

Ministério da Ciência e Tecnologia  
Centro Brasileiro de Pesquisa Físicas

Tese de Doutorado

**Algebras de Heisenberg Generalizadas:  
formalismo e possíveis aplicações**

Autor: Jeferson de Souza

Orientador: Evaldo M. F. Curado

Co-orientador: Marco Aurélio Rego Monteiro

# Conteúdo

<b>I</b>	<b>Álgebra de Heisenberg Generalizada</b>	<b>1</b>
<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>2</b>
1.1	Métodos algébricos em física . . . . .	2
1.2	Álgebra de Lie, Álgebra de Heisenberg e álgebra de $su(2)$ . . .	5
1.2.1	Álgebra de Lie . . . . .	5
1.2.2	Álgebra de $su(2)$ . . . . .	6
1.3	O oscilador harmônico . . . . .	7
1.3.1	O oscilador de Schwinger . . . . .	9
1.4	Álgebra de $q$ -osciladores . . . . .	10
1.4.1	Outros exemplos de $q$ -osciladores . . . . .	14
1.5	Álgebra de Heisenberg Generalizada . . . . .	18
1.5.1	Caso Linear . . . . .	22
1.5.2	Caso não-Linear . . . . .	23
1.5.3	Objetivos deste trabalho . . . . .	26
<b>2</b>	<b>Aplicação à Molécula Diatômica</b>	<b>29</b>
2.1	O espectro Molecular Vibracional . . . . .	30
2.2	A aproximação Born-Oppenheimer e o Potencial Harmônico .	34
2.3	Potenciais tipo Morse . . . . .	36

2.3.1	Potencial de Morse . . . . .	36
2.3.2	Método de Morse Perturbado . . . . .	37
2.4	AHG e Espectro Molecular Vibracional . . . . .	38
2.4.1	Caso Linear ( $q$ -oscilador) . . . . .	38
2.4.2	Aplicação à molécula de CO . . . . .	39
2.4.3	Caso não-linear . . . . .	41
<b>3</b>	<b>Álgebra de Heisenberg Estendida</b>	<b>54</b>
3.1	O porquê de uma álgebra de dois passos . . . . .	54
3.2	Álgebra de Heisenberg estendida à dois-passos . . . . .	56
3.2.1	Teoria da Representação . . . . .	57
3.3	O Caso Linear - Álgebra de Fibonacci Generalizada . . . . .	59
3.3.1	Análise de Estabilidade e Teoria da Representação . . . . .	60
3.3.2	Séries de Fibonacci . . . . .	63
3.4	Espaço de Fock da Álgebra de Heisenberg a Dois Passos . . . . .	64
3.4.1	Análise dos valores permitidos de $\alpha_0$ e $\beta_0$ . . . . .	67
3.5	Comentários Finais . . . . .	69
<b>II</b>	<b>Análise Multifractal de Séries Temporais de Mercado Financeiro</b>	<b>76</b>
<b>4</b>	<b>MF-DFA e as Observáveis Financeiras</b>	<b>77</b>
4.1	Introdução . . . . .	77
4.2	Análise Multifractal de Flutuações com Eliminação de Tendência - <b>MF-DFA</b> . . . . .	78
4.3	Origem da multifractalidade em séries temporais. . . . .	84

<i>CONTEÚDO</i>	iii
4.4 Volumes Negociados . . . . .	86
4.5 Retornos . . . . .	92
4.6 Comentário Finais . . . . .	93
<b>III Conclusões</b>	<b>106</b>
<b>A Simetrias dinâmicas</b>	<b>112</b>
<b>B Álgebra de Heisenberg</b>	<b>116</b>
<b>C Seqüências de Fibonacci</b>	<b>119</b>
<b>D Estabilidade Segundo Lyapunov</b>	<b>121</b>
<b>E A análise de Hurst</b>	<b>124</b>
<b>F O formalismo Multifractal.</b>	<b>126</b>
<b>G O <math>q</math>-tripleto</b>	<b>128</b>
<b>H Código MATLAB/OCTAVE</b>	<b>132</b>
<b>Bibliografia</b>	<b>145</b>

# Lista de Figuras

1.1	Análise gráfica para a função característica linear. . . . .	28
2.1	Níveis de energia para os potenciais de Morse e harmônico. . .	45
2.2	Ajuste do parâmetro $q$ no caso caso linear. . . . .	46
2.3	Ajuste do parâmetro $q$ para o caso não-linear. . . . .	47
2.4	Ajuste do parâmetro $p$ para o caso não-linear. . . . .	48
2.5	Espectros de energia normalizados e deslocados, gerados pelos modelos de Morse, $q$ -oscilador, AHG não-linear, Morse Perturbado e dados experimentais, para a molécula de CO. . . . .	49
2.6	Comparação entre os erros relativos dos modelos de Morse, $q$ -oscilador, AHG não-linear e o modelo de Morse perturbado. . . . .	50
3.1	Regiões de estabilidade no espaço dos parâmetros $(r, s)$ . . . . .	72
3.2	Regiões no plano $(\lambda_-, \lambda_+)$ associadas às possíveis representações para a AHG linear. . . . .	73
3.3	Cadeia de Fibonacci. . . . .	74
3.4	Cadeia do tipo Fibonacci. . . . .	74
3.5	Níveis de energia obtidos para vários parâmetros da AHG. . .	75

4.1	Espectro multifractal dos volumes negociados para o DJ30 calculado com o método MF-DFA5. . . . .	95
4.2	Espectro multifractal médio $f(\alpha)$ vs. $\alpha$ , com a média feita sobre os $f$ 's e os $alpha$ 's para cada $q$ , para cada uma das as 30 companhias do DJ-30. . . . .	97
4.3	Função densidade de probabilidade para a série de volume observada (volume médio das 30 Companhias do DJ30). . . .	98
4.4	Função densidade de probabilidade para a série de volume observada aleatorizada e ajustada. . . . .	99
4.5	Expoentes $\tau(q)$ vs. $q$ , com a média feita sobre as 30 companhias do DJ30, para cada $q$ , para as séries de volume negociado.	100
4.6	Função densidade de probabilidade para a série de retorno observada (retorno médio das 30 Companhias do DJ30). . . .	101
4.7	Função densidade de probabilidade para a série de retorno observada aleatorizada. . . . .	102
4.8	Espectro multifractal dos retornos para a 30 companhias do DJ30, calculado com o método MF-DFA5. . . . .	103
4.9	Espectro multifractal médio $f(\alpha)$ , com a média feita sobre as 30 companhias para cada $q$ . . . . .	104
4.10	Expoentes $\tau(q)$ vs. $q$ , com a média feita sobre as 30 companhias do DJ-30, para cada $q$ , para as séries de retornos. . . . .	105

# Lista de Tabelas

2.1	Valores dos parâmetros usados em cada modelo estudado neste trabalho. . . . .	51
2.2	Espectro vibracional da molécula de CO. Comparação dos dados experimentais com os modelos de Morse, $q$ -oscilador, Morse perturbados e AHG. . . . .	52
2.3	Valores das energias de dissociação calculadas para cada modelo.	53
3.1	Autovalores dos operadores $H$ e $J_3$ quando $r = s = 1$ . . . . .	71
4.1	Legenda das companhias que compõem o DJ30. . . . .	96

## Agradecimentos

Agradecer a todos, que de uma forma ou de outra contribuíram para a realização deste trabalho seria muito difícil, senão impossível. No entanto, acredito que há pessoas e instituições que pela sua contribuição e participação não podem ficar de fora desses sinceros agradecimentos.

Primeiramente agradeço aos pesquisadores Evaldo Mendonça Fleury Curado e Marco Aurélio Rego Monteiro pela orientação deste trabalho.

Ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (CBPF) por me dar esta oportunidade.

À banca examinadora composta pelos professores Evaldo M. F. Curado, Marco Aurélio do Rego Monteiro, Marcelo L. Lyra, Itzhak Roditi, Constantino Tsallis, Ricardo L. Viana e José A. Helayel Neto, por terem contribuído para o enriquecimento do presente trabalho.

Ao corpo docente do CBPF por contribuírem para minha formação acadêmica.

Agradeço também aos que participaram diretamente deste trabalho: Silvío M. de Queirós, Luis G. Moyano, Nemésio Mattos, Prof. Constantino Tsallis e Cesar Ribeiro.

Contribuíram para este trabalho, também, os colegas Francisco Tamarit, Ney Lemke, Fernando Nobre e Célia Anteneodo, além do pessoal da CAT-CBPF, e dos funcionários Luzia, Wanda, Almério, Myriam, Regininha e Beth, e a equipe do Sujinho.

Outras pessoas dentro e fora do âmbito acadêmico merecem ser mencionadas neste agradecimento.

A minha Família.

Os colegas da UFPR: Sidney Pires Rostirolla, Fernando Mancini e Rafael

Correa de Freitas.

Aos casal de amigos Cláudia e Márcio, e as amigas Jocelene (Jô) e Marecea (Tetéia).

Os amigos Fulvio Baldovin e Marisa Zamberlan.

Os colegas Fernando Gaúcho e Ari (da UFPR), e Nuno, Diogo e Garin (do CBPF).

Além do CBPF as seguintes instituições também deram contribuições fundamentais para a realização e enriquecimento deste trabalho: CNPq, FCT - Portugal, Sociedade Brasileira de Física, PETROBRAS, UFPR e FUNPAR/UFPR, Abdus Salam International Centre for Theoretical Physics (ICTP) e UNIRIO.

## Resumo

Na primeira parte desta tese é proposto um método novo, baseado em uma Álgebra de Heisenberg Generalizada (AHG) não-linear proposta recentemente na literatura, a qual é capaz de reproduzir o espectro anarmônico de algumas moléculas diatômicas. O espectro teórico gerado pela AHG não-linear permitiu o ajuste dos dados experimentais e a obtenção da energia de dissociação para a molécula do monóxido de carbono. Os resultados globais são melhores do que aqueles obtidos através dos modelos usualmente utilizados para estudar vibrações moleculares, a saber, os modelos tipo-Morse e de  $q$ -osciladores. Também foi construída uma estrutura algébrica tipo Heisenberg, gerada pelo operador Hamiltoniano, pelos operadores ladeira e por um operador auxiliar. Esta estrutura descreve os sistemas quânticos cujos autovalores do operador Hamiltoniano dependem de dois autovalores precedentes, como acontece, por exemplo, em sistemas com o espectro de energia dado por uma seqüência de Fibonacci. Além disso, esta estrutura algébrica depende de duas funções  $f(x)$  e  $g(x)$ , o que difere da AHG anteriormente proposta, a qual depende de um autovalor precedente e de uma função característica. As possíveis representações para a álgebra formada quando as funções  $f(x)$  e  $g(x)$  são lineares foram classificadas, analisando-se a estabilidade dos pontos fixos das funções. Na segunda parte desta tese são exploradas as propriedades multifractais das séries temporais de 1 minuto dos retornos (lucro) e dos volumes de ações negociados das companhias que compõem o chamado Dow Jones 30 (DJ30), através do método “análise de flutuação de tendência multifractal” (MF-DFA). Através de um procedimento que consiste no cálculo do espectro multifractal das séries nas quais foram extraídas

as fases das séries temporais originais e foram adicionadas fases aleatórias e outro que consiste no cálculo do espectro multifractal das séries onde os elementos foram aleatoriamente trocados de posição, já descritos na literatura anteriormente, foi avaliado o papel das dependências lineares e não-lineares na estrutura multifractal das observáveis. Os resultados mostram um caráter persistente do volume negociado e aproximadamente “Browniano” dos retornos. Para os volumes é mostrado que tanto as correlações de longo alcance como função distribuição influenciam no caráter multifractal das série. Para os retornos, foi confirmado que o caráter não Gaussiano da função densidade de probabilidade das séries é a principal responsável pela multifractalidade.

## Abstract

In the first part of this thesis it is proposed a new method, based on a non-linear Generalized Heisenberg Algebra (GHA) recently proposed in the literature, which is able to reproduce the anharmonic vibrational spectrum of diatomic molecules. The theoretical spectrum generated by the non-linear GHA allows us to fit the experimental data and to obtain the dissociation energy for the carbon monoxide molecule. The global results are more accurate than the standard models used to study molecular vibrations, namely Morse-like and q-oscillator models. Also, it was constructed a Heisenberg-like algebra generated by the Hamiltonian operator, ladder operators and an auxiliary operator. This algebra describes quantum systems having eigenvalues of the Hamiltonian operator depending on the eigenvalues of the two previous levels. This happens, for example, for systems having the energy spectrum given by a Fibonacci sequence. Moreover, the algebraic structure depends on the two functions  $f(x)$  and  $g(x)$ . When these two functions are linear we classify, analysing the stability of the fixed points of the functions, the possible representations for this algebra. In the second part of this thesis it was explored the multifractal properties of 1 minute traded volume and returns of the equities which compose the Dow Jones 30, through Multifractal Detrend Analysis (MF-DFA) method. By using a procedure, previously describe in the literature, which is based in the extraction of the original phases and subsequent addition of random phases to the original time series and another one that consists in the mixture of the elements of the time series, it was evaluated the role of the linear and nonlinear dependences in the multifractal structure of this observables. The results show a persistent character

of the traded volume e a “Brownian” character of the returns. For the volumes is shown that the long-range correlations as much as the non-Gaussian Probabilities Distribution Functions control the multifractal character of the time series. For the returns, it was shown that a non-Gaussian Probabilities Distribution Functions is the main cause of the multifractality in the time series.

Parte I

Algebra de Heisenberg

Generalizada

# Capítulo 1

## Introdução

### 1.1 Métodos algébricos em física

Os métodos algébricos têm sido largamente utilizados em física desde o início do século XX [1]. Este tipo de abordagem encontra aplicações nos mais variados campos da física como a física nuclear, teoria de campos, a física molecular, a mecânica estatística, etc. Em Mecânica Quântica (MQ) os métodos algébricos ganharam destaque a partir da introdução da formulação matricial de Heisenberg [2], isto porque em MQ os operadores de posição e momentum (ou outros operadores relacionados) obedecem a relação de comutação  $[x, p_x] = i\hbar$ . Este tipo de abordagem teve uma papel fundamental na formulação da chamada “segunda quantização”, a qual teve posteriormente um papel fundamental na formulação relativística da MQ. Essas relações foram introduzidas por W. Heisenberg em 1925 [3], quem argumentou que o espectro atômico poderia ser melhor compreendido se associamos a este certos arranjos de números (matrizes) que obedecem certas regras de multiplicação. Posteriormente, P. Jordan e M. Born [4] apontaram que a regra de multiplicação

desenvolvida por Heisenberg era essencialmente a mesma da álgebra de matrizes [5]. Assim, a chamada “Mecânica Matricial ” foi desenvolvida com base na representação matricial das relações de comutação canônicas. Do ponto de vista matemático, a Mecânica Matricial consiste representar as quantidades físicas relevantes por matrizes. As leis que regem o sistema são dadas pela regra de multiplicação, no caso as relações de comutação canônicas. Desta forma, estas matrizes, quando manipuladas apropriadamente, fornecem as frequências (as quais são as quantidades físicas relevantes) e as intensidades observadas das linhas espectrais de sistemas quânticos como átomos e moléculas, sem a necessidade de discutir as trajetórias dos elétrons.

As relações de comutação estão associadas às simetrias do sistema físico em questão e estas, por sua vez, estão relacionadas às leis de conservação. Em MQ as simetrias determinam as regras de seleção para as transições de estados quânticos [2] e definem as quantidades físicas conservadas (energia, momentum, etc.). As simetrias têm um papel fundamental em física, pois a complexidade de muitos sistemas clássicos ou quânticos pode ser, em geral, simplificada se for possível utilizar as simetrias existentes. A estrutura matemática que expressa as simetrias de um sistema físico é a teoria de grupos. A teoria de grupos é importante para a física não só pelo seu poder de cálculo mas também por fornecer novas intuições para problemas físicos.

Mais recentemente o estudo de sistemas físicos baseados nos métodos algébricos ganhou um novo impulso com o aparecimento dos chamados  $q$ -osciladores associados as chamadas “álgebras deformadas”, as quais, em geral, são versões deformadas das álgebras de Lie usuais. As álgebras deformadas modificam, através da introdução de um ou mais parâmetros, as

relações de comutação usuais, sendo a álgebra de Lie usual recuperada quando os parâmetros tendem para um limite específico. Do ponto de vista matemático as álgebras deformadas são álgebras de Hopf quase-triangulares [6]. As álgebras deformadas tornaram-se bastante conhecidas através do uso dos  $q$ -osciladores, os quais podem ser considerados como uma deformação da álgebra de Heisenberg [7].

Estas álgebras têm sido utilizadas em problemas físicos dos mais variados (veja as referências [8, 6, 7]). Ainda mais recentemente, Curado e Rego-Monteiro [9] propuseram uma “Álgebra de Heisenberg Generalizada (AHG)”, a qual contém a álgebra de  $q$ -osciladores padrão (um tipo de álgebra de Heisenberg deformada) como caso particular, e depende de uma função, ao invés de um único parâmetro.

Isto permite a AHG poder representar diversos sistemas físicos simples unidimensionais, como veremos a seguir, dependendo da escolha adequada da função  $f$ .

Um aspecto interessante da AHG é que um autovalor de um dos operadores da álgebra pode ser escrito em função do seu antecessor, analogamente aos mapas com variáveis discretas. Isto possibilita utilizar ferramentas de sistemas dinâmicos no estudo das representações desta álgebra para um dado sistema físico associado a uma função  $f$ , simplificando o estudo destas representações.

## 1.2 Álgebra de Lie, Álgebra de Heisenberg e álgebra de $su(2)$ .

Será feito aqui uma breve descrição da álgebra de Lie e da álgebra de  $su(2)$ . Na próxima seção será discutida a álgebra de Heisenberg. As definições foram baseadas, principalmente, nas referências [2] e [10].

### 1.2.1 Álgebra de Lie

Para os objetivos deste trabalho, é suficiente considerar álgebras de Lie associadas aos grupos de Lie matriciais, ou seja, álgebras onde os elementos são matrizes. Álgebras de Lie, as quais em geral não são comutativas nem associativas, são espaços vetoriais  $g$ , definidos sobre um corpo  $F$ , dotados de uma operação binária  $[\cdot, \cdot] : g \times g \rightarrow g$ , e que satisfazem as propriedades:

1. Bilinearidade:

$$[ax + by, z] = a[x, z] + b[y, z], \quad [z, ax + by] = a[z, x] + b[z, y], \quad (1.1)$$

$$\forall a, b \in F \text{ e } \forall x, y, z \in g.$$

2. Para todo  $x \in g$ :  $[x, x] = 0$

3. Identidade de Jacobi:

$$[x, [y, z]] + [y, [z, x]] + [z, [x, y]] = 0 \quad (1.2)$$

$$\forall x, y, z \in g.$$

A primeira e a segunda propriedades combinadas implicam na antisimetria do produto de Lie:

$$[x, y] = -[y, x] \quad (1.3)$$

$\forall x, y \in g$ .

Exemplos de álgebra de Lie são: o espaço euclidiano  $\mathbb{R}^3$  com o produto vetorial, as álgebras de  $su(2)$  (*spin*),  $SO(3)$  (momento angular) e de Heisenberg (oscilador harmônico).

### 1.2.2 Álgebra de $su(2)$

A álgebra de Lie do grupo especial unitário de grau dois ou  $SU(2)$  corresponde as matrizes unitárias  $2 \times 2$ , com determinante igual a um, anti-hermitianas e de traço nulo.

O principal exemplo em física são as *matrizes de Pauli* definadas com:

$$\sigma_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}; \sigma_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}; \sigma_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad (1.4)$$

com relações de comutação dadas por:

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i \varepsilon_{ijk} \sigma_k, \quad (1.5)$$

onde  $\varepsilon_{ijk}$  é o tensor de Levi-Civita, o qual é dado por

$$\varepsilon_{ijk} = \begin{cases} +1 & \text{se } (i, j, k) \text{ for igual a } (1, 2, 3), (2, 3, 1) \text{ ou } (3, 1, 2), \\ -1 & \text{se } (i, j, k) \text{ for igual a } (3, 2, 1), (1, 3, 2) \text{ ou } (2, 1, 3), \\ 0 & \text{se: } i = j, j = k \text{ ou } k = i. \end{cases}$$

As matrizes de Pauli são de fundamental importância em física e em particular estas estão associadas ao operador de *spin*  $1/2$ .

### 1.3 O oscilador harmônico

Na formulação de Heisenberg da Mecânica Quântica, ao invés de se resolver a equação de Schroedinger (ES),  $H\Psi(x) = E\Psi(x)$ , com o hamiltoniano dado por:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x), \quad (1.6)$$

se resolve equações matriciais onde os operadores diferenciais são representados por operadores matriciais e as funções de onda são representadas por vetores no espaço de Hilbert. Assim, os operadores de posição e momento são representados  $\hat{x}$  e  $\hat{p}$  ( $\hat{p} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ ), onde o símbolo “ $\hat{\phantom{x}}$ ” indica que a variável representa um operador ao invés de uma variável dinâmica. Estes operadores obedecem “relações de comutação canônicas” (ou de Heisenberg):

$$[\hat{p}_i, \hat{q}_j] = -i\hbar \delta_{i,j} \quad (1.7)$$

$$[\hat{p}_i, \hat{p}_j] = [\hat{q}_i, \hat{q}_j] = 0, \quad (1.8)$$

onde  $\delta_{i,j}$  é a função delta de Kronecker. As relações acima constituem uma álgebra de Heisenberg, a qual é um caso particular de álgebra de Lie.

