerar que a função de Husimi dada por (2.42) vira a distribuição de probabilidades $|\langle q | \psi \rangle|^2$.

Apêndice A

A.1 A função de Husimi para a partícula numa caixa.

Aqui vamos mostrar os passos fundamentais na derivação de (3.3). Vamos começar com a expressão da função de Husimi dada pela fórmula (2.42),

$$H(\mathbf{X}) = \frac{1}{2\pi\hbar} \left| \int_{-\infty}^{+\infty} \langle \Omega_{\mathbf{X}} | q \rangle \langle q | \psi_n \rangle dq \right|^2 = \frac{\beta}{l(\pi\hbar)^{3/2}} \left| \int_{-l/2}^{+l/2} e^{-\frac{\beta^2}{2\hbar}(q-Q)^2 - i\frac{Pq}{\hbar}} \cos(p_n q/\hbar) dq \right|^2, \quad (\text{A.1})$$

onde $\langle q | \Omega_{\mathbf{X}} \rangle$ é o estado coerente normalizado (2.41), e $\langle q | \psi_n \rangle$ a autofunção par (3.2). Se expressarmos o cosseno na última integral como $(1/2)(e^{ip_n q/\hbar} + e^{-ip_n q/\hbar})$ obtemos

$$H(\mathbf{X}) = \frac{\beta}{4l(\pi\hbar)^{3/2}} \left| e^{-\frac{(P-p_n)^2}{2\hbar\beta^2}} e^{-i\frac{(P-p_n)Q}{\hbar}} \int_{-l/2}^{+l/2} e^{-\left\{ \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} [\beta(q-Q) + i(P-p_n)/\beta] \right\}^2} dq + e^{-\frac{(P+p_n)^2}{2\hbar\beta^2}} e^{-i\frac{(P+p_n)Q}{\hbar}} \int_{-l/2}^{+l/2} e^{-\left\{ \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} [\beta(q-Q) + i(P+p_n)/\beta] \right\}^2} dq \right|^2. \quad (\text{A.2})$$

Mudando as variáveis na expressão entre chaves em cada uma das integrais, e usando a definição de função erro

$$\Phi(w) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^w e^{-y^2} dy, \quad (\text{A.3})$$

a função de Husimi vira

$$H(\mathbf{X}) = \frac{1}{8l\beta\sqrt{\pi\hbar}} \left| e^{-\frac{(P-p_n)^2}{2\hbar\beta^2}} e^{-i\frac{(P-p_n)Q}{\hbar}} \left[\Phi\left(\frac{z_1}{\sqrt{2\hbar}}\right) + \Phi\left(\frac{z_2}{\sqrt{2\hbar}}\right) \right] + e^{-\frac{(P+p_n)^2}{2\hbar\beta^2}} e^{-i\frac{(P+p_n)Q}{\hbar}} \left[\Phi\left(\frac{z_3}{\sqrt{2\hbar}}\right) + \Phi\left(\frac{z_4}{\sqrt{2\hbar}}\right) \right] \right|^2. \quad (\text{A.4})$$

Com a ajuda da identidade $|w_1 + w_2|^2 = |w_1|^2 + |w_2|^2 + 2 \Re(w_1 w_2)$ se chega à expressão (3.3) para a função de Husimi neste problema.

A continuação segue a expansão assintótica da função erro $\Phi(w)$ usada em 3.1 para analisar, no limite semiclássico, a expressão (3.3) para a função de Husimi:

$$\Phi(w) \approx \begin{cases} 1 - \frac{e^{-w^2}}{\sqrt{\pi w}} [F_n(w) + O(|w|^{-2(n+1)})] & \Re(w) > 0 \\ -1 - \frac{e^{-w^2}}{\sqrt{\pi w}} [F_n(w) + O(|w|^{-2(n+1)})] & \Re(w) < 0 \end{cases} \quad |w| \text{ grande}, \quad (\text{A.5})$$

onde $F_n(w) = \sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k (2k-1)!}{(2w^2)^k}$. Esta expansão pode ser encontrada nas referências usuais [51, 52], embora em forma confusa ou mesmo incompleta.