O oscilador harmônico é um dos modelos os mais importantes em mecânica quântica porque uma grande variedade de sistemas pode ser modelado exata ou aproximadamente utilizando-o [5]. Este é, por exemplo, o caso de vibrações em moléculas diatômicas. Vamos considerar, por simplicidade, o caso do oscilador harmônico unidimensional, onde potencial é dado, em termos do operador  $\hat{x}$ , por:

$$V(\hat{x}) = \frac{k\hat{x}^2}{2}. \quad (1.9)$$

Podemos escrever os operadores de posição e de momento em termos dos

chamados operadores de criação e aniquilação:

$$\hat{x} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega m}} (a + a^\dagger) \quad (1.10)$$

$$\hat{p} = i\sqrt{\frac{\hbar\omega m}{2}} (a^\dagger - a) \quad (1.11)$$

onde  $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ . Substituindo as equações anteriores no hamiltoniano (1.6),  $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$ , teremos

$$\hat{H} = \hbar\omega(a^\dagger a + 1/2). \quad (1.12)$$

O operador de criação atua sobre o estado de vácuo dando origem a novos estados quânticos:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle. \quad (1.13)$$

O operador de aniquilação atuando sobre o estado de vácuo define o estado fundamental:

$$a|0\rangle = 0. \quad (1.14)$$

O operador  $a^\dagger a$  (ou operador número  $N$ ) atuando sobre um vetor  $|n\rangle$  fornece o autovalor (o qual está relacionado à energia) correspondente a este vetor. Os operadores  $a, a^\dagger$  e  $a^\dagger a$  formam uma álgebra de Heisenberg-Weyl  $H(2)$  [1] com as seguintes operações de comutação:

$$[a, a^\dagger] = 1; \quad (1.15)$$

$$[a, a^\dagger a] = a; \quad (1.16)$$

$$[a^\dagger, a^\dagger a] = -a^\dagger \quad (1.17)$$

A álgebra formada por estes novos operadores também é uma álgebra de Heisenberg [1]. O operador de criação atuando sobre um auto-estado de  $\hat{H}$ ,

dá origem a um novo estado com energia maior por uma unidade:

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle. \quad (1.18)$$

O espectro de energia do Hamiltoniano é dado por:

$$E(n) = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (1.19)$$

e o estado de energia mais baixo ( $E(0) = \frac{1}{2}\hbar\omega$ ) define a representação para a álgebra. Os valores do espectro de energia dado pela equação (1.19) são igualmente espaçados

### 1.3.1 O oscilador de Schwinger

Nesta seção será revisto brevemente a construção de Schwinger, considerando-se dois osciladores harmônicos simples [5], com os operadores de criação e de aniquilação dados por  $a_i^\dagger$  e  $a_i$ , com  $i = 1, 2$ . Os operadores número são dados por:

$$N_i = a_i^\dagger a_i, \quad (1.20)$$

e considerando que  $[a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}$  teremos:

$$[N_i, a_j] = -a_i \delta_{ij} \quad (1.21)$$

e

$$[N_i, a_j^\dagger] = a_i^\dagger \delta_{ij}. \quad (1.22)$$

É assumido que os osciladores são desacoplados, assim  $N_1$  e  $N_2$  comutam e pode-se construir auto-estados simultâneos de  $N_1$  e  $N_2$  com auto-valores  $n_1$  e  $n_2$ , respectivamente. Agora, são definidos os novos operadores  $J_+$ ,  $J_-$  e  $J_z$ :

$$J_+ \equiv a_1^\dagger a_2, \quad (1.23)$$

$$J_- \equiv a_2^\dagger a_1 \quad \text{e} \quad (1.24)$$

$$J_z \equiv \frac{1}{2}(a_1^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_2) = \frac{1}{2}(N_1 - N_2). \quad (1.25)$$

Pode-se mostrar que estes operadores satisfazem as relações de comutação da álgebra  $su(2)$ :

$$[J_z, J_\pm] = \pm J_\pm, \quad (1.26)$$

$$[J_+, J_-] = 2J_z. \quad (1.27)$$

Definindo o operador número total, com autovalores  $n_1 + n_2$ :

$$N \equiv N_1 + N_2 = a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2, \quad (1.28)$$

um operador Casimir da álgebra pode ser escrito como

$$\mathbf{J}^2 = J_z^2 + \frac{1}{2}(J_+ J_- + J_- J_+) = \frac{N}{2} \left( \frac{N}{2} + 1 \right). \quad (1.29)$$

Os autovalores  $n_1$  e  $n_2$  podem ser interpretados como o números de partículas com *spin* para cima e para baixo, respectivamente.

## 1.4 Álgebra de $q$ -osciladores

As Álgebras de Heisenberg Deformadas (as quais englobam a álgebra de  $q$ -osciladores) são generalizações não-triviais das álgebras de Heisenberg. Devido a sua interessante estrutura matemática e as possíveis aplicações físicas, as álgebras deformadas despertaram muita atenção nos últimos vinte anos. Em 1982 Kulish [11] mostrou que a álgebra subjacente ao modelo de *spin*  $XXZ$ , com condições de contorno específicas, era uma deformação da álgebra de  $su(2)$ , a qual é chamada hoje  $su_q(2)$ . Posteriormente, aplicando a mesma técnica usada por Schwinger para compor dois osciladores para obter a álgebra

de  $su(2)$ , MacFarlane e Biedenharn [12, 13] construíram, em 1989, a álgebra de  $su_q(2)$  usando dois  $q$ -osciladores. Uma vez que a álgebra de Heisenberg tem um papel importante em diversas áreas da física, houveram (e tem havido) muitas tentativas de se encontrar aplicações também para os  $q$ -osciladores. Muitas possíveis aplicações físicas já foram descritas na literatura [8, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21]. Estas álgebras foram usadas, por exemplo, para se estudar fenomenologicamente partículas compostas [8, 22, 23, 24, 25], espectro dos átomos e moléculas [26, 17, 18, 22, 23, 27, 28], teoria de campos [24, 25, 29, 30] e estados coerentes [31]. Como já foi mencionado, a álgebra de  $q$ -osciladores modifica a álgebra de Heisenberg usual dada pelas equações (1.15)-(1.17), através do parâmetro  $q$ . A deformação modifica as relações de comutação usuais e estas podem ser expressas do seguinte modo (dentro outras maneiras):

$$[N, a^\dagger] = a^\dagger; \quad (1.30)$$

$$[N, a] = -a; \quad (1.31)$$

$$[a, a^\dagger]_q \equiv aa^\dagger - q a^\dagger a = q^{\mp N}, \quad (1.32)$$

onde o chamado  $q$ -comutador é definido por:

$$[x, y]_q \equiv xy - q yx,$$

e o parâmetro  $q$  poderá assumir valores reais ou imaginários, sendo que para diferentes valores de  $q$ , o conjunto de autovalores do operador Hamiltoniano gerado pela álgebra terá comportamentos diferentes [32]. Se  $q = 1$  a álgebra deformada se reduz a álgebra de Heisenberg usual. Existem outras álgebras de  $q$ -osciladores, a forma apresentada aqui é baseada em MacFarlane (1989) [13], na próxima seção descreveremos brevemente algumas destas. Vamos

agora analisar os estados gerados por esta álgebra, seguindo o mesmo roteiro como no caso da álgebra de Heisenberg usual. O estado de vácuo é definido da mesma forma que no caso não-deformado:

$$a|0\rangle = 0, \quad (1.33)$$

$$\langle 0|a^\dagger = 0, \quad (1.34)$$

$$N|0\rangle = \alpha_0|0\rangle, \quad (1.35)$$

Como consequência da equação (1.32) têm-se:

$$[N]_q = a^\dagger a; \quad (1.36)$$

$$[N + 1]_q = a a^\dagger, \quad (1.37)$$

onde

$$[x]_q = \frac{q^x - q^{-x}}{q - q^{-1}}. \quad (1.38)$$

Com esta definição podemos estudar a teoria da representação desta álgebra. O operador  $a^\dagger$  atuando sobre o estado de vácuo  $|0\rangle$  produz outro estado, digamos  $|k\rangle$ :

$$a^\dagger|0\rangle = |k\rangle, \quad (1.39)$$

com o seu dual dado por  $\langle k| = \langle 0|a$ . Fazendo o produto interno entre o vetor dado pela equação (1.39) e o vetor do vácuo,  $|0\rangle$ , tem-se:

$$\langle k|0\rangle = \langle 0|a|0\rangle = 0. \quad (1.40)$$

Assim o novo vetor  $|k\rangle$  é ortogonal ao estado de vácuo  $|0\rangle$ . Chamando  $|k\rangle$  de  $M_0|1\rangle$ , onde  $\langle 1|1\rangle = 1$ , teremos:

$$a^\dagger|0\rangle = M_0|1\rangle, \quad (1.41)$$

onde  $M_0$  é uma constante de normalização. Aplicando  $N$  e  $a^\dagger$  sobre um auto-estado geral e utilizando (1.30), obtemos

$$N(a^\dagger|n\rangle) = a^\dagger(N+1)|n\rangle = (n+1)a^\dagger|n\rangle, \quad (1.42)$$

o que mostra que  $a^\dagger|n\rangle$  também é um auto-estado do operador  $N$ , porém com um autovalor acrescido de uma unidade. Assim teremos

$$a^\dagger|n\rangle = M_n|n+1\rangle,$$

onde a constante de normalização é calculada, utilizando-se a equação (1.37), por:

$$1 = \langle n+1|n+1\rangle = \frac{1}{M_n^2} \langle n|aa^\dagger|n\rangle = \frac{1}{M_n^2} [n+1]_q. \quad (1.43)$$

Assim, de maneira geral:

$$a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle, \quad (1.44)$$

$$a|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle. \quad (1.45)$$

Diferentemente do caso não-deformado, o operador  $a^\dagger a$  não corresponde ao operador número:

$$a^\dagger a|n\rangle = [n]_q|n\rangle \quad (1.46)$$

O auto-valor  $[n]_q$  é o chamado  $q$ -número simétrico, sendo que  $[n]_q \rightarrow n$  para  $q \rightarrow 1$ .

Os estados superiores são criados por sucessivas aplicações do operador de criação, como no caso usual:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{[n]_q!}} (a^\dagger)^n |0\rangle, \quad (1.47)$$

onde  $[n]_q! = [n]_q [n-1]_q \dots 1$ , é o chamado  $q$ -fatorial, com a definição  $[1]_q \equiv 1!$ .

### 1.4.1 Outros exemplos de $q$ -osciladores

Além do  $q$ -oscilador apresentado na seção anterior, muitos tipos de  $q$ -osciladores foram introduzidos na literatura. Nesta seção será feita, brevemente, uma descrição de algumas álgebras destes  $q$ -osciladores já apresentadas nas literaturas. Algumas destas álgebras serão novamente lembradas nos capítulos da primeira parte que se seguem.

**O  $q$ -oscilador não-simétrico** Podemos redefinir os operadores  $a$  e  $a^\dagger$  para obter a forma não-simétrica da álgebra de  $q$ -osciladores:

$$A = q^{\frac{1}{2}} a q^{-\frac{N}{2}}; \quad (1.48)$$

$$A^\dagger = q^{\frac{1}{2}} q^{-\frac{N}{2}} a^\dagger. \quad (1.49)$$

Fazendo a transformação acima, a álgebra dada pelas relações (1.30)-(1.32) se torna:

$$[N, A^\dagger] = A^\dagger; \quad (1.50)$$

$$[N, A] = -A; \quad (1.51)$$

$$[A, A^\dagger]_{q^2} = AA^\dagger - q^2 A^\dagger A = 1, \quad (1.52)$$

como consequência da equação (1.52), teremos

$$A^\dagger A = [N]_{q^2}^{ns}$$

e

$$AA^\dagger = [N + 1]_{q^2}^{ns},$$

onde  $[n]_{q^2}^{ns}$  é dado por:

$$[n]_{q^2}^{ns} = \frac{q^{2n} - 1}{q^2 - 1}, \quad (1.53)$$

o qual é conhecido com  $q$ -número ou número de Gauss. Este tipo de  $q$ -número é importante devido ao fato de possuir, para certos valores de  $q$ , auto-valores com um limite superior, quando se faz  $n \rightarrow \infty$ . Esta álgebra foi introduzida por [33] e possui um Hamiltoniano dado por:

$$H = \frac{\hbar\omega}{2}(AA^\dagger + A^\dagger A). \quad (1.54)$$

O espectro de auto-valores do operador Hamiltoniano possui um limite superior se  $0 < q < 1$ . Assim, esta álgebras tem sido utilizada para modelar sistema físicos com espectros com esta características.

**O  $q$ -oscilador Fermiônico** - Os autores tentaram em [34] também definir um  $q$ -oscilador fermiônico [34, 35], através das relações:

$$[N, f^\dagger] = f^\dagger; \quad (1.55)$$

$$[N, f] = -f; \quad (1.56)$$

$$\{f, f^\dagger\}_q = AA^\dagger + \sqrt{q}A^\dagger A = q^{-N}, \quad (1.57)$$

onde  $\{a, b\}_q = ab + qba$ , e como anteriormente definimos um estado de vácuo  $f|0\rangle = 0$ , de forma que os estados subseqüentes são dados por:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{[n]_q^f!}}(a^\dagger)^n|0\rangle, \quad (1.58)$$

onde o  $q$ -número fermiônico é dado por:

$$[n]_q^f = \frac{q^{-n/2} - (-1)^n q^{n/2}}{q^{-1/2} + q^{1/2}}. \quad (1.59)$$

Porém, como foi demonstrado em [35], para  $0 < q < 1$  qualquer número de férmions pode ocupar um dado estado. Os mesmos autores propuseram então

a transformação:

$$F = q^{\frac{N}{2}} f; \quad (1.60)$$

$$F^\dagger = f^\dagger q^{\frac{N}{2}}. \quad (1.61)$$

$$(1.62)$$

a qual produz a álgebra:

$$[N, F^\dagger]_q = F^\dagger; \quad (1.63)$$

$$[N, F] = -F; \quad (1.64)$$

$$\{F, F^\dagger\}_q = FF^\dagger + q^2 A^\dagger F = 1. \quad (1.65)$$

Para valores de  $0 < q \leq 1$  a álgebra é nilpotente como no caso da álgebra de férmions usual, mas neste caso a nova álgebra têm a mesma forma da álgebra deformada usual para  $q$ 's negativos.

O oscilador fermiônico generalizado foi utilizado na construção de modelos generalizados de estados coerentes e em supersimetria.

**O  $q$ -oscilador bi-paramétrico** - Também foi proposta uma álgebra deformada a dois parâmetros (ou bi-paramétrico) [36], a qual tem as seguintes relações de comutação:

$$[N, a^\dagger]_q = a^\dagger; \quad (1.66)$$

$$[N, a] = -a; \quad (1.67)$$

$$[a, a^\dagger]_p = aa^\dagger - pa^\dagger a = p^N; \quad (1.68)$$

$$[a, a^\dagger]_q = aa^\dagger - qa^\dagger a = q^N. \quad (1.69)$$

Subtraindo as duas últimas expressões, obtemos o operador número generalizado bi-paramétrico:

$$a^\dagger a = [N]_{pq} = \frac{q^N - p^N}{q - p}, \quad (1.70)$$

$$aa^\dagger = [N + 1]_{pq} = \frac{q^{N+1} - p^{N+1}}{q - p}. \quad (1.71)$$

Assim as equação (1.68)-(1.69) podem ser unidas em

$$[a, a^\dagger] = [N + 1]_{pq} - [N]_{pq} \quad (1.72)$$

Esta operador contém todos os operadores números generalizados estudados acima para valores particulares dos parâmetros  $p$  e  $q$ . Este modelo foi utilizado no estudo de vibrações moleculares [37].

**Álgebra de  $su_q(2)$**  - Podemos construir uma álgebra deformada  $su_q(2)$  análoga à construção de Jordan-Schwinger, compondo duas álgebras de  $q$ -osciladores [38]. Assim, define-se os operadores:

$$J_+ = a_1^\dagger a_2; \quad (1.73)$$

$$J_- = a_2^\dagger a_1; \quad (1.74)$$

$$J_z = \frac{1}{2}(N_1 - N_2), \quad (1.75)$$

$$(1.76)$$

os quais obedecem as seguintes relações de comutação:

$$[J_+, J_-] = [2J_z]; \quad (1.77)$$

$$[J_z, J_\pm] = \pm J_\pm. \quad (1.78)$$

$$(1.79)$$

O operador Casimir é dado por:

$$C(SU_q(2)) = [J_z + 1/2]^2 + J_- J_+ \quad (1.80)$$

$$= [J_z][J_z + 1] + [1/2]^2 + J_- J_+. \quad (1.81)$$

$$(1.82)$$

Os autovalores de  $C(SU_q(2))$  são dados por [38]:  $[j+1/2]^2 = \frac{q^{(j+1/2)/2} - q^{-(j+1/2)/2}}{q^{1/2} - q^{-1/2}}$ .

No limite de  $q \rightarrow 1$ , este será, como no caso usual  $(j + 1/2)^2$ .

A álgebra  $su_q(2)$  foi também utilizada no estudo de moléculas diatômicas [39].

## 1.5 Álgebra de Heisenberg Generalizada

Como já foi mencionado, recentemente Curado e Rego-Monteiro [9] propuseram uma álgebra chamada por eles de Álgebra Heisenberg Generalizada (AHG), a qual pode apresentar uma rica variedade de comportamentos e tem como principal característica a obtenção dos autovalores através de um processo iterativo (equação de diferenças). O comportamento dos autovalores pode ser estudado por técnicas da teoria de sistemas dinâmicos, simplificando enormemente a tarefa de se encontrar representações possíveis para a álgebra [9]. Esta álgebra depende de um funcional  $f(x)$ <sup>1</sup> e quando este funcional é linear, a álgebra se reduz a álgebra de  $q$ -osciladores [9, 40]. A álgebra é gerada por três operadores  $J_0$ ,  $A$  e  $A^\dagger$ , satisfazendo às seguintes relações:

$$J_0 A^\dagger = A^\dagger f(J_0), \quad (1.83)$$

$$A J_0 = f(J_0) A, \quad (1.84)$$

$$[A, A^\dagger] = f(J_0) - J_0, \quad (1.85)$$

---

<sup>1</sup>Ao invés de um único parâmetro, como no caso do  $q$ -oscilador.

onde  $\dagger$  designa hermitiano conjugado,  $J_0^\dagger = J_0$  é o Hamiltoniano de um sistema físico e  $f(J_0)$  é uma função arbitrária de  $J_0$ , chamada de função característica. Supondo a existência de um estado de vácuo representado por  $|0\rangle$  e definido por:  $A|0\rangle = 0$  e  $J_0|0\rangle = \alpha_0|0\rangle$ , podemos estudar as possíveis representações para álgebra. O operador  $A^\dagger$  atuando sobre o estado de vácuo  $|0\rangle$  produz outro estado, digamos  $|k\rangle$ :

$$A^\dagger|0\rangle = |k\rangle, \quad (1.86)$$

com o seu dual dado por  $\langle k| = \langle 0|A$ . Fazendo o produto interno de  $|k\rangle$  com o vácuo,  $|0\rangle$ , tem-se:

$$\langle k|0\rangle = \langle 0|A|0\rangle = 0. \quad (1.87)$$

Assim o novo vetor  $|k\rangle$  é ortogonal ao estado de vácuo  $|0\rangle$ . Chamando o novo vetor  $|k\rangle$  de  $M_0|1\rangle$ , onde  $\langle 1|1\rangle = 1$ , teremos:

$$A^\dagger|0\rangle = M_0|1\rangle, \quad (1.88)$$

Para se calcular o valor da constante  $M_0$ , fazemos o produto interno do vetor  $|k\rangle$  com seu dual:

$$\langle k|k\rangle = \langle 0|AA^\dagger|0\rangle = \langle 0|A^\dagger A + f(J_0) - J_0|0\rangle = M_0^2 = f(\alpha_0) - \alpha_0. \quad (1.89)$$

Para se determinar o autovalor de  $J_0$  usamos:

$$J_0|1\rangle = J_0 \frac{A^\dagger}{M_0}|0\rangle = \frac{A^\dagger(f(J_0))}{M_0}|0\rangle = \frac{A^\dagger(f(\alpha_0))}{M_0}|0\rangle = (f(\alpha_0))|1\rangle. \quad (1.90)$$

Assim, teremos:

$$J_0|1\rangle = \alpha_1|1\rangle = (f(\alpha_0))|1\rangle. \quad (1.91)$$

Agora, aplicando o mesmo procedimento que deu origem ao vetor  $|1\rangle$ , ao próprio vetor  $|1\rangle$  teremos:

$$A^\dagger|1\rangle = M_1|2\rangle; \quad (1.92)$$

$$M_1^2\langle 2|2\rangle = \langle 1|AA^\dagger|1\rangle = \langle 1|A^\dagger A + f(J_0) - J_0|1\rangle \quad (1.93)$$

e, como  $\langle 2|2\rangle = 1$ , tem-se:

$$M_1^2 = f(\alpha_1) - \alpha_0. \quad (1.94)$$

Da mesma maneira que para o vetor  $|1\rangle$ , para se encontrar o autovalor de  $J_0$  do vetor  $|2\rangle$ , fazemos:

$$J_0|2\rangle = J_0 \frac{A^\dagger}{M_1}|1\rangle = \frac{A^\dagger(f(J_0))}{M_1}|1\rangle = \frac{A^\dagger}{M_1}f(\alpha_1)|1\rangle = f(\alpha_1)|1\rangle, \quad (1.95)$$

assim,

$$\alpha_2 = f(\alpha_1). \quad (1.96)$$

De maneira geral teremos as seguintes relações, as quais podem ser provadas por indução [9]:

$$J_0|m-1\rangle = f^{m-1}(\alpha_0)|m-1\rangle, \quad m = 1, 2, \dots, \quad (1.97)$$

$$A^\dagger|m-1\rangle = M_{m-1}|m\rangle, \quad (1.98)$$

$$A|m\rangle = M_{m-1}|m-1\rangle, \quad (1.99)$$

onde  $M_{m-1}^2 = f^m(\alpha_0) - \alpha_0$ ,  $\alpha_0$  é o menor autovalor de  $J_0$  (autovalor do vácuo) e  $f^m(\alpha_0)$  é a  $m$ -ésima a iteração da função  $f$ . Esta álgebra contém uma classe de álgebras do tipo Heisenberg as quais têm os autovalores dados por:

$$\alpha_m = f(\alpha_{m-1}), \quad (1.100)$$

onde  $\alpha_m$  e  $\alpha_{m-1}$  são dois autovalores sucessivos e podem ser relacionados à energia do sistema [41]. Conseqüentemente, os autovalores de  $J_0$  podem ser obtidos iterativamente, podendo ser limitados superiormente ou não, dependendo da função característica, dos valores dos parâmetros da função e do valor inicial  $\alpha_0$ . Para cada tipo de função, os valores dos parâmetros determinam a existência ou não dos pontos fixos  $\alpha^* = f(\alpha^*)$  e sua estabilidade [30]. Conseqüentemente, diferentes espectros são obtidos para funções diferentes e o comportamento dos autovalores pode ser analisado usando técnicas de sistemas dinâmicos<sup>2</sup>.

O funcional  $f(x)$  pode ser, por exemplo, um polinômio e conseqüentemente depender de alguns parâmetros (os coeficientes polinomiais). Dependendo do tipo de funcional e seus parâmetros, representações finitas ou infinitas serão obtidas [9]. Os autovalores do operador  $J_0$  dependem da função característica  $f(x)$  e podem apresentar uma grande variedade dos comportamentos: podem ser monotonamente crescentes, decrescentes, podem ser limitados superiormente ou não, etc. Por exemplo, para o funcional  $f(J_0) = (\sqrt{J_0} + \sqrt{b})^2$ , onde  $b = \pi^2/2mL^2$ , sendo  $m$  e  $L$  a massa e o comprimento do poço, respectivamente, é obtida a AHG para o poço potencial quadrado unidimensional [41], com os autovalores  $\alpha_n$  dados por  $\alpha_n = f^n(\alpha_0) = bn^2$ , com  $n \geq 1$ . Nas duas subseções seguintes, serão descritos casos em que o funcional é uma função linear e um polinômio de 2<sup>o</sup> grau, respectivamente. Estes casos já foram estudados previamente na literatura [9].

---

<sup>2</sup>Diferentemente dos sistemas dinâmicos, neste caso  $m$  não está relacionado ao tempo, mas pode ser relacionado, por exemplo, aos níveis quânticos.

### 1.5.1 Caso Linear

Para o caso linear,  $f(J_0) = q J_0 + s$ , as equações (1.83)-(1.85) tornam-se:

$$[J_0, A^\dagger]_q = s A^\dagger; \quad (1.101)$$

$$[J_0, A]_{q^{-1}} = -\frac{s}{q} A; \quad (1.102)$$

$$[A, A^\dagger] = (q - 1) J_0 + s, \quad (1.103)$$

relembrando que  $[a, b]_q \equiv ab - q ba$  é o  $q$ -comutador dos operadores  $a$  e  $b$ .

(1.30)-(1.32).

Portanto, as equações (1.101)-(1.103) descrevem a AHG estudada em [9] e podem ser mapeadas na álgebra de  $q$ -osciladores. Quando  $q = 1$ , a álgebra de Heisenberg padrão é recuperada, para qualquer valor de  $s$ , uma vez que este pode ser eliminado pela transformação:  $A = a/\sqrt{s}$ ,  $A^\dagger = a^\dagger/\sqrt{s}$  e  $J_0 = N/s$ . Além disto, foi mostrado em [9] que a AHG pode ser mapeada na álgebra de  $q$ -osciladores através de uma transformação.

Uma análise gráfica das funções  $f(\alpha) = q\alpha + s$  e  $y = \alpha$  é mostrada na figura 1.1. A intersecção entre as duas linhas é identificada como o ponto fixo da equação de recorrência  $\alpha_n = q\alpha_{n-1} + s$ . Um caso interessante é obtido para  $0 < q < 1$  e  $\alpha_0 < \frac{s}{1-q}$ , pois o espectro de energia apresenta, para esses valores, um limite superior dado por:

$$\alpha^* = \frac{s}{1-q}. \quad (1.104)$$

Este comportamento é similar àquele de sistemas com espectros limitados, com por exemplo o de moléculas diatômicas. O ponto fixo  $\alpha^*$  pode ser relacionado à energia de dissociação do sistema:  $D_q \equiv \alpha^* - \alpha_0$ . Este interessante resultado credencia a AHG para o estudo fenomenológico de sistemas com

espectros limitados, tais como moléculas diatômicas. Similar abordagem foi usada em trabalhos anteriores, utilizando-se  $q$ -osciladores [23, 28], os quais podem ser obtidos via AHG. Porém, a AHG permite a escolha de outros tipos de funcionais que podem gerar as estruturas algébricas mais gerais do que  $q$ -osciladores [9].

### 1.5.2 Caso não-Linear

Um caso não-linear da AHG, com a função quadrática  $tx^2 + rx + s$ , já foi estudado anteriormente na referência [9]. Para este caso as equações (1.83-1.85) se tornam:

$$[J_0, J_+]_r = t J_+ J_0^2 + s J_+ \quad , \quad (1.105)$$

$$[J_0, J_-]_{r-1} = -\frac{t}{r} J_0^2 J_- - \frac{s}{r} J_- \quad , \quad (1.106)$$

$$[J_+, J_-] = -t J_0^2 + (1-r) J_0 - s \quad . \quad (1.107)$$

Para o caso em que  $t = 0$ , a álgebra de Heisenberg deformada é recuperada, assim como a álgebra de Heisenberg padrão para  $t = 0$ ,  $r = 1$  e  $s = 1$ .

Como no caso linear, será analisada a estabilidade dos pontos-fixos das equações (1.105)-(1.107), com o objetivo de se encontrar as possíveis representações (finitas e infinitas) da álgebra não-linear acima. Porém, agora será usada a análise gráfica da função  $f$ , para tal fim. Representando graficamente a função  $y = f(x)$  juntamente com  $y = x$ , os pontos-fixos são os pontos onde as duas curvas se interceptam ( $x = y = f(x)$ ). Para se determinar graficamente a evolução de um ponto inicial qualquer  $x_0$ , diferente do ponto fixo, na medida que a função  $f$  é iterada, procede-se da seguinte maneira, partindo se do ponto  $x = x_0$ :

1. desloca-se verticalmente até o gráfico de  $f(x)$ ;
2. desloca-se horizontalmente até o gráfico de  $y = x$ ;
3. repete-se os passos (1) e (2) para o novo ponto  $x$ .

Este processo é ilustrado na figura 1.1. Os pontos-fixos são as soluções de  $f(x^*) = x^*$ . Há três casos a serem estudados: (I)  $\Delta < 0$ , (II)  $\Delta = 0$  e (III)  $\Delta > 0$ , onde  $\Delta = (r - 1)^2 - 4ts$ . No primeiro caso não existem pontos-fixos e existem representações de dimensão infinita ( $M_m^2 \neq 0, \forall m, m \in \mathbb{Z}^+$ ), que tem  $\alpha_0$  como menor valor da representação, somente quando  $t > 0$ . Assim, o caso (I) fornece representações infinitas sendo  $\alpha_0$  sempre o menor valor da representação:

$$t > 0 \quad , \quad (r - 1)^2 - 4ts < 0 \quad \text{e} \quad \alpha_0 \in \mathfrak{R} \quad (1.108)$$

No caso (II), quando  $t > 0$  existe um ponto-fixo dado por  $\alpha^* = (1 - r)/2t$ . Este ponto fixo corresponde a uma representação uni-dimensional trivial da álgebra para  $\alpha_0 = \alpha^*$ , pois  $M_0 = 0$ . Além desta representação também existirão, para o caso (II), representações infinitas, com  $\alpha_0$  sendo o menor valor para os autovalores da representação, quando os parâmetros forem tais que:

$$t > 0 \quad , \quad (r - 1)^2 - 4ts = 0 \quad \text{e} \quad \alpha_0 \in \mathfrak{R}, \alpha_0 \neq (1 - r)/2q. \quad (1.109)$$

No caso (III) podem existir, no espaço dos parâmetros  $(t, r, s, \alpha_0)$ , atratores de período 1, 2, 4,  $\dots$  e regiões caóticas. Assim, há regiões neste espaço associadas à representações de dimensão finita e infinita. Serão analisados aqui os exemplos dos atratores do período 1 e 2. A análise será feita, de agora em diante, somente para  $t > 0$ , pois para  $t < 0$  o comportamento é similar.

Relembrando que um ponto-fixo  $\alpha^*$  é estável se  $|(f')_{\alpha=\alpha^*}| = |(\frac{\partial f}{\partial \alpha})_{\alpha=\alpha^*}|$  é menor que um e é instável se este for maior que um. Para o caso (III), os pontos fixos são

$$\alpha_{\pm}^* = \frac{1 - r \pm \sqrt{\Delta}}{2t} . \quad (1.110)$$

O ponto fixo  $\alpha_+^*$  é sempre instável e, calculando-se  $f'$  em  $\alpha$ , encontra-se que  $\alpha_-^*$  é estável para  $(t, r, s)$  tais que  $0 < \Delta < 4$ . As regiões onde os valores de  $\alpha_n > \alpha_0 \forall n$  são dadas por: *i*)  $\alpha^m < \alpha_0 < \alpha_-^*$  quando,  $\alpha_n$  evolui para  $\alpha_-^*$  e *ii*)  $-\infty < \alpha_0 < \alpha^m$  ou  $\alpha_+^* < \alpha_0 < \infty$ , quando  $\alpha_n$  tende ao infinito, onde  $\alpha^m$  é dado por  $\alpha^m = \frac{-1-r-\sqrt{\Delta}}{2t}$ , sendo o valor de  $f(\alpha)$  calculado por  $\alpha^m = f(\alpha_+^*) = \alpha_+^*$ . A região  $\alpha_-^* < \alpha_0 < \alpha_+^*$  não corresponde a uma representação onde  $\alpha_0$  é o menor valor e portanto deve ser descartada. Além disso,  $\Delta > 0$  e  $\alpha_0 = \alpha_-^*$  ou  $\alpha_0 = \alpha_+^*$ , correspondem à representação finita uni-dimensional trivial.

Quando o conjunto de parâmetros  $(t, r, s, \alpha_0)$  forem tais que a função  $f(\alpha) = t\alpha^2 + r\alpha + s$  tem um atrator do período 2, podem ser obtidas representações de dimensão infinita onde o comportamento assintótico dos autovalores de  $J_0$  tende a um atrator de período 2. Além disso, quando  $\alpha_0$  for o menor valor da representação, existirá um conjunto de parâmetros  $(t, r, s)$  que correspondem a representação bi-dimensional.

Para analisar a estabilidade dos pontos fixos de  $f^2(\beta) \equiv f(f(\beta))$ , é necessário encontrar os pontos que satisfazem  $\beta^* = f^2(\beta^*)$ . Estes pontos são dados por:

$$\beta_{\pm}^* = \frac{-1 - r \pm \sqrt{\Delta_1}}{2t} , \quad (1.111)$$

onde  $\Delta_1 = -3 - 2r + r^2 - 4ts$ . Os pontos-fixos de  $f^2$ ,  $\beta_{\pm}^*$  têm a mesma tangente, portanto, é suficiente analisar a região da estabilidade para um deles. Esta região é formada pelos valores  $(t, r, s)$  tais que  $4 < \Delta < 6$ .

Então, os valores permitidos de  $\alpha_0$  são tais que: *iii*)  $-\infty < \alpha_0 < \alpha^m$  ou  $\alpha_+^* < \alpha_0 < \infty$ , quando os autovalores de  $J_0$  vão ao infinito e *iv*)  $\alpha^m < \alpha_0 < \beta_-^*$  quando os autovalores de  $J_0$  tendem a um ciclo estável de período 2. Pode-se obter ainda uma representação bi-dimensional quando  $\alpha_0$  for

$$\alpha_0 = \beta_-^* = \frac{-1 - r - \sqrt{\Delta_1}}{2t}, \quad (1.112)$$

para  $\Delta > 4$ .

Aplicações da AHG, especialmente com funções não-lineares, as quais oferecem uma maior riqueza de comportamentos, em algumas áreas da física estão em desenvolvimento [17, 22].

### 1.5.3 Objetivos deste trabalho

Nesta primeira parte da tese estudaremos o espectro molecular vibracional através da AHG propostas pelos autores [9], problema que já foi abordado anteriormente via métodos algébricos. No Capítulo (2) será proposta uma AHG não-linear que é capaz de ajustar o espectro vibracional molecular utilizando poucos parâmetros, de maneira simples e com resultados globais melhores do que aqueles obtidos com métodos (*ab initio* ou algébricos) anteriormente propostos. Será utilizada como exemplo de eficácia do método a molécula de monóxido de carbono. Posteriormente, será apresentada uma nova estrutura algébrica a qual contém muitas álgebras anteriormente propostas na literatura e na qual, diferentemente da álgebra proposta por [9], os autovalores do operador Hamiltoniano são escritos em função de dois autovalores antecessores. Uma vez que os autovalores de um dos operadores AHG proposta em [9] depende do seu antecessor, chamaremos esta de Álgebra de Heisenberg Generalizada à “um passo”. A nova estrutura algébrica proposta no

Capítulo (3) será denominada, então, Álgebra de Heisenberg Generalizada à “dois passos”. Mostraremos que esta álgebra é capaz de descrever sistemas cujos espectros não podem ser descritos por uma álgebra à “um passo”.

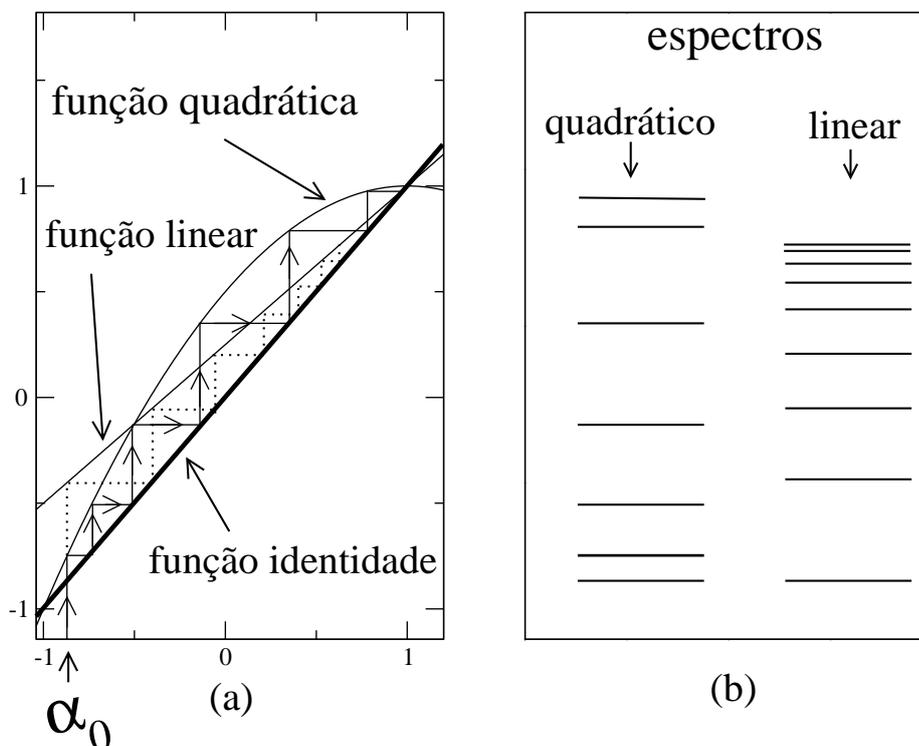


Figura 1.1: *a*) Análise gráfica para a função característica linear,  $f(\alpha)$  para  $0 < q < 1$  com  $\alpha_0 < \frac{s}{1-q}$ , e para o polinômio de  $2^2$ , para um caso onde  $t < 0$  e  $\Delta > 0$ . A estabilidade é avaliada iterando-se a função: na primeira iteração, partindo do valor inicial  $\alpha_0$ , projeta-se este ponto verticalmente na curva da função  $f(\alpha)$ ; na segunda iteração, o valor da função é projetado horizontalmente na reta da função identidade, ou seja,  $\alpha_1 = f(\alpha_0)$ , e novamente  $\alpha_1$  é projetado verticalmente na curva da função ( $f(\alpha_1)$ ) e assim sucessivamente. Note que, para o caso linear, quando a função é iterada, o valor de energia se aproxima do ponto-fixo estável  $\alpha^* = \frac{s}{1-q}$  (o limite superior). A energia de dissociação do sistema é proporcional a  $(\alpha^* - \alpha_0)$ . Para o caso não-linear, as iterações levam ao mesmo ponto-fixo, mas por um caminho diferente do caso linear. *b*) Comparação entre os níveis de energia dos casos linear e não-linear da figura (*a*).

## Capítulo 2

### Aplicação à Molécula

#### Diatômica

Uma das possíveis aplicações das álgebras de  $q$ -osciladores e da AHG, já apontadas anteriormente, é em física molecular, principalmente na descrição dos espectros rotacional, vibracional e ro-vibracional de moléculas. Vibrações e rotações moleculares são candidatas para a aplicação das álgebras deformadas, pois moléculas são exemplos de sistemas onde as aproximações usuais, baseadas no oscilador harmônico (vibrações) e no rotor rígido (rotações) são claramente insuficientes, especialmente para estados quânticos excitados. Esta violação ocorre no caso de vibrações moleculares devido ao fato de que, para modos vibracionais mais altos, o potencial real da molécula se distancia do potencial harmônico (anarmonicidade). Para o caso do espectro rotacional a simetria de rotação é violada, para modos rotacionais altos, porque a molécula deixa de se comportar como um rotor rígido. Para o caso de vibrações, esta violação do comportamento harmônico se reflete diretamente no espaçamento desigual entre os sucessivos níveis do espectro de energia, as-

sim, uma vez que o espectro dos  $q$ -osciladores também é caracterizado por um espaçamento desigual dos níveis de energia, é razoável pensar em álgebras de  $q$ -osciladores como modelo para estes sistemas. A vantagem destes em relação aos métodos *ab initio* e aos métodos algébricos usuais, além da simplicidade do cálculo, é a pequena quantidade de parâmetros a ser ajustados sem a necessidades de se recorrer a métodos perturbativos, os quais, freqüentemente, tem problemas de convergência e/ou excesso de parâmetros (veja apêndice (B)). A álgebra de  $q$ -osciladores, possuindo apenas um parâmetro, fornece uma descrição local do espectro, e em geral funciona bem para os primeiros níveis de energia e falha na descrição de estados muito excitados. A AHG, entretanto, em particular os casos não-lineares, pode fornecer uma variedade maior de espectros sem acrescentar muitos parâmetros, mantendo a simplicidade. Daí a idéia de se usar a AHG para descrever fenomenologicamente o espectro global de moléculas diatômicas. Neste capítulo serão apresentados, nas primeira seções, alguns métodos utilizados para se estudar o espectro vibracional de moléculas diatômicas. E por fim serão apresentados os resultados dos trabalho desenvolvido em [22], o qual utilizou com sucesso uma AHG não-linear para descrever fenomenologicamente o espectro vibracional global da molécula CO.

## 2.1 O espectro Molecular Vibracional

A espectroscopia vibracional tem um papel fundamental na física molecular e suas aplicações se estendem a outros campos da ciência, como a astronomia [42], a biologia [43], as ciências da Terra e do meio-ambiente [44]. A análise do espectro vibracional fornece informações importantes sobre a estrutura

das moléculas.

Recentemente foram desenvolvidas técnicas experimentais que permitem a observação de estados quânticos vibracionais altamente excitados [45, 46], além do aprimoramento das técnicas espectroscópicas que permitem o estudo de estados ro-vibracionais em alta resolução[47]. Este fato reforça a importância do aperfeiçoamento de modelos adequados para obtenção destes estados.

Na aproximação de Born-Oppenheimer (a qual será discutida na próxima seção) os estados quânticos eletrônico, vibracional e rotacional podem ser considerados separadamente [43] e as vibrações moleculares podem ser descritas aproximadamente pelo oscilador harmônico [48]. Entretanto este modelo falha na descrições dos estados vibracionais mais elevados e, portanto, não é capaz de fornecer a energia de dissociação correta.

Um dos primeiros modelos que adiciona correções ao termo harmônico foi proposto por Morse [49]. No modelo de Morse o potencial harmônico é substituído, na equação de Schroedinger (ES), pelo conhecido potencial de Morse. O modelo de Morse tem a vantagem de poder ser resolvido analiticamente e reproduz razoavelmente os primeiros níveis de energia vibracional para a maioria das moléculas diatômicas [50], além de fornecer um espectro com limite superior (energia de dissociação).

Para melhorar o ajuste com dados experimentais, muitos métodos baseados no uso de potenciais tipo Morse [50, 51], Kratzer [52, 53]<sup>1</sup> ou versões modificadas destes ou de outros potenciais, têm sido usados para estudar sistemas moleculares [54, 55, 56]. Além da melhoria no ajuste dos primei-

---

<sup>1</sup>O potencial de Kratzer é dados por:  $V(r) = -2D \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \frac{A^2}{r^2} \right)$ , onde  $D$  é a energia de dissociação e  $A$  está associado aos parâmetros moleculares.

ros níveis de energia, também têm sido propostos métodos para se estimar acuradamente energia de dissociação de moléculas diatômicas [57, 58].