Apêndice B

B.1 Detalhes de nossa aproximação geométrica.

Aqui vamos derivar o termo oscilatório da expressão (3.18). O ponto de partida será aplicar o suavizado Gaussiano (2.45) sobre a aproximação simples (2.24) da função de Wigner, dentro da curva de energia. Introduzindo a aproximação (3.13) para a ação de centros, mas incluindo o termo de segunda ordem $\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{X}) \mathcal{H}(\mathbf{X})(\mathbf{x} - \mathbf{X})^t$ (com $\mathcal{H}(\mathbf{X})$ a matriz Hessiana (3.17)), e usando a aproximação (3.14) para o denominador, a integral fica

$$\frac{2}{\pi\sqrt{2\pi\hbar}(\omega^{-1})\pi\hbar\sqrt{D(\mathbf{X})}} \Re e \left[\exp \left\{ i \left(\frac{S(\mathbf{X})}{\hbar} - \frac{\pi}{4} \right) \right\} \mathcal{I}(\mathbf{X}) \right], \quad (\text{B.1})$$

onde a nova integral, $\mathcal{I}(\mathbf{X})$, a ser calculada é

$$\mathcal{I}(\mathbf{X}) = \int_{-\infty}^{+\infty} dq \int_{-\infty}^{+\infty} dp \ e^{\frac{i}{\hbar} [-a_1(q-Q)^2 - a_2(p-P)^2 + a_3(q-Q)(p-P) + a_4(q-Q) + a_5(p-P)]}, \quad (\text{B.2})$$

com os coeficientes complexos: $a_1(\mathbf{X}) = \beta^2 - i \partial_q(\xi_p)/2$, $a_2(\mathbf{X}) = 1/\beta^2 + i \partial_p(\xi_q)/2$, $a_3(\mathbf{X}) = i \partial_p(\xi_p)$, $a_4(\mathbf{X}) = i \xi_P$ e $a_5(\mathbf{X}) = -i \xi_Q$. Esta dupla integral Gaussiana pode ser avaliada analiticamente:

$$\mathcal{I}(\mathbf{X}) = \frac{\pi\hbar}{\sqrt{|a_1(a_2 - a_3^2/4a_1)|}} \exp \left\{ \frac{1}{4\hbar} \left[\frac{a_4^2}{a_1} + \frac{(a_5 + a_3a_4/2a_1)^2}{(a_2 - a_3^2/4a_1)} \right] - i \frac{(\theta_1 + \theta_2)}{2} \right\}, \quad (\text{B.3})$$

onde $\theta_1 = \arg(a_1)$ e $\theta_2 = \arg(a_2 - a_3^2/4a_1)$ com $\pi/2 < \theta_1, \theta_2 < \pi/2$. Este resultado pode ser escrito numa forma mais elegante com a ajuda da matriz complexa, $\mathcal{A}(\mathbf{X})$, definida em (3.19),

$$\mathcal{I}(\mathbf{X}) = \frac{\pi\hbar}{\sqrt{|\det \mathcal{A}(\mathbf{X})|}} \exp \left\{ \frac{1}{4\hbar} \frac{\xi(\mathbf{X}) \mathcal{A}(\mathbf{X}) \xi^t(\mathbf{X})}{\det \mathcal{A}(\mathbf{X})} - i \frac{\arg(\det \mathcal{A}(\mathbf{X}))}{2} \right\}. \quad (\text{B.4})$$

Substituindo (B.4) em (B.1) e achando a parte real encontra-se o termo oscilatório em (3.18).

Apêndice C

C.1 A função de Husimi para uma partícula sujeita a uma força constante.

Neste apêndice vamos calcular a função de Husimi (3.24). A ideia é achar a função de Bargmann $\langle z|\psi_E\rangle$ para o estado quântico (3.22) para logo usando (2.46) encontrar a função de Husimi. Para achar a função de Bargmann precisamos resolver a equação de Schrödinger na representação de Bargmann. O procedimento padrão para obter a equação de Bargmann consiste em escrever o Hamiltoniano quântico como função dos operadores criação, \hat{a}^\dagger , e destruição (2.38), \hat{a} , na ordem normal (*i.e.* todos os operadores \hat{a} sistematicamente ordenados a direita dos \hat{a}^\dagger), e logo usar

$$\langle z|\hat{a}|\psi\rangle = \hbar \partial_z \langle z|\psi\rangle \quad \langle z|\hat{a}^\dagger|\psi\rangle = z \langle z|\psi\rangle, \quad (\text{C.1})$$

(onde os $|z\rangle$ são os estados coerentes não normalizados definidos na seção 2.2), Desta maneira, temos

$$\left\{ -\frac{\beta^2}{4m} [\hbar^2 \partial_z^2 - 2\hbar z \partial_z + z^2 - \hbar] - \frac{F}{\sqrt{2}\beta} z - \frac{F\hbar}{\sqrt{2}\beta} \partial_z - E \right\} \langle z|\psi_E\rangle = 0. \quad (\text{C.2})$$

Esta equação pode ser escrita na forma

$$\{[\partial_z - f(z)]^2 + c(z - z_*)\} \langle z|\psi_E\rangle = 0, \quad (\text{C.3})$$

onde $c = (1/\hbar^2)8mF/\beta^3\sqrt{2}$, $z_* = (\beta/\sqrt{2})(q_r + mF/2\beta^4)$ (com $q_r = -E/F$ o ponto de retorno da trajetória clássica de energia E) e $f(z) = (1/\hbar)(z - (2mF/\beta^3\sqrt{2}))$. A solução geral de (C.3) é

$$\langle z|\psi_E\rangle = \exp\{g(z)\} \text{Ai}\{-(z - z_*)[c]^{1/3}\} \quad \text{com} \quad \partial_z g(z) = f(z), \quad (\text{C.4})$$

então a função de Bargmann para um autoestado do problema de uma partícula sujeita a uma força constante é

$$\langle z|\psi_E\rangle = B \exp\left\{\frac{1}{\hbar}\left(\frac{z^2}{2} - \frac{2mF}{\sqrt{2}\beta^3}z\right)\right\} \text{Ai}\left\{-\left(z - z_*\right)\left[\frac{8mF}{\hbar^2\sqrt{2}\beta^3}\right]^{1/3}\right\}, \quad (\text{C.5})$$

onde B é uma constante complexa. Substituindo (C.5) em (2.46), lembrando que $z = 2^{-1/2}(\beta Q - iP/\beta)$ e $z_* = (\beta/\sqrt{2})Q_*$, obtemos a função de Husimi (3.24).

Apêndice D

D.1 Método WKB na representação de Bargmann para a função de Husimi no problema da partícula sujeita a uma força constante.

Aqui vamos seguir a construção do tipo WKB na representação de Bargmann desenvolvida por Voros [17] para obter uma aproximação semiclássica à função de Bargmann $\langle z|\psi_E\rangle$ e dessa maneira, através de (2.46), uma aproximação semiclássica à função de Husimi.

Usaremos a construção WKB baseada no símbolo de Weyl $H_W(\mathbf{x})$, do Hamiltoniano quântico \hat{H} , para os casos onde este não depende de \hbar (*i.e.* o símbolo coincide com a Hamiltoniana clássica, II). Como este é o caso das Hamiltonianas clássicas da forma (2.10) escreveremos H em vez de H_W .