Apesar de os métodos mencionados acima serem capazes de fornecer bons resultados para o espectro de muitas moléculas, muitos autores têm apontado algumas limitações para estes. Podemos citar, por exemplo, o trabalho de Angelova *et al.* [28], onde os autores registram o fato de que a solução de Morse contém apenas correções quadráticas e para se obter mais termos necessita-se recorrer à expansão de Dunham (equação (2.6) da seção 2.3). Exemplos de moléculas cujos potenciais se desviam fortemente de potenciais tipo Morse pode ser visto em [59]. Iachello e Levine [60], por outro lado, observam que a solução da ES é muito difícil para moléculas com mais de dois átomos e neste caso os métodos algébricos poderiam trazer vantagens. Problemas relacionados ao cálculo *ab initio* da energia de dissociação, um método algébrico para calculá-la e a aplicação para 14 estados eletrônicos de 4 moléculas, foram descritos por Sun *et al.* [57].

A abordagem algébrica para o estudo dos espectros moleculares vibracional e rotacional foi introduzida por F. Iachello [61] (para uma revisão recente veja a referência [1]). Métodos baseados na abordagem algébrica têm mostrado ser útil para se calcular níveis vibracionais altamente excitados e para descrever o espectro global de moléculas complexas, mantendo a simplicidade, nos casos onde o uso de métodos *ab initio* não é implementável na prática [45, 62, 63, 64].

Além da abordagem tradicional via álgebra de Heisenberg, as álgebras de Heisenberg deformadas (e/ou de q-osciladores) têm atraído considerável atenção desde que foram propostas [12, 13], devido principalmente às suas

potenciais aplicações físicas [65] (veja referência [8] para uma revisão). Como já foi mencionado, as álgebras de  $q$ -osciladores, que são generalizações não-triviais da álgebra de Heisenberg, são geralmente caracterizadas por um parâmetro  $q$ . É interessante observar que, para alguns valores do parâmetro da deformação, o espectro de autovalores gerados por um dos operadores do  $q$ -oscilador, apresenta um limite superior, como ocorre nos sistemas de partículas compostas [17], por exemplo, nas moléculas diatômicas [8, 19, 23, 28]. Dentro desse formalismo os  $q$ -osciladores são usados como um modelo de osciladores anarmônicos, e o valor do parâmetro  $q$  é escolhido para se tentar reproduzir o espectro vibracional molecular experimental em estudo. Quando comparada com outros métodos, a abordagem de  $q$ -osciladores requer poucos parâmetros, permite expressões analíticas e ajusta bem os primeiros níveis experimentais. Entretanto, como ficará claro mais tarde, este formalismo não fornece a energia de dissociação correta para a molécula estudada neste trabalho, pois este não é capaz de ajustar os níveis vibracionais muito elevados. Recentemente, muitos autores têm discutido a interpretação física do parâmetro  $q$  dos  $q$ -osciladores [66, 67, 68, 69] mas esta análise está fora do escopo deste trabalho. A título de ilustração, podemos citar a interessante abordagem proposta por [67], onde os autores estudam o potencial subjacente aos  $q$ -osciladores através do método WKB. Outros trabalhos associam o parâmetro  $q$  à constante de anarmonicidade, através da expansão de Taylor da expressão para a energia dos  $q$ -osciladores [70].

No presente trabalho nós introduzimos e implementamos um caso particular da Álgebra de Heisenberg Generalizada (AHG), não-linear, proposta pelos autores da referência [9], já discutida na introdução e mencionada na

seção anterior, a qual é capaz de descrever com boa precisão o espectro molecular vibracional da molécula do monóxido de carbono (CO). O espectro gerado por esta AHG não-linear permite o ajuste das 20 primeiras transições vibracionais conhecidas experimentalmente, apresenta valores aproximados para os outros níveis (mesmos os de números quânticos bastante elevados) e fornece a energia de dissociação correta, produzindo resultados globais melhores do que os métodos acima mencionados.

## 2.2 A aproximação Born-Oppenheimer e o Potencial Harmônico

A hipótese básica da chamada separação de Born-Oppenheimer<sup>2</sup> é a de que a razão entre as massas do elétron e do núcleo é suficientemente pequena para que se possa considerar que os elétrons se movam em um campo de núcleos fixos [71]. A função de onda total pode, então, ser considerada com sendo composta por uma parte eletrônica e outra nuclear, sendo que na chamada aproximação de Born-Oppenheimer a parte nuclear depende somente da posição relativa dos núcleos [71]:

$$\Psi_{molec}(R_i, r_j) = \Psi_{ele}(R_i, r_j)\Psi_{nuc}(R_i), \quad (2.1)$$

onde  $\Psi_{molec}$  é a função de onda molecular,  $\Psi_{ele}$  é a função de onda eletrônica,  $\Psi_{nuc}$  é a função de onda nuclear, os  $R_i$  indicam as posições relativas dos

---

<sup>2</sup> Esta separação reflete o fato experimental de que o espectro molecular se divide em três regiões: 1) microondas-radiofrequência que corresponde ao espectro rotacional; 2) infravermelho, que corresponde ao espectro vibracional e 3) visível- ultravioleta, que corresponde ao espectro eletrônico.

núcleos e  $r_i$  as posições relativas dos elétrons. Assim, pode ser obtida uma equação de Schroedinger nuclear

$$\hat{H}_{nuc}\Psi_{nucl}(R_i) = E_n\Psi_{nuc}(R_i). \quad (2.2)$$

Será abordado aqui o caso de moléculas diatômicas. Neste caso, o Hamiltoniano nuclear é dado por:

$$\hat{H}_{nuc} = \frac{-\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 + V_{ef}(R_i), \quad (2.3)$$

onde  $V_{ef}$  é um potencial efetivo e  $\mu = \frac{m_1m_2}{m_1+m_2}$  é a massa reduzida, sendo  $m_1$  e  $m_2$  as massas dos dois átomos participantes da ligação. Para baixas temperaturas (em torno de 300K) as vibrações de moléculas diatômicas são aproximadamente harmônicas e a maioria das moléculas está no primeiro estado quântico vibracional [71]. O potencial neste caso pode ser aproximado pelo potencial harmônico mais o efeito rotacional:  $V_{ef} = V(R) + \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2\mu^2}$ . Assim, tem-se um potencial para cada modo rotacional e para se ter o espectro vibracional puro, considera-se o estado rotacional fundamental ( $J = 0$ ). O potencial pode então ser escrito, aproximadamente, como:

$$V(x) = \frac{1}{2}kR^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 R^2 \quad (2.4)$$

onde  $k$  é a constante de força e  $\omega$  é a frequência  $\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$ . O espectro tem a bem conhecida forma:

$$E_\nu = \hbar\omega \left( \nu + \frac{1}{2} \right). \quad (2.5)$$

Os efeitos de anarmonicidade surgirão para modos vibracionais mais elevados, como veremos na próxima seção.

## 2.3 Potenciais tipo Morse

### 2.3.1 Potencial de Morse

Vamos discutir agora a descrição quântica do espectro vibracional de moléculas diatômicas, que incorpora efeitos não-harmônicos. Como vimos anteriormente, para níveis de energia baixos, o potencial molecular pode ser aproximado pelo potencial harmônico. Porém, para energias mais elevadas esta aproximação falha. Assim, para se levar em conta efeitos rotacionais e de anarmonicidade, termos não-lineares devem ser incluídos na expressão da energia [43]:

$$E_{\nu,J} = \hbar\omega_e \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} Y_{l,m} \left( \nu + \frac{1}{2} \right)^l [J(J+1)]^m, \quad (2.6)$$

onde  $\nu$  e  $J$  são números quânticos vibracionais e rotacionais, respectivamente,  $\omega_e$  é a frequência vibracional no estado fundamental. Os coeficientes  $Y_{l,m}$  devem ser determinados experimentalmente. Para  $l = 1$  e  $m = 0$  (estado puramente vibracional),  $Y_{1,0} = 1$  e o espectro do oscilador harmônico é recuperado. A expressão (2.6) foi obtida por Dunham através do método WKB [51]. Os dois primeiros termos vibracionais desta equação foram obtidos analiticamente ( $l = 2$  e  $m = 0$ ), através da solução da ES com o potencial de Morse [49] (veja figura 2.1):

$$V(r) = De^{-2a(r-r_0)} - 2De^{-a(r-r_0)}, \quad (2.7)$$

onde  $a > 0$  é uma constante característica de cada molécula,  $r$  é a distância nuclear relativa,  $r_0$  é a posição de equilíbrio entre dois átomos e  $D$  é a energia de dissociação. A solução do ES para este potencial fornece a seguinte expressão para a energia vibracional:

$$E_n = -D + \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) - \chi_e\left(n + \frac{1}{2}\right)^2, \quad \left(n = 0, 1, 2, \dots, \frac{k-1}{2}\right), \quad (2.8)$$

com

$$\chi_e = \frac{\hbar\omega}{4D}, \quad (2.9)$$

e  $k = \frac{1}{\chi_e}$ . Os níveis de energia obtidos estão em razoável acordo com os primeiros níveis experimentais [43]. O máximo valor permitido para  $n$  na equação (2.8) é tal que a solução da ES permaneça finita. Assim, o valor máximo de  $n$  é dado por:

$$n_{max} = \text{int} \left( \frac{1}{2k} - \frac{1}{2} \right). \quad (2.10)$$

Portanto, existe um valor máximo de energia  $n_{max}$ , para além do qual o sistema se torna não-ligado.

Embora o método pioneiro de Morse apresente a vantagem de possuir uma solução analítica e fornecer um espectro com limite superior, métodos posteriores (baseados ou não no potencial de Morse) foram capazes de melhorar os resultados de Morse. Na próxima subseção descreveremos um destes métodos, o qual foi aplicado à molécula de Monóxido de Carbono.

### 2.3.2 Método de Morse Perturbado

Para melhorar os resultados de Morse, foram propostos diversos métodos perturbativos, que têm como ponto de partida o potencial de Morse ou outro potencial analítico ou numérico, ao invés do potencial harmônico. Huffaker [51], usou um modelo de Morse perturbado para calcular os primeiros termos da expansão de Dunham (equação 2.6) para a molécula do CO. Esse autor usou o potencial dado pela seguinte expressão:

$$\begin{aligned} V(r) = & D[(1 - e^{-aq})^2 + b_4(1 - e^{-aq})^4 \\ & + b_5(1 - e^{-aq})^5 + b_6(1 - e^{-aq})^6 + b_7(1 - e^{-aq})^7 + b_8(1 - e^{-aq})^8], \end{aligned} \quad (2.11)$$

onde  $q = r - r_0$  e, como anteriormente,  $a$  é uma constante característica de cada molécula,  $r$  é a distância nuclear relativa,  $r_0$  é a posição de equilíbrio,  $D$  é a energia de dissociação, os coeficientes  $b_4, b_5, \dots$  estão relacionados as constantes moleculares e de anarmonicidade.

Usando 28 linhas espectrais da molécula do CO [42], foram calculados oito parâmetros do potencial dado pela equação (2.11). Este modelo representou uma melhoria do ajuste quando comparado com o modelo obtido através do método de RKR<sup>3</sup> por Mantz *et al.* [42]. Este último modelo, por sua vez, obteve resultados melhores que o modelo de Morse. Ignorando-se o grau de liberdade rotacional ( $m = 0$  na equação 2.6), o modelo de Huffaker tem sete parâmetros. Na próxima seção serão comparados os resultados obtidos com o modelo de Huffaker e dos modelos baseados na AHG linear ( $q$ -oscilador) e na AHG não-linear.

## 2.4 AHG e Espectro Molecular Vibracional

### 2.4.1 Caso Linear ( $q$ -oscilador)

Para se estudar o espectro vibracional de moléculas diatômicas através do formalismo da AHG, vamos partir do Hamiltoniano bastante geral desenvolvido nas referências [24, 30]:

$$H = \hbar\omega(c_1 AA^\dagger + c_2 A^\dagger A + c_3), \quad (2.12)$$

onde  $A$  e  $A^\dagger$  obedecem as relações (1.83-1.85) e  $c_1, c_2$  e  $c_3$  são números reais. Escolhendo  $c_1 = c_2 = 1, c_3 = 0$  e usando as equações (1.97-1.99) obtém-se

---

<sup>3</sup>O método RKR (Rydberg-Klein-Rees) é baseado numa aproximação WKB de primeira ordem e encontra numericamente a curva potencial a partir dos dados espectroscópicos.

[30]:

$$H = \hbar\omega (f(J_0) + J_0 - 2\alpha_0). \quad (2.13)$$

Assim, para o caso linear,  $f(J_0) = qJ_0 + s$  ( $q < 1$ ), tem-se:

$$H = \hbar\omega ((q + 1)J_0 + s - 2\alpha_0). \quad (2.14)$$

Aplicando o Hamiltoniano dado pelas equações (2.14) nos auto-estados  $|\nu\rangle$  de  $J_0$ , lembrando que  $J_0|\nu\rangle = \alpha_\nu|\nu\rangle$ , onde  $\alpha_{n+1} = f(\alpha_n) = f^{\nu+1}(\alpha_0)$  obtemos  $H|\nu\rangle = E_\nu|\nu\rangle$ , onde os autovalores de energia são dados por

$$E_\nu = \hbar\omega [(q + 1)f^{(\nu)}(\alpha_0) + s - 2\alpha_0], \quad (\nu = 0, 1, 2, \dots) \quad (2.15)$$

onde  $f^{(\nu)}(\alpha_0) = q^\nu \alpha_0 + s \frac{q^\nu - 1}{q - 1}$ . Após um pouco de álgebra obtém-se:

$$E_\nu = \hbar\omega (M_q - L_q q^{\nu+1/2}), \quad (2.16)$$

com  $L_q = \frac{1+q}{q^{1/2}} \left( \frac{s}{1-q} - \alpha_0 \right) = \frac{1+q}{q^{1/2}} (\alpha^* - \alpha_0)$  e  $M_q = 2 \left( \frac{s}{1-q} - \alpha_0 \right) = 2(\alpha^* - \alpha_0)$ , onde  $\alpha^* = \frac{s}{1-q}$  (equação (1.104)).

A energia máxima ( $\nu \rightarrow \infty$ ) para este sistema é dada por ( $q < 1$ ):

$$E_\infty = \hbar\omega M_q = 2\hbar\omega (\alpha^* - \alpha_0).$$

A energia de dissociação ( $E_\infty - E_0$ ) pode, então, ser escrita como:

$$D_q = \hbar\omega (1 + q) (\alpha^* - \alpha_0). \quad (2.17)$$

### 2.4.2 Aplicação à molécula de CO

A escolha da molécula de CO para este trabalho, foi motivada pela existência de uma quantidade razoável de dados disponíveis e pela existência de estudos anteriores os quais, poderiam ser usados para comparação com o atual. Além

disso, como foi colocado no início deste capítulo, o estudo espectroscópico desta molécula encontra aplicação em muitas áreas da ciência.

Vamos agora aplicar os resultados acima ao estudo do espectro da molécula do monóxido de carbono e vamos compará-lo com os dados experimentais e com o espectro obtido usando-se o potencial de Morse. Os dados experimentais foram obtidos através da base de dados HITRAN<sup>4</sup> [72]. Foram escolhidas as linhas nas quais as moléculas estão no estado fundamental eletrônico. Foram selecionadas então as linhas cujos os números quânticos rotacionais são zero. Assim, restam apenas as linhas espectrais que representam as primeiras 21 transições puramente vibracionais da molécula do CO. Para ajustar os parâmetros ( $q$  e  $\alpha_0$ ) aos valores experimentais, notamos que o logaritmo da diferença entre dois níveis sucessivos da equação (2.16), em função de  $\nu$ , é uma linha reta com inclinação  $\ln q$ :

$$\Delta E_\nu = E_{\nu+1} - E_\nu = \hbar\omega L_q q^{\nu+1/2} (1 - q) \quad (2.18)$$

Tomando-se o logaritmo da diferença entre dois valores experimentais sucessivos, nós obtemos o parâmetro  $q$  calculando-se a inclinação da reta  $\log q$  por regressão linear (veja figura 2.2). Os parâmetros ajustados são mostrados na tabela (2.1). Na figura (2.5)) é apresentado o espectro de energia deslocado ( $E_0 = 0$ ) e normalizado pelo valor da energia de dissociação experimental, para cada um dos modelos estudados neste trabalho. Pode-se observar que o espectro da AHG linear está em bom acordo com os dados experimentais da molécula de CO (veja a tabela (2.2) e a figura (2.5)), principalmente para

---

<sup>4</sup>Os dados podem ser obtidos gratuitamente, mediante cadastro e a base é atualizada constantemente. Há uma diferença sistemática de  $0.03\text{cm}^{-1}$  entre os dados usados nas referências [42, 51] e os fornecidos pela base de dados HITRAN, cujos dados são mais recentes.

o caso dos primeiras transições experimentais. Entretanto, o valor de  $D$  calculado pela equação (2.17) é bastante diferente do valor experimental como pode ser visto na tabela (2.2). Isto significa que, embora os erros relativos do  $q$ -oscilador ( $\Delta E_\nu = \frac{E_{teor.} - E_{exp.}}{E_{exp.}}$ ) sejam menores do que os erros relativos obtidos pelo modelo de Morse para a maioria dos 20 primeiros níveis vibracionais experimentais (figura (2.6)), a aproximação baseada no  $q$ -oscilador não é capaz de ajustar níveis vibracionais altamente excitados.

### 2.4.3 Caso não-linear

Como nós vimos acima, o AHG linear (isto é o  $q$ -oscilador) é um bom modelo somente para os primeiros níveis vibracionais da molécula de CO. Para tentar ajustar os níveis de energia e obter a energia de ionização correta, foi necessário usar um funcional  $f(x)$  não-linear na AHG dada pelas equações (1.83)-(1.85). Para se encontrar o funcional que é capaz de melhor descrever o espectro, foram testados vários polinômios e foi encontrado que o funcional de quarta ordem:

$$f(x) = p x^4 + q x + 1, \quad (2.19)$$

ajusta bem os dados experimentais e fornece a correta energia de ionização. Este funcional representa o funcional linear ( $q$ -oscilador) mais um pequeno termo de quarta ordem. Entretanto, o espectro gerado por esta AHG não-linear, não tem uma expressão analítica fechada como a equação (2.16), do caso dos  $q$ -osciladores. Neste caso o espectro pode somente ser calculado numericamente.

Por simplicidade, partiremos do hamiltoniano:

$$H = \hbar\omega(A^\dagger A + \alpha_0) = \hbar\omega J_0, \quad (2.20)$$

o qual é derivado do hamiltoniano descrito pelas equações (2.12) com  $c_1 = 0$ ,  $c_2 = 1$  e  $c_3 = \alpha_0$ . Substituindo  $f(J_0)$  dado pela equação (2.19) nas relações dadas pelas equações (1.83)-(1.85) e aplicando  $H$  nos auto-estados de  $J_0$ , obtém-se:

$$E_\nu = \hbar\omega f^{(\nu)}(\alpha_0), \quad (2.21)$$

onde  $f^{(\nu)} = \alpha_\nu$  é dados por:

$$\alpha_{\nu+1} = p\alpha_\nu^4 + q\alpha_\nu + 1. \quad (2.22)$$

Foram usados os valores gerados pela equação (2.21) com  $f^\nu(\alpha_0)$  dado pela equação (2.22) para ajustar os parâmetros  $q$ ,  $p$  e  $\alpha_0$  com os dados experimentais. A energia de dissociação é dada por:

$$D_{AHG} = E_\infty - E_0 = \hbar\omega(\alpha^* - \alpha_0), \quad (2.23)$$

onde  $\alpha^*$  é o ponto-fixo estável da equação de recorrência dada pela equação (2.22) e é encontrado pela solução da equação:  $\alpha^* = p(\alpha^*)^4 + q\alpha^* + 1$ . Os parâmetros ajustados são mostrados na tabela (2.1). O ajuste foi realizado fazendo-se, primeiro, a diferença entre dois níveis experimentais consecutivos  $(\nu + 1)$  e  $(\nu)$  e depois a diferença entre os níveis  $(\nu + 2)$  e  $(\nu + 1)$ . O sistema formado por estas duas diferenças é linear nos parâmetros  $p$  e  $q$  como mostra a equação abaixo:

$$\alpha_{\nu+1} - \alpha_\nu = p(\alpha_\nu^4 - \alpha_{\nu-1}^4) + q(\alpha_\nu - \alpha_{\nu-1}); \quad (2.24)$$

$$\alpha_{\nu+2} - \alpha_{\nu+1} = p(\alpha_{\nu+1}^4 - \alpha_\nu^4) + q(\alpha_{\nu+1} - \alpha_\nu), \quad (2.25)$$

uma vez que os  $\alpha$ 's são dados pelos valores experimentais. Este procedimento foi adotado para cada um dos conjuntos de três pontos consecutivos dos níveis experimentais, onde por meio da solução do sistema de equações lineares

dado pelas equações (2.24)-(2.25), foram calculados os  $p$ 's e  $q$ 's para cada conjunto e finalmente foi extraída a média para cada conjunto de  $p$ 's e  $q$ 's. O parâmetro  $q$  é estável até a terceira casa decimal, embora este tenha uma leve tendência de queda como mostra a figura (2.3). O parâmetro  $p$  é estável somente para os últimos pontos, como mostra a figura (2.3), mas como será discutido mais adiante, este têm pouca influência nas primeiras iterações e sua influência é maior justamente na região onde é estável. Para se chegar aos valores:  $p = 0,9872$  e  $q = 1,43 \times 10^{-7}$ , partiu-se dos valores  $p = 0,987$  e  $q = 1,4 \times 10^{-7}$ , e as casas decimais seguintes foram obtidas por tentativa e erro.