Segundo Voros [17], nós aplicamos as mesmas fórmulas que no caso da representação de Schrödinger (*i.e.* a representação de posições), mas substituindo $\mathbf{x} = (q, p) \rightarrow (z, \bar{z})$ e $\hbar \rightarrow i\hbar$. Desta maneira, a equação de autovalores admite soluções assintóticas locais para a ordem dominante em \hbar ,

$$\langle z|\psi_E\rangle \approx \left[\frac{\partial H}{\partial \bar{z}} \right]_{\bar{z}_E(z)}^{-1/2} \exp\{S(z)/\hbar\}, \quad (\text{D.1})$$

onde $\bar{z}_E(z)$ está implicitamente definida pela curva de energia clássica nas coordenadas (z, \bar{z}) ,

$$H(z, \bar{z}) = E, \quad (\text{D.2})$$

e onde $S(z)$ é a ação clássica nas coordenadas complexas,

$$S(z) = \int^z \bar{z}_E(z') dz' . \quad (D.3)$$

O fato de \bar{z} e seu complexo conjugado z estarem relacionados entre si pela condição $H(z, \bar{z}) = E$, restringe z a valores reais sobre a curva de energia. Isto significa que $\bar{z}_E(z)$ é um dos ramos de (D.2), definido sobre a folha à qual a curva de energia pertence, formando assim uma função unívoca sobre essa curva. Para uma Hamiltoniana H não analítica, não há garantia de existir uma continuação analítica de $\bar{z}_E(z)$ em qualquer ponto fora da curva de energia. Sendo assim, (D.1) está bem definida somente para z na curva de energia real, e não possui nenhuma singularidade pois esta função não tem associados pontos de retorno.

Para obter uma aproximação holomórfica fora da curva de energia, usamos o fato da Hamiltoniana clássica analisada é analítica em ambas as variáveis z e \bar{z} , então a relação (D.2) define implicitamente \bar{z}_E como uma função multívoca de z . No entanto, fora da curva de energia real, $\bar{z}_E(z)$ não é mais o complexo conjugado de z , então usamos uma notação menos confusa escrevendo como y a variável independente canonicamente conjugada a z ,

$$z = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\beta q - i \frac{p}{\beta} \right) \quad y = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\beta q + i \frac{p}{\beta} \right) , \quad (D.4)$$

onde q e p são agora complexos. Então, a curva de energia complexa em este problema é

$$H(z, y) = a_0 y^2 + a_1(z) y + a_2(z) = 0 , \quad (D.5)$$

com os coeficientes: $a_0 = -\beta^2/4m$, $a_1(z) = \beta^2 z/2m - F/\sqrt{2}\beta$ e $a_2(z) = -\beta^2 z^2/4m - Fz/\sqrt{2}\beta - E$. Esta é uma equação de segundo grau, então os ramos $y = y_E(z)$ estão definidos explicitamente sobre uma superfície de Riemann de duas folhas. Fazendo a mudança de variáveis, $w = 2a_0 y + a_1$, obtemos a equação equivalente

$$w^2 - u(z) = 0 , \quad (D.6)$$

onde $u(z) = a_1^2 - 4a_0a_2 = -[\sqrt{2}\beta F/m](z - z_*)$ ($z_* = [\beta/\sqrt{2}](mF/2\beta^4 + q_r)$ e $q_r = -E/F$ é o ponto de retorno da trajetória clássica de energia E). A função $w(z)$ está definida sobre uma superfície de Riemann com pontos de ramificação $z = z_*$ e $z = +\infty$. Os dois ramos são $w_I(z) = i[\sqrt{2}\beta F/m]^{1/2}\sqrt{z - z_*}$ e $w_{II}(z) = -i[\sqrt{2}\beta F/m]^{1/2}\sqrt{z - z_*}$, ($F > 0$). Nós aqui usamos a notação: $\sqrt{z - z_*} = \sqrt{r}e^{i\theta/2}$, $0 < \theta < 2\pi$; portanto podemos também considerar z no plano complexo ordinário e, $w_I(z)$ e $w_{II}(z)$, como duas funções diferentes. Como y é uma função unívoca de w , os ramos $y_E(z)$, ou equivalentemente as soluções de (D.5) são ,

$$\begin{aligned} y_I(z) &= -i \left[\frac{8mF}{\sqrt{2}\beta^3} \right]^{1/2} \sqrt{z - z_*} + z - \frac{2mF}{\sqrt{2}\beta^3} \\ y_{II}(z) &= i \left[\frac{8mF}{\sqrt{2}\beta^3} \right]^{1/2} \sqrt{z - z_*} + z - \frac{2mF}{\sqrt{2}\beta^3} \end{aligned} \quad (F > 0). \quad (D.7)$$

A aproximação WKB é uma combinação linear de soluções do tipo (D.1) para cada ramo, com validade também para qualquer ponto fora da curva de energia:

$$\langle z | \psi_E \rangle \approx \left[\frac{\partial H}{\partial y} \right]_{y_I(z)}^{-1/2} \exp\{S_I(z)/\hbar\} + \left[\frac{\partial H}{\partial y} \right]_{y_{II}(z)}^{-1/2} \exp\{S_{II}(z)/\hbar\}, \quad (D.8)$$

onde as ações complexas para cada ramo são

$$S_I(z) = \int^z y_I(z') dz' \quad S_{II}(z) = \int^z y_{II}(z') dz'. \quad (D.9)$$

Assim, a aproximação semiclássica à função de Bargmann para este problema é

$$\begin{aligned} \langle z | \psi_E \rangle &\approx B' \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \left(\frac{z^2}{2} - \frac{2mF}{\sqrt{2}\beta^3} z \right) \right\} (z - z_*)^{-1/4} \times \\ &\times \cos \left\{ \frac{2}{3\hbar} \left[\frac{8mF}{\sqrt{2}\beta^3} \right]^{1/2} (z - z_*)^{3/2} - \frac{\pi}{4} \right\}. \end{aligned} \quad (D.10)$$

Esta expressão também pode ser obtida aplicando a forma assintótica (2.27) para a função de Airy na função de Bargmann (C.5) do Apêndice C.1. Substituindo (D.10) em (2.46) obtemos a aproximação semiclássica (3.25) para a função de Husimi neste problema.

Já que os zeros da função de Husimi são os mesmos da função de Bargmann, a distribuição semiclássica dos zeros pode ser obtida de (D.10). No entanto, além dos zeros

(3.26) sobre o eixo real, (D.10) prediz zeros espúrios sobre as linhas retas que começam em $z = z_*$ e cujas direções são : $\theta = 2\pi/3$ e $\theta = 4\pi/3$. Não obstante, se considerarmos a região não qual podemos aplicar (2.27) em (C.5), vemos que estes zeros estão numa região onde (D.10) não corresponde a uma aproximação válida da função de Bargmann (C.5).

Referências

- [1] M.V.Berry; *Phil.Trans.Roy.Soc.***287** (1977) 237.
- [2] A.M.Ozorio de Almeida and J.H.Hannay; *Ann.Phys.* **138** (1982) 115-154.
- [3] A.M.Ozorio de Almeida; *Ann.Phys.* **145** (1983) 100-114.
- [4] M.V.Berry e N.L.Balazs; *J.Phys.A:Math.Gen.*, **12**, No.5 (1979)
- [5] N.L.Balazs; *Physica* **102A** (1980) 236-254.
- [6] N.L.Balazs e B.K.Jennings; *Physics Report* **104**, No.6 (1984) 347-391.
- [7] M.Hillery,R.F.O'Connell,M.O.Scully and E.P.Wigner; *Physics Reports* **106**No.3 (1984) 121-167.
- [8] E.P. Wigner; *Phys. Rev.* **40** (1932) 749.
- [9] A.I.Shnirelman; *Usp. Mat. Nauk* **29** (1974) 181-182.
- [10] A.Voros; *Ann.Inst.H.Poincare* **A24** (1976) 31-90.
- [11] A.Voros; *Thèse d'État*, Université Paris-Sud, Orsay, France, (1977).
- [12] A.M.Ozorio de Almeida; *Physics Reports* **295** (1998) 265-342.
- [13] A.M.Ozorio de Almeida; *Proc. R. Soc. Lond. A* (1990) **431**, 403-417.
- [14] A.M.Ozorio de Almeida; *Proc. R. Soc. Lond. A* (1992) **439**, 139-153.
- [15] R. G. Littlejohn; *Physics Reports* **138**, Nos. 4 e 5, (1986), 193-291.