A energia de dissociação é mostrada na tabela (2.3). Na tabela (2.2) são comparados os níveis de energia obtidos com os diferentes modelos estudados neste trabalho. Os níveis de energia da molécula de CO obtidos por este método estão mostrados na figura (2.5) e os erros relativos dos primeiros níveis em relação aos dados experimentais estão mostrados na figura (2.6). Podemos observar que a AHG não-linear com o funcional dados pela equação (2.19) fornece um melhor ajuste com os dados experimentais do que o  $q$ -oscilador, o modelo de Morse e o Morse perturbado. Além disso, a AHG não-linear fornece a correta energia de dissociação, mostrando também que este pode ser um bom método para se obter os níveis de energia mais elevados da molécula do CO.

Como o parâmetro  $p$  é muito pequeno (tabela (2.1)), se  $\alpha_0$  for também pequeno, as primeiras iterações da equação (2.22) serão dominadas pelo termo linear. O termo não-linear torna-se relevante quando o número das iterações aumenta. A diferença entre dois níveis de energia sucessivos diminui até zero

na medida que a função dada pela equação (2.22) é iterada. Além do mais, o parâmetro  $p$  é negativo, o que faz com que a diferença entre dois níveis de energia sucessivos tenda a zero rapidamente. Assim, o termo não-linear faz a curva da energia tender a um valor constante mais rapidamente do que no caso linear, mas ligeiramente mais lento do que o modelo de Morse, como nós podemos ver na figura (2.5).

No quadro abaixo são sintetizadas as vantagens e desvantagens dos métodos utilizados no estudo de vibrações moleculares.

modelo	faixa do espectro	nº de parâmetros	cálculo
oscil. harmônico (OH)	estado fundamental	poucos	simples
OH perturbado	completo	muitos	difícil
q-oscilador	primeiros níveis	poucos	simples
AHG não-linear	completo	poucos	simples

Pode-se observar que, para a molécula utilizada neste trabalho, a AHG não-linear é o único método que concilia o bom ajuste em toda a extensão do espectro mantendo a simplicidade do cálculo e utilizando poucos parâmetros

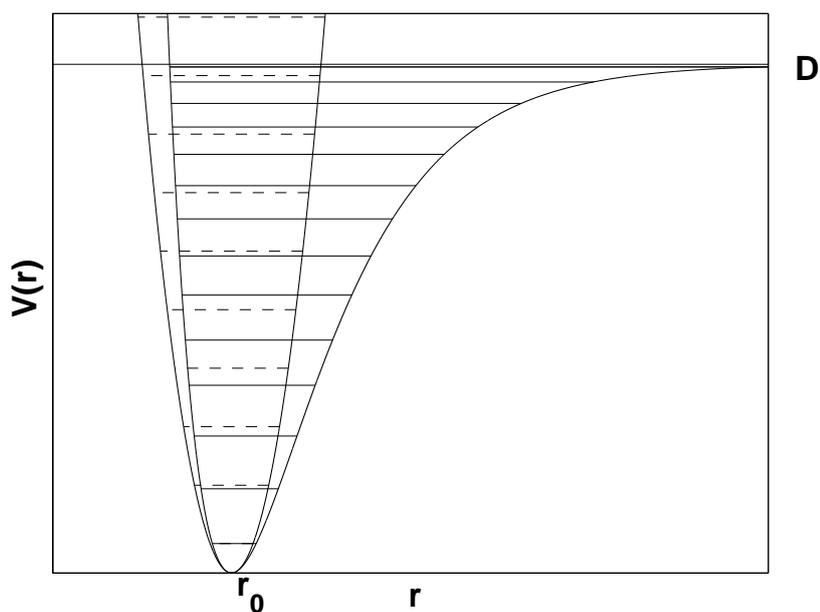


Figura 2.1: Níveis de energia para os potenciais de Morse (níveis em linhas cheias) e harmônico (níveis em linhas tracejadas). O eixo horizontal representa a posição nuclear relativa  $r$ . Note que os dois potenciais têm um valor mínimo em  $r = r_0$  e que o potencial de Morse tem uma energia de dissociação  $D$ .

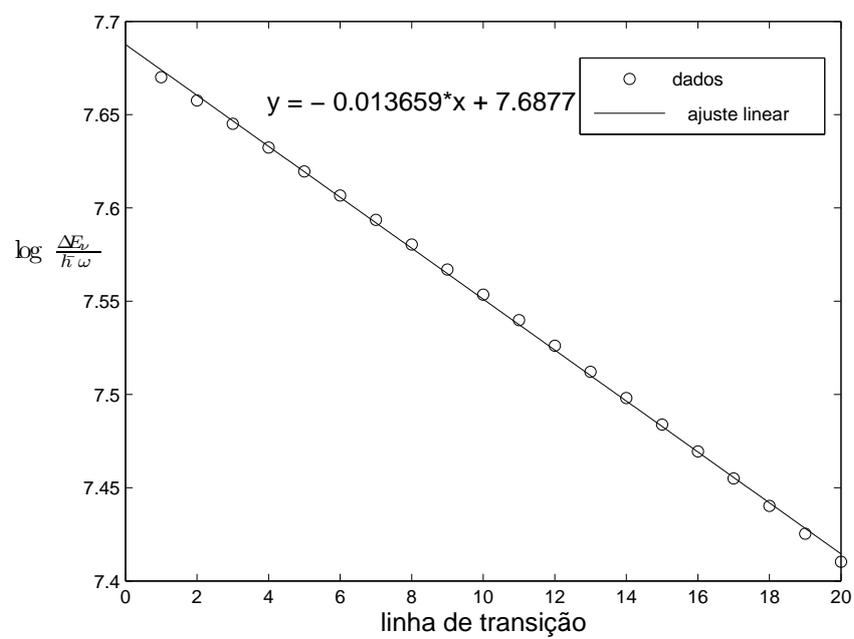


Figura 2.2: Ajuste do parâmetro  $q$  no caso caso linear, para as 20 primeiras transições vibracionais da molécula de CO.

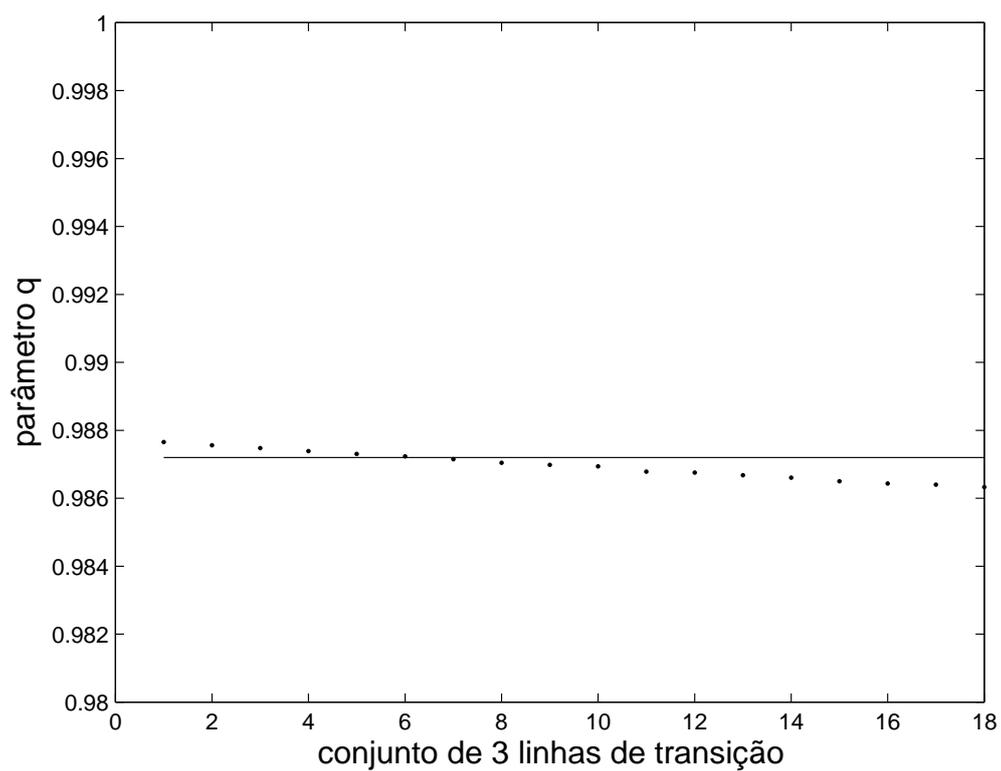


Figura 2.3: Ajuste do parâmetro  $q$  para o caso não-linear. Cada ponto do eixo horizontal representa 3 níveis de energia consecutivos e o valor de  $q$  nestes pontos é calculado pela equação (2.24)-(2.25). A linha horizontal representa o valor utilizado na equação (2.22), após o ajuste fino.

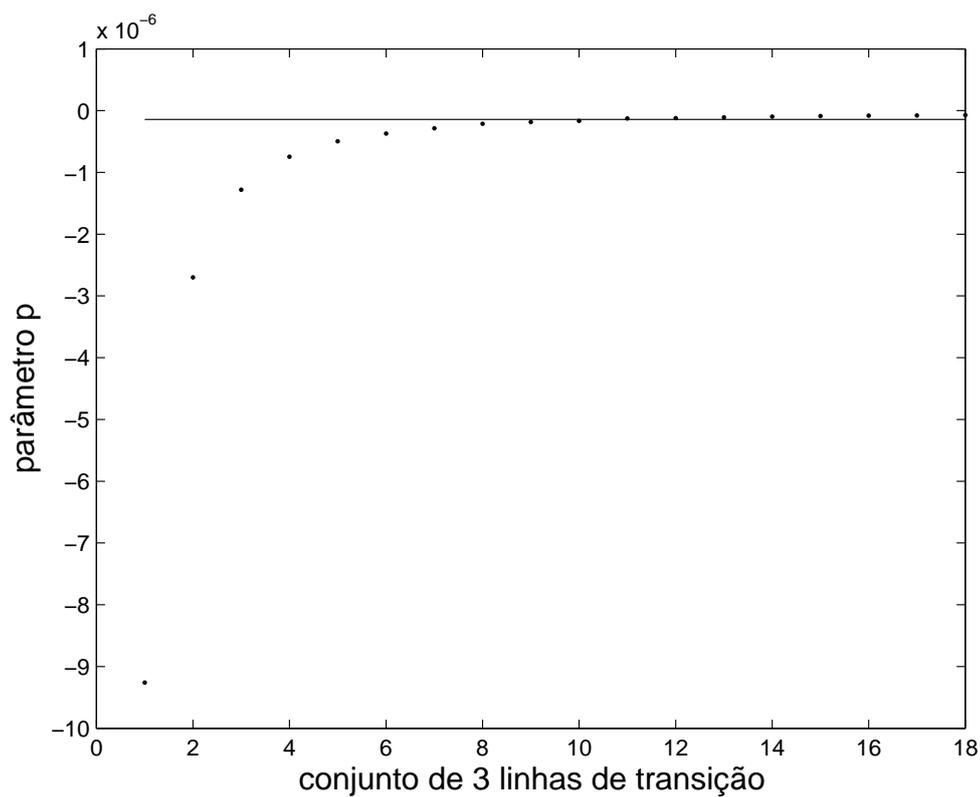


Figura 2.4: Ajuste do parâmetro  $p$  para o caso não-linear. Como anteriormente, cada ponto do eixo horizontal representa 3 níveis de energia consecutivos e o valor de  $p$  nestes pontos é calculado pela equação (2.24)-(2.25). A linha horizontal representa o valor utilizado na equação (2.22), após o ajuste fino.

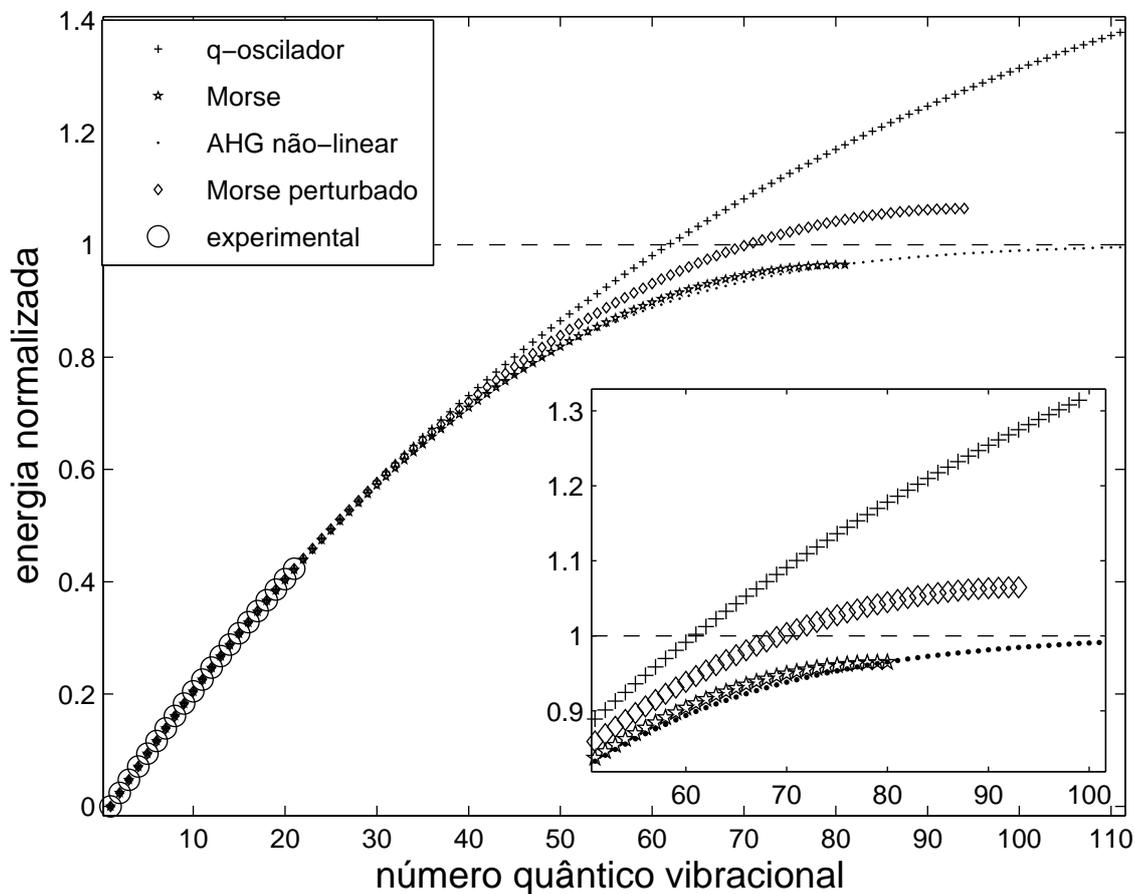


Figura 2.5: Espectros de energia normalizados e deslocados, gerados pelos modelos de Morse (\*),  $q$ -oscilador (+), AHG não-linear ( $\cdot$ ), Morse Perturbado ( $\diamond$ ) e dados experimentais ( $o$ ), para a molécula de CO. A linha tracejada representa o valor da energia de dissociação experimental. Pode-se ver que a energia de dissociação do modelo AHG não-linear está bastante próxima da energia de dissociação experimental (curva tracejada), enquanto a energia de dissociação do  $q$ -oscilador e modelo de Morse estão, respectivamente, acima e abaixo desta. Inserção (“*Inset*”): mostra em detalhe as curvas de energia para os modelos de Morse e AHG não-linear, próximas a linha da energia de dissociação (linha tracejada). Note que a curva de Morse satura antes de alcançar o valor experimental da energia de dissociação, enquanto a AHG não-linear se aproxima desta quando o nível de energia cresce.

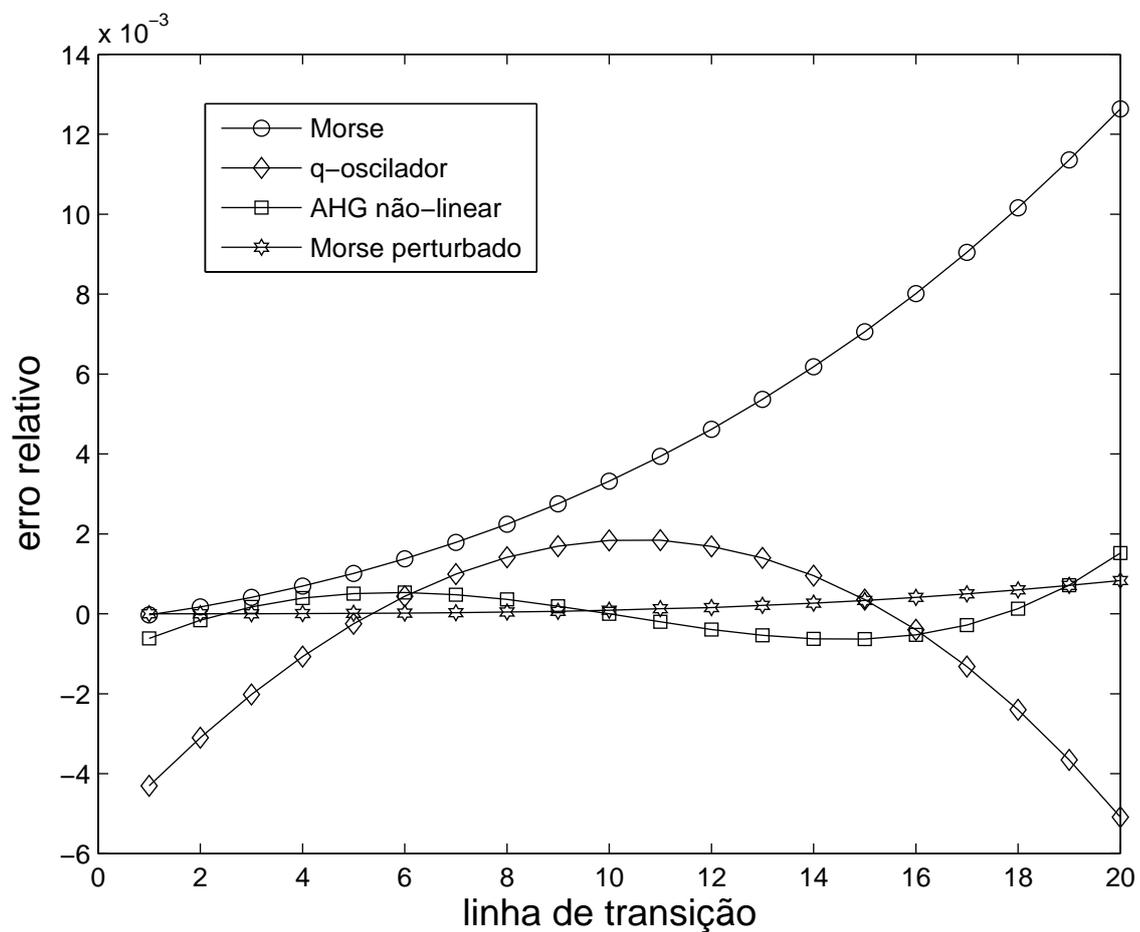


Figura 2.6: Comparação entre os erros relativos dos modelos de Morse ( $\circ$ ),  $q$ -oscilador ( $\diamond$ ), AHG não-linear ( $\square$ ) e o modelo de Morse perturbado com 7 parâmetros ajustados ( $\star$ ) com os valores experimentais para os 20 primeiros níveis da molécula de CO. Note-se que os erros da AHG são menores (em quase todos os pontos) do que os modelos de Morse e  $q$ -oscilador.

modelo	parâmetros	valores
Morse	$\chi_e$	0.0062
$q$ -oscilador (AHG linear)	$q$	0.9864
	$\alpha_0$	36.98
AHG não-linear	$\alpha_0$	0.9235
	$q$	0.9872
	$p$	$-1.43 \times 10^{-7}$
Morse perturbado (Huffaker)	$\sigma$	77.21317
	$\tau$	83769.28
	$b_4$	0.036067
	$b_5$	0.017505
	$b_6$	0.014945
	$b_7$	0.010770
	$b_8$	0.008142

Tabela 2.1: Valores dos parâmetros usados em cada modelo estudado neste trabalho. As constantes  $\sigma$  e  $\tau$  são dadas por  $\sigma = \frac{\sqrt{2\mu D}}{a\hbar}$  e  $\tau = \frac{D}{\hbar\omega}$ .

transição linha	energia( $cm^{-1}$ )				
	exp.	Morse	AHG-nl	AHG linear	Morse perturbado
1 → 0	2143.24	2143.30	2144.56	2152.46	2143.27
2 → 1	2116.76	2116.39	2117.10	2123.32	2116.79
3 → 2	2090.34	2089.48	2089.99	2094.57	2090.37
4 → 3	2064.00	2062.57	2063.19	2066.21	2064.02
5 → 4	2037.72	2035.66	2036.68	2038.23	2037.73
6 → 5	2011.51	2008.75	2010.44	2010.63	2011.51
7 → 6	1985.38	1981.84	1984.43	1983.41	1985.35
8 → 7	1959.32	1954.93	1958.62	1956.55	1959.26
9 → 8	1933.33	1928.01	1932.97	1930.06	1933.24
10 → 9	1907.43	1901.10	1907.43	1903.93	1907.29
11 → 10	1881.61	1874.19	1881.99	1878.15	1881.40
12 → 11	1855.85	1847.28	1856.58	1852.72	1855.59
13 → 12	1830.19	1820.37	1831.18	1827.63	1829.84
14 → 13	1804.61	1793.46	1805.74	1802.89	1804.16
15 → 14	1779.11	1766.55	1780.23	1778.48	1778.55
16 → 15	1753.69	1739.64	1754.61	1754.39	1753.00
17 → 16	1728.36	1712.73	1728.85	1730.64	1727.53
18 → 17	1703.12	1685.82	1702.90	1707.21	1702.13
19 → 18	1677.96	1658.91	1676.75	1684.09	1676.79
20 → 19	1652.88	1632.00	1650.37	1661.29	1651.53

Tabela 2.2: Espectro vibracional da molécula de CO. Comparação dos dados experimentais com os modelos de Morse,  $q$ -oscilador, Morse perturbados e AHG. Dados experimentais da base de dados HITRAN.

modelo	energia dissociação ( $cm^{-1}$ )
Experimental	89591.35
Morse	86426.44
$q$ -oscilador	158970.48
Morse perturbado ( ref. [51])	94476.01
Morse perturbado (ref. [58])	95394.23
AHG não-linear	89987.76

Tabela 2.3: Valores das energias de dissociação calculadas para cada modelo.