- [16] A.M.Ozorio de Almeida; *Hamiltonian Systems: Chaos and Quantization*, Cambridge University Press, Cambridge, 1988.
- A.M.Ozorio de Almeida; *Sistemas Hamiltonianos, Caos e Quantização*, Editora da Unicamp, 3ª Edição, 1995.
- [17] A.Voros; *Phy.Rev.A*, **40,12** (1989) 6814-6825.
- [18] V.Bargmann; *Commun.Pure Appl.Math.* **XIV** (1961) 187.
- [19] A.Perelomov; *Generalized Coherent States and their applications*, Springer, New York, (1986).
- [20] J.R.Klauder e B.Skagerstam; *Coherent States, Applications in Physics and Mathematical Physics*, World Scientific, Singapore, (1985).
- [21] K.Husimi; *Proc.Phys.Math.Soc.Japan* **22** (1940) 264.
- [22] K.Takahashi; *J.Physical Soc.Japan* **55**, No.6 (1986) 762-779.
- [23] J.Kurchan, P Leboeuf and M.Saraceno; *Phy.Rev.A*, **40,12** (1989) 6800-6813.
- [24] P.Leboeuf e A.Voros; *J.Phys.A: Math. Gen.***23** (1990) 1765-1774.
- P.Leboeuf e A.Voros; *Quantum nodal as fingerprints of classical chaos*, Quantum chaos: between order and disorder: a paper selection compiled and introduced by Gulio Casati, Boris Chirikov. Cambridge University Press, 1995.
- [25] M. Toda; *Physica D* **59** (1992) 121-141.
- [26] S. Nonnenmacher e A. Voros; *Eigenstate structure around a hyperbolic point*; (1998)
- [27] F. Toscano e A. M. Ozorio de Almeida: *J. Phys. A: Math. Gen.* **32** (1999) 6321-6346.
- [28] V.I.Arnold; *Mathematical Methods of Classical Mechanics*, Springer Verlag, New York, 1978.
- [29] V.I.Arnold; *Funct.Anal.Appl.* **1**, 1967.

- [30] A. Einstein; Verh.Dtsch.Phys.Ges. (1971) **19**, 82.
L. Brillouin; J.Phys. Radium, (1926) **7**, 353-368
J.B.Keller; Ann.Phys.(NY) (1958) **4**, 180.
- [31] V.P. Maslov e M.V. Fedoriuk; *Semiclassical Approximation in Quantum Mechanics*,
Reidel, Dordrecht, 1981.
- [32] M.V.Berry e M. Tabor; Proc. R. Soc. Lond. A. **349**, 101-123 (1976).
M.V.Berry e M. Tabor; J. Phys. A:Math. Gen.; Vol. 10, **3**, (1977)
- [33] E. J. Heller; Phys. Rev. Lett. , **53**, 1515-1518, (1984).
- [34] L. Kaplan, E. J. Heller; Ann. of Phys., **264**, 171-206 , (1998).
L. Kaplan, E. J. Heller; *Measuring scars of periodic orbits.*, chao-dyn/9812011, 3 de
Decembro de 1998.
- [35] L. Kaplan; Phys. Rev. Lett., **80**, 2582-2585, (1998).
L. Kaplan; Nonlinearity **12**, R1-R40 , (1999).
- [36] S. Sridhar, Phys. Rev. Lett. **67**, 785 (1991);
J. Stein e H. J. Stöckman, Phys. Rev. Lett. **68**, 2867 (1992).
- [37] T. M. Fromhold, P. B. Wilkinson, F. W. Sheard, L. Eaves, J. Miao e G. Edwards,
Phys. Rev. Lett. **68**, 1142 (1995).
P. B. Wilkinson, T. M. Fromhold, L. Eaves, F. W. Sheard, N. Miura e T. Takamasu,
Nature (London) **380**, 608(1996).
- [38] D. Wintgen e A. Honig, Phys. Rev. Lett. **63**, 1467 (1989).
K. Muller e D. Wintgen, J. Phys. B **27**, 2693 (1994).
- [39] O. Bohigas, M. J. Giannoni e C. Schmit; J. Physique Lett., **45**, L-1015 (1984).
- [40] M. V. Berry; J. Phys. A **10**, 2083-2091, (1977).

- [41] A. Voros; In *Stochastic behavior in classical and quantum Hamiltonian systems*, (ed. G. Casati & J. Ford), 326-333. Lectures notes in Physics 93. Berlin: Springer. (1979).
- [42] A. I. Schnirelman; *Usp. Mat. Nauk*, **29** (6), 181-182, (1974).
- [43] Y. Colin de Verdiere; *Commun. Math. Phys.*, **102** 497, (1985).
S. Zelditch; *Duke Math. J.*, **55**, 919, (1987).
- [44] Artigo de Gutzwiller do Les Houches.
- [45] M. C. Gutzwiller; *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*, Springer Verlag, (1990).
- [46] M. V. Berry; *Proc. R. Soc. Lond. A* , **423**, 219-231, (1989).
M. V. Berry; *Some quantum-to-classical asymptotics*, Les Houches, Session LII, (1989).
- [47] E. B. Bogomolny; *Physica D*, **31**, 169-189, (1988).
- [48] M. Baranger e K. T. R. Davies; *Ann. of Phys.* , **177**, 330-358, (1987)
- [49] D. Provost e M. Baranger; *Phys. Rev. Lett.* , **71**, 662-665, (1993).
- [50] S.C. Creagh, J.M. Robbins e R G. Littlejohn; *Phys. Rev. A*, **42**, 1907-1922, (1990).
J.M. Robbins; *Nonlinearity*, **4**, 343, (1991).
A. Sugita; *chao-dyn/9909040* 30 Sep 1999.
- [51] M.Abramowitz e I.A.Stegun; *Handbook of Mathematical Functions*, Whashington: US National Bureau of Standards, 1964.
- [52] I.S.Gradshteyn, I.M.Ryzhik; *Table of integrals , Series, and Products*, Fifth Edition, Academic Press, 1994.
A.Erdélyi (Bateman Manuscript Project); *Higher Transcendental Functions*, Vol II, McGraw-Hill, 1953.

- [53] E.C.Titchmarsh; *The Theory of Functions*, Oxford University Press, Second Edition, (1997).
- [54] C.Cohen Tannoudji, B. Diu, F.Laëoe; *Quantum mechanics*, Wiley, New York, 1977.

“ASPECTOS GEOMÉTRICOS DA FUNÇÃO DE WIGNER”

FABRÍCIO TOSCANO

Tese apresentada no Centro Brasileiro de
Pesquisas Física, fazendo parte da Banca
examinadora os seguintes Professores:

Alfredo Miguel Ozorio de Almeida/CBPF

Caio Henrique Lewenkopf/UERJ

Walter Felipe Wrezniski/USP

José Abdalla Helayel Neto/CBPF

Nelson Pinto Neto/CBPF

Rio de Janeiro, 21 de Janeiro de 2000