# Capítulo 3

## Algebra de Heisenberg

### Estendida: dois passos

#### 3.1 O porquê de uma álgebra de dois passos

Nos capítulos 1 e 2 foram estudados sistemas que podem ser descritos pela Álgebra de Heisenberg Generalizada (uma álgebra a um passo). Entretanto, há diversos sistemas que não podem ser descritos por esta classe de álgebras, como exemplo, podemos citar as estruturas quase-periódicas, que têm atraído muito interesse nos últimos tempos [73]. Em particular, as seqüências de Fibonacci (veja o apêndice C), as quais têm sido estudadas em diversas áreas da matemática e da física. Um gás de elétrons, por exemplo, sob aquecimento repentino, apresenta um regime de quase-equilíbrio com uma função de distribuição ( $dN/dE$ ) quase-periódica de energia [74]. Neste capítulo será apresentada uma estrutura algébrica que é capaz de gerar uma variedade ainda maior de espectros [75] do que a AHG, incluindo espectros periódicos e *quase*-periódicos. Será construída, por exemplo, uma álgebra do tipo Hei-

senberg para sistemas que apresentam espectros de energia descritos pela seqüência de Fibonacci generalizada. Estas seqüências podem também representar o espectro de sistemas físicos típicos, sendo que algumas delas não podem ser representadas através de uma álgebra de um passo (AHG).

Para realizar o objetivo, foi proposta uma estrutura algébrica simples, a qual depende de dois funcionais,  $f(x)$  e  $g(x)$ , estendendo o formalismo da AHG. Será introduzido o operador  $H$ , o Hamiltoniano do sistema<sup>1</sup>, cujos autovalores obedecem a uma equação de recorrência do tipo  $e_{n+1} = f(e_n, e_{n-1})$ , isto é, o autovalor do  $n$ -ésimo estado depende dos dois autovalores precedentes. Esta estrutura é chamada de *álgebra de Heisenberg generalizada a dois passos*. Para estender a álgebra de um passo descrita pela AHG, é introduzido um operador adicional  $J_3$ . Quando ambos os funcionais  $f(x)$  e  $g(x)$  que aparecem na álgebra de dois passos forem funções lineares, é possível reescrever os operadores  $H$  e  $J_3$  no espaço de Fock como funções de um único operador, o operador número usual,  $N$ . A AHG, a álgebra de  $q$ -osciladores e outras álgebras interessantes são casos especiais desta nova estrutura algébrica.

Na seção II é introduzida a álgebra de Heisenberg generalizada a dois passos. Na seção III é estudado o caso linear para a álgebra de dois passos, a qual contém espectros tipo Fibonacci e muitas outras seqüências interessantes. Também serão discutidas os tipos de representações que podem ser encontradas.

---

<sup>1</sup>Ao invés de chamar  $J_0$ , como foi feito nas equações (1.83)-(1.85), este operador será chamado, daqui em diante, de  $H$ , pois este é o operador Hamiltoniano.

## 3.2 Álgebra de Heisenberg estendida à dois-passos

A estrutura algébrica proposta neste trabalho é composta pelos operadores  $H$ ,  $J_3$ ,  $a^\dagger$  e  $a$ , com  $a = (a^\dagger)^\dagger$ , sendo os operadores de passos,  $H = (H)^\dagger$ , o Hamiltoniano e  $J_3 = (J_3)^\dagger$ , os quais obedecem as seguintes relações:

$$\left\{ \begin{array}{l} Ha^\dagger = a^\dagger(f(H) + J_3); \end{array} \right. \quad (3.1)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} aH = (f(H) + J_3)a; \end{array} \right. \quad (3.2)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} J_3a^\dagger = a^\dagger g(H); \end{array} \right. \quad (3.3)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} aJ_3 = g(H)a; \end{array} \right. \quad (3.4)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} [a, a^\dagger] = f(H) - H + J_3; \end{array} \right. \quad (3.5)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} [H, J_3] = 0, \end{array} \right. \quad (3.6)$$

onde é assumido que  $f(x)$  e  $g(x)$  são funções analíticas. A representação desta estrutura algébrica no espaço de Fock, tem o estado de vácuo normalizado  $|0\rangle$  definido pelas relações:

$$a|0\rangle = 0; \quad (3.7)$$

$$H|0\rangle = \alpha_0|0\rangle; \quad (3.8)$$

$$J_3|0\rangle = \beta_0|0\rangle, \quad (3.9)$$

onde  $\alpha_0$  e  $\beta_0$  são números reais. Um operador de Casimir associado com estas relações algébricas é:

$$C^{(1)} = aa^\dagger - f(H) - J_3 = a^\dagger a - H, \quad (3.10)$$

satisfazendo às seguintes relações:

$$[C^{(1)}, a^\dagger] = [C^{(1)}, a] = [C^{(1)}, H] = [C^{(1)}, J_3] = 0. \quad (3.11)$$

### 3.2.1 Teoria da Representação

O ponto de partida de uma teoria da representação para a estrutura algébrica dada pelas equações (3.1)-(3.6), é o estado de vácuo definido pelas relações (3.7)-(3.9). O operador  $a^\dagger$  age no estado de vácuo produzindo outro vetor, digamos  $|k\rangle$ . Assim teremos:

$$a^\dagger|0\rangle = |k\rangle$$

e

$$\langle k|a = \langle 0|.$$

Com estas relações, não é difícil mostrar que o vetor novo  $|k\rangle$  é ortogonal ao vetor que representa o vácuo  $|0\rangle$ , uma vez que

$$\langle k|0\rangle = \langle 0|a|0\rangle = 0.$$

Nomeando o novo estado como  $|k\rangle = N_0|1\rangle$ , a constante  $N_0$  pode ser determinada fazendo o produto interno de  $|k\rangle$  com seu dual e o usando-se a relação (3.5):

$$\langle k|k\rangle = \langle 0|aa^\dagger|0\rangle = \langle 0|a^\dagger a + f(H) - H + J_3|0\rangle \Rightarrow N_0^2 = f(\alpha_0) - \alpha_0 + \beta_0. \quad (3.12)$$

Para determinar o autovalor de  $H$  no estado  $|1\rangle$ , usa-se a equação (3.1):

$$H|1\rangle \equiv \alpha_1|1\rangle = (f(\alpha_0) + \beta_0)|1\rangle. \quad (3.13)$$

Da mesma maneira que  $H$ , pode-se calcular o autovalor de  $J_3$  usando a equação (3.3):

$$J_3|1\rangle \equiv \beta_1|1\rangle \Rightarrow J_3 \frac{a^\dagger}{N_0}|0\rangle = \frac{a^\dagger}{N_0}g(H)|0\rangle = g(\alpha_0)|1\rangle, \quad (3.14)$$

conseqüentemente, obtém-se  $\beta_1 = g(\alpha_0)$ . De maneira geral, pode-se provar por indução as seguintes relações:

$$H|n\rangle = \alpha_n|n\rangle; \quad (3.15)$$

$$J_3|n\rangle = \beta_n|n\rangle; \quad (3.16)$$

$$a^\dagger|n\rangle = N_n|n+1\rangle; \quad (3.17)$$

$$a|n\rangle = N_{n-1}|n-1\rangle, \quad (3.18)$$

onde:

$$\alpha_{n+1} = f(\alpha_n) + \beta_n; \quad (3.19)$$

$$\beta_{n+1} = g(\alpha_n); \quad (3.20)$$

$$\begin{aligned} N_{n+1}^2 &= N_n^2 + f(\alpha_{n+1}) - \alpha_{n+1} + \beta_{n+1} \\ &= \alpha_{n+2} - \alpha_0. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Combinando as equações (3.19) e (3.20), a dependência de autovalor  $H$  com dois autovalores antecessores (dois passos) torna-se clara:

$$\alpha_{n+1} = f(\alpha_n) + g(\alpha_{n-1}), \quad (3.22)$$

onde  $\alpha_0 \leq \alpha_n$ , para todo  $n > 0$ . Escolhendo diferentes funções e diferentes valores iniciais para  $\alpha_0$  e  $\beta_0$ , é possível construir diferentes representações para esta estrutura matemática no espaço de Fock. Os operadores  $H$ ,  $J_3$ ,  $a^\dagger$

e  $a$  podem ser representados matricialmente como:

$$\begin{aligned}
 H &= \begin{pmatrix} \alpha_0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \alpha_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \alpha_2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \alpha_3 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, & J_3 &= \begin{pmatrix} \beta_0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \beta_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \beta_2 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \beta_3 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \\
 a^\dagger &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ N_0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & N_1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & N_2 & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, & a &= (a^\dagger)^\dagger. \tag{3.23}
 \end{aligned}$$

Na seção seguinte, será estudado o caso onde  $f(x)$  e  $g(x)$  são funções lineares.

### 3.3 O Caso Linear - Álgebra de Fibonacci Generalizada

Se for assumido que  $f(x) = rx$  e  $g(x) = sx$  ( $r, s \in \mathbb{R}$ ), as equações (3.1)-(3.6) reduzem-se a:

$$Ha^\dagger = a^\dagger(rH + J_3); \tag{3.24}$$

$$aH = (rH + J_3)a; \tag{3.25}$$

$$J_3a^\dagger = sa^\dagger H; \tag{3.26}$$

$$aJ_3 = sHa; \tag{3.27}$$

$$[a, a^\dagger] = (r - 1)H + J_3. \tag{3.28}$$

Usando as equações (3.19) e (3.20) obtém-se:

$$\beta_{n+1} = s\alpha_n. \quad (3.29)$$

$$\alpha_{n+1} = r\alpha_n + \beta_n = r\alpha_n + s\alpha_{n-1}. \quad (3.30)$$

A equação de recorrência (3.30) é uma equação de diferenças (ou mapa) que gera de uma seqüência de Fibonacci generalizada [76, 77]. Assim, a seqüência de autovalores do operador  $H$  segue uma seqüência de Fibonacci generalizada. As equações (3.29) e (3.30) podem ser escritas como um mapa linear bidimensional, o qual é mais adequado para se analisar a teoria da representação da álgebra. Este mapa pode ser escrito como:

$$\begin{pmatrix} \alpha_{n+1} \\ \beta_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r & 1 \\ s & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_n \\ \beta_n \end{pmatrix}. \quad (3.31)$$

No trabalho da referência [9], os autores analisaram a teoria da representação da AHG a um passo usando técnicas da teoria de sistemas dinâmicos. As representações foram obtidas através da análise de estabilidade dos pontos-fixos e dos ciclos da equação  $\alpha_{n+1} = f(\alpha_n)$ . Neste trabalho, a técnica utilizada em [9] será estendida para a álgebra de dois passos (3.1)-(3.6). Assim, será analisada a estabilidade dos pontos-fixos do sistema bidimensional da equação (3.31).

### 3.3.1 Análise de Estabilidade e Teoria da Representação

Os pontos-fixos da equação (3.31) podem ser encontrados resolvendo o sistema:

$$\begin{pmatrix} \alpha^* \\ \beta^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r & 1 \\ s & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha^* \\ \beta^* \end{pmatrix}. \quad (3.32)$$

As soluções da equação precedente são: (i)  $(\alpha^*, \beta^*) = (0, 0) \forall r, s \in \mathbb{R}$  e (ii)  $(\alpha^*, \beta^*) = (\alpha^*, s\alpha^*)$  para  $r + s = 1$ , onde  $r, s$  e  $\alpha^* \in \mathbb{R}$ .

A estabilidade destes pontos-fixos é dada pelos autovalores da matriz  $2 \times 2$  da equação (3.32) (veja apêndice D), os quais podem ser calculadas por meio da equação característica,  $\lambda^2 - r\lambda - s = 0$ . Estes autovalores são independentes de um ponto específico no espaço  $(\alpha, \beta)$ , pois a equação de recorrência dada pela fórmula (3.31) é linear, e podem ser escritos como:

$$\lambda_{\pm} = \frac{r \pm \sqrt{r^2 + 4s}}{2}. \quad (3.33)$$

As principais possibilidades são:

1. o ponto fixo  $(\alpha^*, \beta^*)$  é assintoticamente estável se  $|\lambda_{\pm}| < 1$ ; um ponto inicial  $(\alpha_0, \beta_0)$ , iterado usando a equação (3.31), se aproxima de  $(\alpha^*, \beta^*)$  quando o número das iterações aumenta;
2. se pelo menos um dos autovalores for, em módulo, maior do que um, o ponto fixo  $(\alpha^*, \beta^*)$  é instável e as iterações de um ponto inicial  $(\alpha_0, \beta_0)$ , através da equação (3.31), levam este ponto longe do ponto fixo;
3. se ambos os autovalores forem, em módulo, igual a um - a borda  $BC$  na figura (3.1) - o ponto fixo  $(\alpha^*, \beta^*) = (0, 0)$  é marginalmente estável. As iterações de um ponto inicial no espaço  $(\alpha, \beta)$  não se afastarão para longe do ponto-fixo, mas também se aproximarão muito deste, quando o número de iterações aumenta.

Na figura (3.1) são mostradas as regiões de estabilidade dos pontos-fixos  $(\alpha^*, \beta^*) = (0, 0)$  e  $(\alpha^*, \beta^*) = (\alpha^*, s\alpha^*)$  no espaço dos parâmetro  $(r, s)$ .

Quando  $r + s \neq 1$ , o ponto-fixo  $(\alpha^*, \beta^*) = (0, 0)$  é o único ponto-fixo no espaço  $(\alpha, \beta)$ . Este ponto é assintoticamente estável para valores de  $r$  e de

$s$  dentro do triângulo  $ABC$  e instável para valores de  $r$  e de  $s$  fora deste triângulo. Sobre a borda  $BC$  o ponto é marginalmente estável. Finalmente, na borda  $AB$ , linha tracejada da figura (3.1), onde um autovalor ( $\lambda_-$ ) é sempre igual a  $-1$  e o outro ( $\lambda_+$ ) é igual a  $1 + r$  ( $r \in [-2, 0]$ ), a iteração de qualquer ponto inicial  $(\alpha_0, \beta_0)$  se aproximará de um ciclo dois, com a linha que os une cruzando o ponto-fixo  $(0, 0)$  no espaço  $(\alpha, \beta)$ , a cada iteração.

Se  $r + s = 1$ , a linha pontilhada na figura (3.1), há uma linha de pontos-fixos no espaço  $(\alpha, \beta)$ ,  $(\alpha^*, \beta^*) = (\alpha^*, (1 - r)\alpha^*)$  com  $\alpha^* \in \mathbb{R}$ . Todos estes pontos fixos são instáveis se na linha  $r + s = 1$  os valores de  $r$  forem  $r < 0$  ou  $r > 2$ , isto é, são instáveis para pontos que estão nesta linha, mas estão fora da borda  $AC$  (ver figura 3.1). Para os pontos  $(r, s)$  nesta linha que estão sobre a borda  $AC$ , os autovalores associados são  $\lambda_+ = +1$  e  $\lambda_- = r - 1$ , com  $r \in [0, 2]$ . Os pontos-fixos no espaço  $(\alpha, \beta)$  serão  $(\alpha^*, \beta^*) = (\alpha^*, (1 - r)\alpha^*)$  e são estáveis em um sentido, cruzando a linha de pontos fixos, associados com o autovalor  $\lambda_- = r - 1$ ,  $r \in (0, 2)$ . O sentido ao longo da linha de pontos fixos é marginalmente estável, e está associado com o autovalor  $\lambda_+ = +1$ .

Para o caso linear, os valores possíveis de  $\alpha_0$  e  $\beta_0$  para as representações da álgebra, dados os valores dos parâmetros<sup>2</sup>  $r$  e  $s$ , serão apresentados na seção (3.4.1). Se o mapa bidimensional, dado pelas equações (3.29)-(3.30), tem um ponto fixo instável (isto é, se os valores de  $r$  e  $s$  estiverem fora do triângulo de figura (3.1)), as representações possíveis têm dimensão infinita e os espectros correspondentes não possuem um limite superior; a diferença entre dois números consecutivos na seqüência correspondente aumenta, quando o número das iterações aumenta. Se este mapa tiver um ponto fixo assintoticamente estável (isto é, se os valores de  $r$  e  $s$  estiverem dentro do triângulo

---

<sup>2</sup> Ou, equivalentemente, os valores de  $\lambda_+$  e  $\lambda_-$ , mostrados na figura (3.2)

de figura (3.1)), as representações possíveis são também de dimensão infinita, mas têm espectro com um limite superior: a diferença entre dois números consecutivos na seqüência correspondente diminui quando número de iterações aumenta. As representações associadas com os casos marginalmente estáveis são mais complexas e, além das representações de dimensão infinita, são também possíveis representações de dimensão finito. Na seção (3.4.1) serão discutidos os valores possíveis de  $\alpha_0$  e  $\beta_0$  para estas representações.

### 3.3.2 Séries de Fibonacci

Quando  $r = s = 1$  a equação (3.30) torna-se:

$$\alpha_{n+1} = \alpha_n + \alpha_{n-1}, \quad (3.34)$$

a qual gera seqüência de Fibonacci usual se os valores iniciais forem escolhidos com  $(\alpha_0, \beta_0) = (1, 0)$ . Os autovalores da equação (3.33) para as séries de Fibonacci são  $\lambda_{\pm} = (1 \pm \sqrt{5})/2$ . O autovalor  $\lambda_+ (> 1)$  é o conhecido “número de ouro”. O único ponto-fixo  $(\alpha^*, \beta^*) = (0, 0)$  é, conseqüentemente, instável. As representações têm dimensão infinita e as seqüências, dependendo dos valores iniciais  $(\alpha_0, \beta_0)$ , aumentam sem um limite superior, como é conhecido. Os valores específicos de  $\alpha_0$  e  $\beta_0$  que descrevem as representações possíveis para este caso serão discutidos na seção seguinte. Os valores de  $\alpha_n$  e de  $\beta_n$  para  $r = s = 1$  são mostrados na tabela 3.1. Os autovalores  $\alpha_n$  e  $\beta_n$  fornecem o número dos elementos do tipo “A” e “B” respectivamente, na  $n$ -ésima iteração da cadeia de Fibonacci (figura 3.3). Assim, o operador  $a^\dagger$  age como um “operador inflação” da cadeia de Fibonacci, enquanto os autovalores de  $H$  fornecerem o número de elementos da cadeia quase-periódica gerada na  $n$ -ésima inflação. Um outro exemplo é o da cadeia tipo Fibonacci da figura

3.4, onde  $r = 2$  e  $s = 1$ , sendo os autovalores relacionados ao chamado “número-de-prata”.

### 3.4 Espaço de Fock da Álgebra de Heisenberg a Dois Passos

A série de Fibonacci generalizada da equação (3.30) pode ser escrita por meio da chamada fórmula de Binet [76, 77] (veja apêndice C):

$$\alpha_n = \alpha_0 \frac{p^{n+1} - q^{n+1}}{p - q} + \beta_0 \frac{p^n - q^n}{p - q} \quad (3.35)$$

$$\equiv \alpha_0 [n + 1]_{p,q} + \beta_0 [n]_{p,q}, \quad (3.36)$$

onde  $(p, q) \equiv (\lambda_+, \lambda_-)$  são as raízes da equação (3.33),  $n \geq 1$  e  $[n]_{p,q} = \frac{p^n - q^n}{p - q}$  é o número deformado bi-paramétrico ( $p, q$ -number) [36]. Como  $H$  é o Hamiltoniano, a escolha de  $\beta_0$  não está completamente livre uma vez que deve-se garantir que  $\alpha_n \geq \alpha_0$  para o todo  $n > 0$ , ou seja, a energia do estado fundamental deve ser a menor. Esta condição implica que, uma vez que o valor de  $\alpha_0$  tinha sido escolhido, os valores permitidos de  $\beta_0$  devem satisfazer a relação;

$$\beta_0 [n]_{p,q} \geq (1 - [n + 1]_{p,q}) \alpha_0, \quad (3.37)$$

para qualquer valor de  $n$  ( $n > 0$ ). Em particular, se  $[n]_{p,q} > 0$  para todo  $n > 0$ , a condição a ser satisfeita por  $\beta_0$  pode ser escrita como:

$$\beta_0 \geq \frac{1 - [n + 1]_{p,q}}{[n]_{p,q}} \alpha_0, \quad (3.38)$$

para qualquer valor de  $n$  ( $n > 0$ ). A solução completa para  $\beta_0$ , para o espaço de parâmetros  $(\alpha, \beta)$  completo, será descrita na seção (3.4.1). Para o caso

específico da cadeia de Fibonacci ( $r = s = 1$ ) é fácil ver que o termo  $(1 - [n + 1]_{p,q})/[n]_{p,q}$  varia de  $-(1 + \sqrt{5})/2$  até 0. Assim,  $\alpha_0 \geq 0$  implica  $\beta_0 \geq 0$  e  $\alpha_0 < 0$  implica que  $\beta_0 \geq ((1 + \sqrt{5})/2)|\alpha_0|$ .

É possível mostrar também que existe um outro operador de Casimir  $C^{(2)}$  quando  $f(x)$  e  $g(x)$  forem funções lineares:

$$C^{(2)} = aa^\dagger - \alpha_0([N + 2]_{p,q} - 1) - \beta_0([N + 1]_{p,q} - 1), \quad (3.39)$$

onde  $[N]_{p,q} = \frac{p^N - q^N}{p - q}$  é o operador número deformado a dois parâmetros e  $N$  é o operador número usual, definido no espaço de Fock como:

$$N|n\rangle = n|n\rangle. \quad (3.40)$$

Usando a equação (3.35), é possível reduzir a estrutura algébrica (3.24)-(3.28) a uma estrutura tipo Heisenberg composta pelos operadores usuais  $A$ ,  $A^\dagger$  e  $N$ . Usando a equação (3.35),  $H$  pode ser escrito no espaço de Fock como:

$$H \rightarrow \alpha_0 \frac{p^{N+1} - q^{N+1}}{p - q} + \beta_0 \frac{p^N - q^N}{p - q}, \quad (3.41)$$

e, usando a equação (3.29),  $J_3$  pode ser escrito como:

$$J_3 \rightarrow s \left( \alpha_0 \frac{p^N - q^N}{p - q} + \beta_0 \frac{p^{N-1} - q^{N-1}}{p - q} \right). \quad (3.42)$$

Note que o efeito da aplicação de  $H$  e de  $J_3$  em  $|n\rangle$  é exatamente o mesmo da aplicação das equações (3.41) e (3.42) sobre  $|n\rangle$ . Substituindo  $H$  e  $J_3$  na equação (3.28) pelas relações (3.41) e (3.42) e usando as equações (3.17),

(3.18) e (3.40), obtém-se:

$$[N, a^\dagger] = a^\dagger, \quad (3.43)$$

$$[N, a] = -a, \quad (3.44)$$

$$\begin{aligned} [a, a^\dagger] &= (r-1)(\alpha_0[N+1]_{p,q} + \beta_0[N]_{p,q}) + \\ &+ s(\alpha_0[N]_{p,q} + \beta_0[N-1]_{p,q}). \end{aligned} \quad (3.45)$$

A estrutura algébrica acima é a representação da Álgebra de Heisenberg generalizada a dois passos (linearizada) no espaço de Fock. Note que a estrutura algébrica descrita pelas equações (3.24)-(3.28) corresponde as equações (3.43)-(3.45) mais o Hamiltoniano  $H = \alpha_0[N+1]_{p,q} + \beta_0[N]_{p,q}$ , cujos autovalores seguem a seqüência generalizada de Fibonacci.

Lembrando que  $p.q = -s$  e  $p+q = r$  ( $p$  e  $q$  são raízes da  $x^2 - rx - s = 0$ ), o lado direito da equação (3.45) pode ser escrito como:

$$(p+q-1)(\alpha_0[N+1]_{p,q} + \beta_0[N]_{p,q}) - pq(\alpha_0[N]_{p,q} + \beta_0[N-1]_{p,q}). \quad (3.46)$$

Após um pouco de álgebra, a equação (3.45) pode ser escrita como:

$$[a, a^\dagger] = \alpha_0([N+2]_{p,q} - [N+1]_{p,q}) + \beta_0([N+1]_{p,q} - [N]_{p,q}). \quad (3.47)$$

Se fazemos  $\alpha_0 = 0$  e  $\beta_0 = 1$  na equação (3.47), as equações (3.43)-(3.44) e (3.47) se reduzem as equações (1.66)-(1.67) e (1.72), ou seja, o oscilador deformado bi-paramétrico, introduzido na referência [36] e aplicado em espectroscopia nuclear [78]. Para, o caso em que  $r = 1$  e  $s = 1$ , a estrutura algébrica proposta aqui é similar ao “Oscilador de Fibonacci“, proposto na referência [79], o qual também tem os autovalores do operador Hamiltoniano dado pelos números de Fibonacci. Assim, os autovalores do operador  $H$  do

oscilador deformado bi-paramétrico podem ser escritos como um caso particular dos números de Fibonacci generalizados, com as “condições iniciais”  $\alpha_0 = 0$  e  $\beta_0 = 1$ . Na “álgebra estendida” proposta neste trabalho [75], para o caso linear, os autovalores de  $H$  são dados pelos números de Fibonacci generalizados, onde os valores iniciais  $\alpha_0$  e  $\beta_0$  podem assumir qualquer valor desde que  $\alpha_0 \leq \alpha_n$  para qualquer  $n > 0$ . Assim, cada conjunto de valores iniciais  $(\alpha_0, \beta_0)$  define uma nova representação.

### 3.4.1 Análise dos valores permitidos de $\alpha_0$ e $\beta_0$ .

Nesta seção serão discutidas as representações associadas ao caso linear da AHG. Para classificar os valores possíveis de  $\alpha_0$  e de  $\beta_0$  de acordo com o valor dos autovalores  $\lambda_+$  (ou  $p$ ) e  $\lambda_-$  (ou  $q$ ) o plano  $(\lambda_-, \lambda_+)$  foi dividido em regiões, rotuladas pelos números *I, II, III, IV, V, VI* e *VII*, como mostrado na figura 3.2. Como, por definição,  $\lambda_+ \geq \lambda_-$ , somente o semi-plano igual e acima da linha diagonal a  $45^\circ$  neste plano tem sentido. As representações da álgebra estendida podem ser obtidas fornecendo os valores de  $\alpha_0$  e  $\beta_0$  que satisfazem as condições dadas pelas equações (3.37) e (3.38). Analisando estas equações para as regiões rotuladas por *I* a *VII* na figura 3.2, é possível obter representações para a álgebra estendida desde que  $\alpha_0$  e  $\beta_0$  satisfaçam as seguintes condições (os resultados para regiões *IV, VI* e *VII* são numéricos):

Região I:  $\lambda_+ > 1$  e  $-1 \leq \lambda_- \leq \lambda_+$

a) se  $\alpha_0 \geq 0 \rightarrow \beta_0 \geq (1 - \lambda_+ - \lambda_-)\alpha_0$

b) se  $\alpha_0 < 0 \rightarrow \beta_0 \geq \lambda_+|\alpha_0|$

Região II:  $0 < \lambda_+ < 1$  e  $-\lambda_+ < \lambda_- < \lambda_+$

$\alpha_0 \leq 0 \rightarrow \beta_0 \geq (\lambda_+ + \lambda_- - 1)|\alpha_0|$

Região III:  $-1 < \lambda_+ < 1$  e  $-1 < \lambda_- < \min(-\lambda_+, \lambda_+)$

$$\alpha_0 = 0 \text{ e } \beta_0 \geq 0$$

Região IV:  $\lambda_+ > 1$  e  $-\lambda_+ < \lambda_- < -1$

a) se  $\alpha_0 \geq 0 \rightarrow \beta_0 \geq (1 - \lambda_+ + |\lambda_-|)\alpha_0$

b) se  $\alpha_0 < 0 \rightarrow \beta_0 \geq \left(\frac{\lambda_+^2 + |\lambda_-|^2 - \lambda_+|\lambda_-| - 1}{\lambda_+ - |\lambda_-|}\right)|\alpha_0|$

Região V:  $0 < \lambda_+ < -\lambda_-$  e  $\lambda_- < \min(-\lambda_+, -1)$

Nesta região não há uma solução analítica geral para os valores de  $\alpha_0$  e  $\beta_0$  e as possíveis representações devem ser encontradas caso à caso.

Região VI:  $\lambda_- < \lambda_+ < 0$  e  $\lambda_- < \min(-1, \lambda_+)$

a) se  $\alpha_0 \geq 0 \rightarrow \beta_0 \geq (1 + |\lambda_+| + |\lambda_-|)\alpha_0$

b) se  $\alpha_0 < 0 \rightarrow \beta_0 \geq \left(\frac{\lambda_+^2 + \lambda_-^2 - |\lambda_+||\lambda_-| - 1}{|\lambda_-| - |\lambda_+|}\right)|\alpha_0|$

Região VII:  $\lambda_+ < -1$ ,  $\lambda_- < -1$  e  $|\lambda_-| > |\lambda_+|$ .

a) se  $\alpha_0 \geq 0 \rightarrow \beta_0 \geq (1 + |\lambda_+| + |\lambda_-|)\alpha_0$

b) se  $\alpha_0 < 0 \rightarrow \beta_0 \geq -|\lambda_-||\alpha_0|$

As possíveis expressões para  $\alpha_0$  e  $\beta_0$  pertencentes às fronteiras entre estas regiões são as seguintes:

i) Fronteira entre as regiões *I* e *II*:

$$\beta_0 \geq -\lambda_- \alpha_0 \text{ for } \alpha_0 \in \Re$$

ii) Fronteira entre as regiões *I* e *IV*:

As mesmas expressões para  $\alpha_0$  e  $\beta_0$  permitidas para a região *I* com  $\lambda_- = -1$ .

iii) Fronteira entre as regiões *II* e *III*:

As mesmas expressões para  $\alpha_0$  e  $\beta_0$  permitidas para a região *III* com

$$\lambda_- = -\lambda_+.$$

iv) Fronteira entre as regiões *IV* e *V*:

$$\beta_0 \geq \alpha_0.$$

v) Fronteira entre as regiões *V* e *VI*:

As mesmas expressões para  $\alpha_0$  e  $\beta_0$  permitidas para a região *VI* com  $\lambda_+ = 0$ .

vi) Fronteira entre as regiões *III* e *V*:

a) Se  $\alpha_0 \geq 0 \rightarrow \beta_0 \geq (2 + \lambda_+) \alpha_0$

b) Se  $\alpha_0 < 0 \rightarrow \beta_0 \geq \lambda_+ |\alpha_0|$ .

vii) Fronteira entre as regiões *III* e *VI*:

As mesmas expressões para  $\alpha_0$  e  $\beta_0$  permitidas para a região *VI* com  $\lambda_- = -1$ .

viii) Fronteira entre as regiões *VI* e *VII*:

As mesmas expressões para  $\alpha_0$  e  $\beta_0$  permitidas para a região *VI* com  $\lambda_+ = -1$ .

### 3.5 Comentários Finais

A estrutura algébrica apresentada neste trabalho, abre a possibilidade de se abordar algebricamente sistemas que apresentam os mais variados espectros, inclusive aqueles que não podem ser gerados pela AHG a um passo (como espectros tipo Fibonacci). Diferentes espectros podem gerados por diferentes escolhas das funções características, ou diferentes parâmetros de funções características particulares. A figura (3.5) ilustra bem este fato. Nesta são apresentados espectros que podem ser gerados a partir da escolha de diferentes parâmetros das funções lineares  $f(x) = r x$  e  $g(x) = s x$ , correspondentes

a diferentes regiões do espaço de parâmetros da  $(r, s)$  da figura (3.1) (ou equivalentemente, do espaço  $(\lambda_+, \lambda_-)$  figura da (3.2)). Assim, como no caso da AHG a-um-passo, espectros complexos podem ser descritos com a simples interação de duas equações de recorrência, sem o uso de métodos perturbativos e com poucos parâmetros. As características gerais do espectro podem ser prevista pela análise de estabilidade das equações de recorrência no espaço dos parâmetros das funções características.

$n$	$\beta_n = \alpha_{n-1}$	$\alpha_n = \alpha_{n-1} + \beta_{n-1}$
0	$\beta_0$	$\alpha_0$
1	$\alpha_0$	$\alpha_0 + \beta_0$
2	$\alpha_0 + \beta_0$	$2\alpha_0 + \beta_0$
3	$2\alpha_0 + \beta_0$	$3\alpha_0 + 2\beta_0$
4	$3\alpha_0 + 2\beta_0$	$5\alpha_0 + 3\beta_0$

Tabela 3.1: Autovalores dos operadores  $H$  e  $J_3$  quando  $r = s = 1$ .

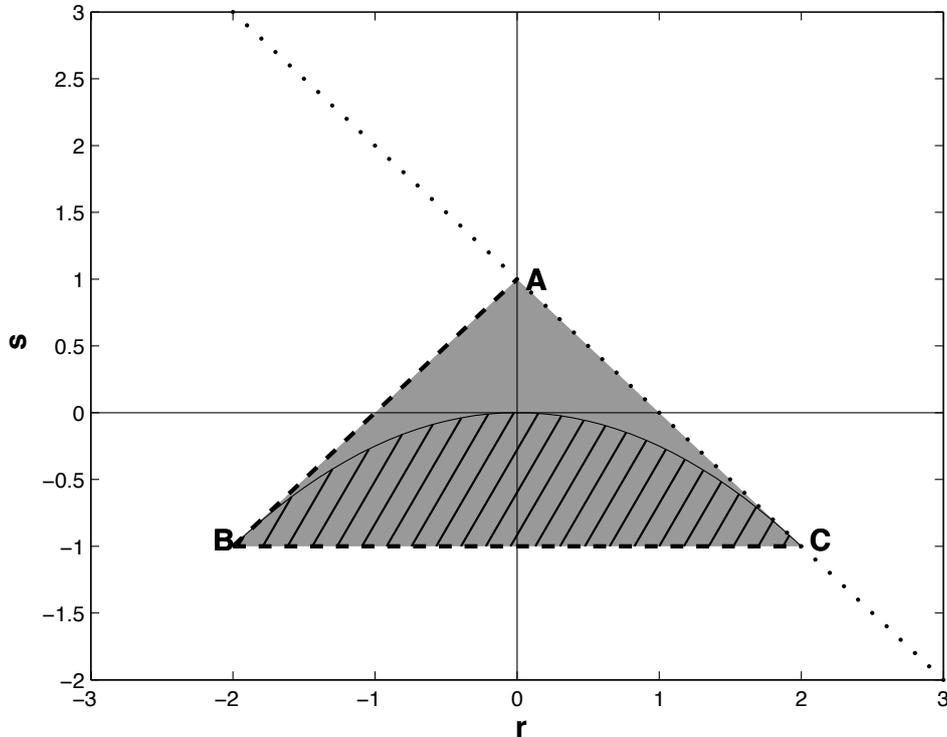


Figura 3.1: Regiões de estabilidade no espaço dos parâmetros  $(r, s)$ . A região assintoticamente estável do ponto-fixo  $(\alpha = 0, \beta = 0)$ , i.e.,  $|\lambda_{\pm}| < 1$ , está dentro do triângulo  $ABC$  (bordas não incluídas). Fora do triângulo  $ABC$  o ponto-fixo  $(0, 0)$  no espaço  $(\alpha, \beta)$  é estável (pelo menos um dos autovalores tem módulo maior do que um). A área hachurada corresponde a região assintoticamente estável onde os autovalores são complexos. A região marginalmente estável do ponto-fixo  $(0, 0)$  está sobre a linha tracejada. Sobre a fronteira  $BC$  ambos autovalores  $\lambda_{\pm}$  são complexos com módulo unitário. A linha pontilhada é a região do espaço dos parâmetros onde é permitida a existência de pontos-fixos  $(\alpha^*, s\alpha^*)$  no espaço  $(\alpha, \beta)$ . Estes pontos-fixos são marginalmente estáveis para valores dos parâmetros  $(r, s)$  sobre a fronteira  $AC$  e instáveis fora do intervalo  $AC$ . Os autovalores nos pontos  $A$ ,  $B$ , e  $C$  são, respectivamente,  $(1, -1)$ ,  $(-1, -1)$  e  $(1, 1)$ .



$$\overline{A \rightarrow AB \rightarrow ABA \rightarrow ABAABA \rightarrow ABAABAABA \rightarrow \dots}$$

Figura 3.3: Uma cadeia de Fibonacci. A regra de substituição para construir esta cadeia é:  $A \rightarrow AB$  e  $B \rightarrow A$ .

$$\overline{A \rightarrow ABA \rightarrow ABAAABA \rightarrow ABAAABAABAABAABA \rightarrow \dots}$$

Figura 3.4: Uma cadeia tipo Fibonacci. A regra de substituição para construir esta cadeia é:  $A \rightarrow ABA$  e  $B \rightarrow A$ .

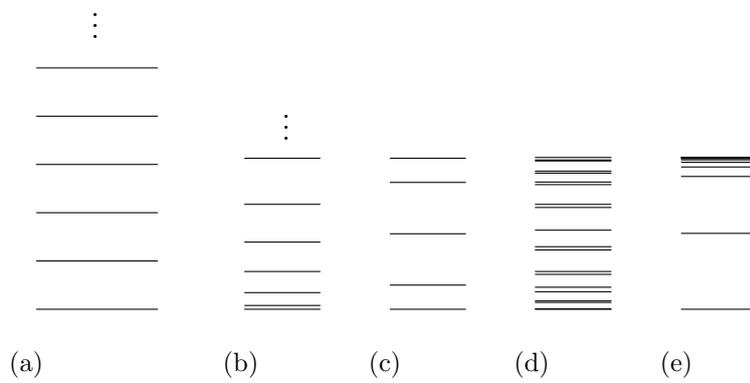


Figura 3.5: Níveis de energia obtidos para vários parâmetros da AHG. Em  $a$ , os níveis são uniformemente espaçados. Em  $b$ , o afastamento dos níveis é crescente. Em  $c$ , os níveis são periódicos. Em  $d$ , os níveis formam um conjunto denso. Em  $e$ , o afastamento dos níveis é decrescente.

## Parte II

### Análise Multifractal de Séries

### Temporais de Mercado

### Financeiro

# Capítulo 4

## MF-DFA Aplicada às Observáveis Financeiras

### 4.1 Introdução

O comportamento de séries temporais do mercado financeiro tem despertado o interesse no âmbito da física devido as interessantes propriedades estatísticas e dinâmicas [80, 81, 82, 83] que estas possuem e de possíveis aplicações práticas. Além de apresentarem comportamento de lei de potência na cauda da função de densidade da probabilidade das flutuações dos (logaritmos dos)<sup>1</sup> preços (o chamado retorno)<sup>2</sup> e do volume de ações negociado (*traded volume*), uma outra característica estatística importante que tem sido observada nestas séries é a sua natureza multifractal [84, 85]. Esta propriedade foi importante para o estabelecimento de analogias entre flutuações de

---

<sup>1</sup>No jargão financeiro, em geral, quando se fala em flutuações de preços, refere-se à diferença do logaritmo de preços.

<sup>2</sup>No caso dos retornos, também são detectadas correlações de longo alcance.

preço e a turbulência em fluidos [86], e para o desenvolvimento de modelos multiplicativos em cascata para a dinâmica de retornos [87]. As mudanças de preços de alguma ação estão relacionadas, basicamente, às transações realizadas com esta ação. Assim, o volume de ações negociados, que é definido como o número de ações que são negociadas durante algum período de tempo (neste caso 1 minuto), é um observável importante na dinâmica dos mercados financeiros[88]. Há uma vasta literatura onde as diversas propriedades estatística ou dinâmicas do volume negociado,  $V$ , foram estudadas [89, 90, 91, 92, 93, 94]. Nesta parte deste trabalho, será apresentado um estudo da estrutura multifractal de séries temporais de 1 minuto, dos retornos e dos volumes negociados de 30 companhias, as quais fazem parte da chamada Média Industrial de Dow Jones, DJ30 (veja tabela (4.1)). As séries começam em 01 de Julho e vão até 31 de Dezembro de 2004, com um comprimento em torno de 50 000 pontos cada uma. A análise é feita usando o método de *Multifractal Detrend Flutuation Analysis* [95], MF-DFA. Além da análise multifractal, também foi analisada a influência das correlações e das não-linearidades no espectro multifractal do volume negociado e dos retornos, e também possíveis conexões com a Mecânica Estatística não-Extensiva [96].

## 4.2 Análise Multifractal de Flutuações com Eliminação de Tendência - MF-DFA

Uma característica comum em muitos sistemas complexos é a existência de invariância de escala de quantidades típicas. Esta invariância da escala, chamada de auto-afinidade para o caso de séries temporais, pode ser associada

ou a uma estrutura do tipo lei-de-potência, a qual pode ser caracterizada por um único expoente,  $H$  (o expoente de Hurst), ou por uma composição de diversos subconjuntos, cada um com um determinado expoente local,  $\alpha$  e dimensão fractal  $f(\alpha)$ , sendo que estes subconjuntos estão definidos em um suporte principal. O primeiro caso é definido como um (mono)fractal e o último como um multifractal. No caso multifractal, as propriedades estatísticas dos vários subconjuntos são caracterizados pelos expoentes locais  $\alpha$ , os quais possuem dimensão fractal  $f(\alpha)$ , compondo assim um espectro multifractal [97]. O método denominado “análise de flutuações com eliminação de tendência” (*Detrend Fluctuation Analysis*) tem sido utilizado no estudo das relações de escala (fractal) e das correlações de longo prazo (alcance) de séries temporais (espaciais). Esta abordagem já foi aplicada em campos tão diversos como a fisiologia, física, meteorologia e geociências [95]. O método DFA é uma modificação da análise de Hurst [98], a qual foi utilizada primeiramente para se estudar registros de cheias do rio Nilo, e consiste em analisar a relação entre a “diferença máxima<sup>3</sup>”  $R$  (a diferença entre o máximo e o mínimo da soma da série subtraída da sua média, para um certo intervalo de tempo) e desvio padrão da série temporal, para períodos de tempos crescentes (veja apêndice E, para detalhes). De maneira geral uma série temporal pode, desde que esta seja estacionária, ser caracterizada pela sua *média*, pelo *desvio padrão* e/ou por momentos de mais alta ordem, além das funções de correlação. Isto é possível porque em séries estacionárias estas grandezas são invariantes (estatisticamente) sob translações temporais. Séries temporais com intervalos de tempo cujas médias desviam acentuadamente da média de longo prazo da série temporal, são chamadas de não-estacionárias. Assim, nesse tipo de

---

<sup>3</sup>Denominado *range*, na literatura.

série, as grandezas estatísticas usuais, como a média e desvios padrão, não são invariantes sob deslocamentos temporais, portanto não são grandezas bem-definidos. Um dos métodos pioneiros para se analisar este tipo de séries é a já mencionada análise de Hurst.

Se além da não-estacionariedade e/ou da fractalidade, o registro temporal apresentar a multifractalidade, o método DFA usual não possibilita a análise desta propriedade. O formalismo multifractal padrão (veja apêndice F), baseado no formalismo da “função de partição”, envolve o cálculo de uma medida normalizada, portanto, não é adequado para tratar sinais afetados por tendências e/ou não-estacionariedades. Para resolver este problema foi proposto o método chamado “Máximos Módulos da Transformada Wavelet” (*Wavelet Transform Modulus Maxima - WTMM*) [87], o qual, como o nome diz, é baseado na transformada *wavelet* do sinal. Tal método envolve um grande esforço computacional, o que dificulta a análise de registros temporais muito grandes e/ou quando se quer analisar um número grande de séries. Assim, recentemente foi proposto o formalismo chamado “Análise Multifractal de Flutuações com Eliminação de Tendência” (*Multifractal Detrend Fluctuation Analysis- MF-DFA*) pelos autores da referência [95], onde também foi mostrado que o formalismo da MF-DFA é equivalente ao formalismo multifractal padrão, quando a etapa da remoção da tendência (passo três da descrição a seguir) for eliminada. O formalismo multifractal da DFA é muito simples e acrescenta ao algoritmo da DFA usual, apenas o cálculo para várias ordens  $q$  da Função de Flutuação (a qual será definida abaixo), além da ordem dois. O algoritmo MF-DFA envolve cinco passos, os quais serão descritos a seguir. A série temporal será denotada por  $\{x_k\}$  e seu comprimento

por  $N$ . Supõe-se também que a série seja de suporte compacto<sup>4</sup>:

- **Passo 1:** Soma cumulativa da série subtraída da média :

$$Y(i) = \sum_{k=1}^i [x_k - \langle x \rangle], \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (4.1)$$

onde  $\langle x \rangle = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N x_k$ .

- **Passo 2:** Divide-se o perfil em  $N_s = \text{int}(N/s)$  segmentos  $s$  (a escala), os quais não devem se sobrepor. Se a série não for um múltiplo da escala considerada, pode-se repetir o mesmo procedimento começando do final da série, assim o segmento que resta não será desconsiderado e serão obtidos  $2N_s$  segmentos. Aqui, por simplicidade, será considerado que a série tem um número de pontos igual à uma potência de 2. Este processo será repetido para diferentes escalas, ou seja para diferentes valores de  $s$ . O valor de  $s$  pode se estender de 1 à  $N$ , mas em geral o sistema apresentará lei-de-potência apenas em um certo intervalo da escala. Para facilitar o processamento numérico e evitar tendências na hora do ajuste linear, em geral,  $s$  varia segundo uma potência de 2:  $s = 2^x$ .

- **Passo 3:** Calcula-se a tendência local para cada segmento da escala considerada, ou seja, para cada um dos  $N_s$  segmentos na escala  $s$ , será ajustado um polinômio de grau  $m$ . O grau  $m$  do polinômio determina a ordem da MF-DFA. O polinômio ajustado em cada um dos  $N_s$ , denotado por  $y_\nu(i)$ , é subtraído do próprio segmento utilizado no ajuste.

---

<sup>4</sup> Segundo [95], suporte de  $x_k = 0$  é definido como o conjunto de índices  $k$  tais que  $x_k = 0$ , e este é compacto se  $x_k = 0$  para uma fração insignificante da série. O valor  $x_k = 0$  é interpretado como sem valor para este  $k$ .

Então calcula-se a variância:

$$F^2(s, \nu) \equiv \sum_{i=1}^s \{Y[(\nu - 1)s + i] - y_\nu(i)\}^2, \quad (4.2)$$

para cada um dos segmento  $\nu$  ( $\nu = 1, \dots, N_s$ ). O perfil  $Y[(\nu - 1)s + i]$  é o pedaço da série (4.1) ao qual foi ajustado o polinômio  $y_\nu(i)$ .

- **Passo 4:** Calcula-se a média sobre todos o segmentos de cada função de flutuação de  $q$ -ésima ordem:

$$F_q(s) \equiv \left\{ \frac{1}{2N_s} \sum_{\nu=1}^{2N_s} [F^2(s, \nu)]^{q/2} \right\}^{1/q}, \quad q \neq 0 \quad (4.3)$$

e

$$F_0(s) \equiv \exp \left\{ \frac{1}{4N_s} \sum_{\nu=1}^{2N_s} [\ln[F^2(s, \nu)]] \right\}, \quad q = 0. \quad (4.4)$$

Por construção,  $F_q(s)$  é definida somente para escalas tais que  $s \geq m+2$ , onde  $m$  é a ordem da *DFA*.

- **Passo 5:** Determina-se as relações de escala através da análise do coeficiente  $h(q)$  para cada um dos gráficos  $\log - \log$  de  $F_q(s) \times s$ . O expoente  $h(2)$  pode ser identificado como o expoente de Hurst da análise DFA usual:

$$F_q(s) \sim s^{h(q)}. \quad (4.5)$$

Seguindo a recomendação de [95], para evitar grandes flutuações em  $F_q(s)$  para  $q$ 's negativos e quando  $h(q)$  é próximo de zero (especialmente para sinais extremamente anti-correlacionados<sup>5</sup>), é realizado um procedimento adicional ao passo **1**, a saber, a soma dupla da série:

$$\tilde{Y}(i) = \sum_{k=1}^i [Y(k) - \langle Y \rangle], \quad (4.6)$$

---

<sup>5</sup>Sinais com expoentes de Hurst dentro do intervalo  $0 < H < 1/2$ . Quanto mais próximo de zero for  $H$ , mais anti-correlacionado será o sinal.

a qual adiciona 1 ao expoente  $h(q)$ , analogamente ao processo de integração.

Assim teremos;

$$\tilde{F}_q(s) \sim s^{\tilde{h}(q)} = s^{h(q)+1}. \quad (4.7)$$

A não extração da média na equação (4.6) a cada passo da soma, leva a tendências quadráticas na série  $\tilde{Y}(i)$ , como será discutido no último parágrafo desta seção. Assim, se este procedimento não for adotado, deve-se aplicar a MF-DFA de ordem, no mínimo, igual a dois, para se eliminar esta tendência espúria. Os próximos passos seguem o formalismo multifractal padrão. A correspondência entre o MF-DFA e o formalismo multifractal padrão é obtida por [95]:

$$\tau(q) = q h(q) - 1, \quad (4.8)$$

onde  $\tau(q)$  é o expoente da função de partição generalizada (apêndice F). Usando a transformada de Legendre de  $\tau(q)$  descritas no apêndice F:  $f(\alpha_q) = q\alpha_q - \tau_q$  e  $\alpha_q = \frac{d\tau_q}{dq}$ ,  $h(q)$  pode ser relacionado ao expoente de Hölder,  $\alpha$  e a dimensão fractal  $f(\alpha)$  [97]:

$$\alpha = h(q) + q \frac{dh(q)}{dq}, \quad (4.9)$$

e

$$f(\alpha) = q[\alpha - h(q)] + 1. \quad (4.10)$$

A utilização da série acumulada (ou integrada) ao invés da série original, como na equação (4.1), para o estudo das propriedades de escalas das mesmas, têm como objetivo a distinção de séries onde há correlações de longo alcance daquelas descorrelacionadas. Além disso, em muitas séries temporais, a amplitude se mantém inalterada nas diferentes escalas (janelas temporais), dificultando a análise das flutuações nas diferentes escalas (para processos

auto-similares, as flutuações crescem com o tamanho da janela seguindo uma lei-de-potência), a soma acumulada (integração resolve este problema), porém introduz uma tendência linear na série. Neste caso a aplicação da uma (MF)-DFA de primeira ordem, remove a tendência. No caso de uma segunda soma (integração), será introduzida uma tendência de segunda ordem. Um exemplo bem conhecido é a dinâmica do movimento Browniano. Neste caso, a força aleatória que age nas partículas é limitada (similar ao caso da amplitude nas diferentes escalas), entretanto, a trajetória (uma integração de todas as forças precedentes) não é limitada e possui propriedades fractais.

### 4.3 Origem da multifractalidade em séries temporais.

Em [95] os autores investigaram as origens da multifractalidade em séries temporais, distinguindo dois tipos: (i) multifractalidade devido a uma função densidade de probabilidade com largo espectro de valores; (ii) multifractalidade devido a diferentes correlações de longo alcance para as pequenas e para as grandes flutuações. Evidentemente que uma mesma série temporal pode apresentar os dois tipos de multifractalidade. Em [95] foi descrito um método para se estudar os fatores que contribuem para o aparecimento do caráter multifractal. Entre estes fatores pode-se citar: correlações lineares, correlações não-lineares e função densidade de probabilidade tipo lei-de-potência. Para estudar estes fatores, as séries originais podem ser embaralhadas (*shuffled*), isto é, os elementos dentro de cada série são aleatoriamente deslocados de suas posições originais um número de vezes da mesma ordem de grandeza do

número de pontos da série. Se as correlações de longo alcance contribuem para a multifractalidade, espera-se que o embaralhamento quebre estas correlações fazendo com que o espectro  $f(\alpha)$  se estreite. Se não contribui, espera-se pouca alteração do espectro multifractal.

Além destas séries temporais não-correlacionadas pode se trabalhar com outro conjunto de séries, nas quais se extrai, no espaço de Fourier, as fases originais e se adiciona novas fases aleatórias com distribuição uniforme, processo que é chamado de aleatorização (“*randomising*”). Posteriormente, é aplicada a transformada inversa Fourier para se retornar ao domínio do tempo. Numericamente, este processo é feito da seguinte maneira:

- aplicação da transformada de Fourier ao sinal original  $x_k$ :  $\mathcal{F}[x_k] = X_f$ .
- Separação da valor absoluto da fase do sinal transformado:  

$$X_f = \text{abs}(X_f) \frac{\text{Im}(X_f)}{\text{Real}(X_f)} .$$
- Geração de fases aleatórias com distribuição uniforme:  $\Theta_{ale}$ .
- Recomposição do sinal utilizando a série dos valores absolutos originais e as novas fases:  $X_f^{ale} = \text{abs}(X_f) \Theta_{ale}$ .
- Aplicação da transformada inversa de Fourier sobre o sinal com fase aleatórias:  $\mathcal{F}^{-1}[X_f^{ale}] = x_k^{ale}$ .

Estas novas séries devem ter uma distribuição Gaussiana estacionária e expoente  $\alpha_{ale}(q)$ . Da mesma maneira, se a função densidade de probabilidade contribui para multifractalidade, espera-se o estreitamento do espectro de valores de  $\alpha$ . O grau de estreitamento do espectro de  $\alpha$ 's mede a intensidade da multifractalidade da série temporal, a qual pode ser analisada por meio

da diferença dos valores  $\alpha(q_{\max})$  e  $\alpha(q_{\min})$ . Assim podemos medir o caráter multifractal de uma série pelo valor:

$$\Delta\alpha = \alpha(q_{\min}) - \alpha(q_{\max}). \quad (4.11)$$

Para um monofractal perfeito tem-se  $\Delta\alpha = 0$ , *i.e.*, a função  $\tau(q)$  é linear.

## 4.4 Volumes Negociados

Uma vez que está se tratando de séries de mercado financeiro com amostragem a cada minuto, foi necessária a remoção chamada tendência intra-diária, a qual é considerada freqüentemente como uma propriedade espúria [99] e está relacionada a períodos de maior ou menor atividade do mercado financeiro durante o dia<sup>6</sup>. A não remoção desta tendência pode levar a detecção de correlações artificiais no cálculo da MF-DFA. Depois de removidas as tendências intra-diárias das séries temporais originais  $V(t)$ , cada elemento da nova série  $V'$  foi normalizado por seu valor médio, obtendo-se assim um volume negociado médio normalizado  $v(t)$ :

$$v(t) = \frac{V'(t)}{\langle V'(t) \rangle}, \quad (4.12)$$

onde o volume com a extração do padrão intra-dia é dado por:

$$V'(t) \equiv \frac{V(t')}{\Xi(t')}, \quad (4.13)$$

---

<sup>6</sup>Uma possível explicação é que durante o período sem atividade são acumuladas informações que são utilizadas pelos agentes próximo ao período de abertura. Por outro lado muitos agentes são mais ativos no período próximo ao fechamento [100].

sendo o padrão de cada dia definido como a média do volume negociado no tempo  $t'$ , para todos os dias:

$$\Xi(t') \equiv \frac{\sum_{i=1}^N V(t'_i)}{N}, \quad (4.14)$$

onde  $\langle \dots \rangle$  é definida como a média sobre o tempo ( $t'$  representa o tempo intra-dia,  $i$  é o dia e  $N$  é comprimento da série). Em outras palavras, calcula-se a média dos volumes negociados para um certo horário fixo, sobre todos os dias de atividade da bolsa, e esta média é feita para cada horário de atividade [100]. Assim, a tendência uma função de cada horário do período de funcionamento do mercado.

Para se calcular, numericamente, o espectro multifractal foi aplicado o método MF-DFA descrito acima [95] (o código MATLAB/OCTAVE é apresentado no apêndice H). Através deste método mostrou-se que a flutuação de ordem  $q$  da função  $F_q(s)$ , apresenta uma lei de escala:

$$F_q(s) \sim s^{h(s)}. \quad (4.15)$$

Para remoção das tendências locais foram utilizados polinômios de ordem 5 (MF-DFA5), uma vez que foi verificado que desta ordem em diante, o espectro multi-fractal é quase independente da ordem, contrariamente ao que acontece com os polinômios de ordem menor. Na figura (4.1) são mostrados os espectros  $f(\alpha)$  para as 30 companhias. O comportamento geral das séries é bastante parecido. Assim para se fazer uma análise mais global, foi feita uma média onde, para cada  $q$  foi realizada a média dos  $\alpha$ 's e dos  $f(\alpha)$ 's para todas as companhias. Na figura (4.2) é mostrado o espectro  $f(\alpha)$  (linha cheia) onde as médias para cada  $q$  foram calculadas para as 30 companhias. No cálculo

do espectro  $q$  se estende de  $-20$  a  $20$ . Pode-se verificar que  $f(\alpha)$  apresenta uma vasta gama de expoentes de  $\alpha_{min} = 0.32 \pm 0,04$  até  $\alpha_{max} = 1.09 \pm 0,04$ , correspondendo a um forte comportamento multifractal. Para  $q = 2$  foi obtido o valor  $\alpha(2) \equiv H = 0.71 \pm 0,03$ , o que concorda com um comportamento fortemente persistente já observado na literatura [89, 92].

Foram geradas, também, séries embaralhadas, a partir das quais foram calculadas  $\alpha_{emb}(q)$ . Além destas séries, foi criado outro conjunto de séries, onde, a partir da série embaralhadas, foi utilizado o processo de aleatorização já descrito anteriormente. Estas novas séries têm uma distribuição Gaussiana estacionária e expoente  $\alpha_{emb-ale}(q)$ .

Nas figuras (4.3) e (4.4) pode-se comparar as funções densidade de probabilidade das duas séries: está evidente que o processo de aleatorização das fases torna a PDF Gaussiana.

Na figura (4.2) pode-se ver que dois tipos de séries apresentam um espectro multifractal, embora a série que foi apenas misturada tenha um espectro de expoentes de Hölder mais largo do que aquela a qual foi adicionada a fase aleatória. Com relação ao expoente de Hurst,  $\alpha(2) = H$ , foi obtido  $H = 0.49 \pm 0,03$  para a série embaralhada e  $H = 0.5 \pm 0,03$  para a série embaralhada e com fases aleatórias. Considerando as margens do erro, estes valores são compatíveis com  $H = 1/2$  do movimento Browniano. Além disso, foram construídas séries somente com adição de fase aleatória para a qual obteve-se  $H = 0.7 \pm 0,03$ . Isto mostra que as correlações temporais têm um papel chave no caráter persistente das séries temporais de volume negociado.

Uma vez que é um fato bem conhecido na literatura os problemas numéricos relacionados a estimativa de dimensões fractais (especialmente devido aos

efeitos de tamanho finito), foi adicionado ao gráfico (4.2) a função  $f(\alpha)$  calculada com o algoritmo MF-DFA de uma série temporal Gaussiana decorrelacionada, gerada através da função **randn** do MATLAB. Esse problema está evidenciado pela persistência de uma certa largura da curva  $f(\alpha)$  para a série Gaussiana, especialmente no braço direito o qual corresponde aos  $q$ 's negativos. Um outro parâmetro crítico é o intervalo das curvas  $F_q(s)$  (4.15) para o qual o regime de escala se mantém: a escolha de diferentes valores de  $s_{min}$  e  $s_{max}$  acarretam, em geral, em diferentes funções  $f(\alpha)$ . Ainda assim, a curva  $f(\alpha)$  da série observada aleatorizada e embaralhada (para qual se esperava uma curva similar a Gaussiana) têm um  $\Delta\alpha$  maior do que para a Gaussiana. Será visto, na próxima seção, que isto não ocorre para os retornos. Assim, tem-se uma série temporal com uma distribuição Gaussiana (após a aleatorização das fases) e com decorrelacionada (pelo embaralhamento mas ainda assim com uma multifractalidade residual. Este resultado contraria a indicação de [101], com base no estudo de séries de batimentos cardíacos, que a multifractalidade está contida nas fase de Fourier da série. Correlações não-lineares relacionadas à volatilidade também são estudadas em [102] onde os autores sugerem que os mecanismos de memória em mercados financeiros são mais robusto do que o modelo GARCH [103]. Outra linha que está correntemente sob investigação pelo autor e colaboradores é se a série temporal embaralhada e aleatorizada se assemelha ao chamado “elefante caminhador aleatório” [104]. Neste modelo, a série temporal tem uma PDF Gaussiana mas com média variância dependente do tempo (o que é incompatível com processos Markovianos).

A séries modificadas podem ser usadas para se estudar os fatores que

contribuem para ao caráter multifractal das observáveis. Estes fatores podem ser: correlações lineares, correlações não-lineares e funções densidade de probabilidades tipo lei-de-potência [92]. Usando as relações de escala de  $F_q(s)$  [95] para as três séries e supondo que todos os fatores são independentes, pode-se quantificar a influência das correlações,  $\alpha_{cor}(q) = \alpha(q) - \alpha_{emb}(q)$ , a influência da função densidade de probabilidade não-Gaussiana,  $\alpha_{PDF}(q) = \alpha_{emb}(q) - \alpha_{emb-ale}(q)$ , e o peso das não-linearidades,  $\alpha_{emb-ale}(q) \equiv \alpha_{nlin}(q) = \alpha(q) - \alpha_{cor}(q) - \alpha_{PDF}(q)$ .

Na figura 4.5 é mostrado o valor médio de  $\tau(q)$  para as séries temporais: original, embaralhada e embaralhada com fase aleatória. Para estas foram calculados os  $\Delta\alpha$ 's. Os resultados obtidos são os seguintes:  $\Delta\alpha = 0.675$ ,  $\Delta\alpha_{cor} = 0.027$ ,  $\Delta\alpha_{PDF} = 0.445$ , e  $\Delta\alpha_{nlin} = 0.203$ . Assim, verifica-se que a influência de correlações lineares na natureza multifractal dos volumes negociados é mínima com o  $\Delta\alpha_{cor}$  que corresponde a 4% de  $\Delta\alpha$ . Este valor é substancialmente menor do que a influência de  $\Delta\alpha_{nlin}$ , que corresponde a 30% de  $\Delta\alpha$ . Este resultado está em acordo com trabalhos precedentes [94] onde, usando a medida de informação mútua generalizada não-extensiva [105, 106], foi mostrado que as dependências não-lineares são mais fortes (e também mais persistente) do que a dependência linear (correlações) nas séries temporais de volume negociado. Finalmente, a partir da análise dos valores de  $\Delta\alpha$ , verifica-se também que o fator principal para a multifractalidade da série temporal de volume negociado é o caráter não-gaussiano,  $q$ -gama generalizada [89, 91, 94], da função densidade de probabilidade, com um peso de 66% nos  $\Delta\alpha$ . Além disso, foi verificado que o comportamento de  $\tau$  para  $q > 0$  é completamente diferente do  $q < 0$ , o que também é visível

na forte assimetria da função  $f(\alpha)$ . Isto poderia indicar que as grandes e pequenas flutuações nas séries temporais são devidas a diferentes mecanismos dinâmicos.

Um cenário descrito acima, com grandes flutuações espaço-temporais, foi recentemente descrito através da chamada super-estatística [107]. A super-estatística pode ser como a superposição de duas ou mais estatísticas, sendo uma dada pelo fator de Boltzmann ordinário e outra por grandes flutuações de um ou mais parâmetros intensivos. A distribuição estacionária correspondente surgiria como uma convolução das várias estatísticas [108] e a estatística de *Tsallis* [96] surge como uma caso especial, para certos valores dos parâmetros [91, 94]. Foi mostrado na literatura [109] que para certos sistemas com sensibilidade fraca às condições iniciais (expoente de Liapunov em torno de zero - veja apêndice (G)), com atratores multifractais, o índice entrópico da estatística de *Tsallis* pode ser relacionado com os extremos do espectro multifractal por [110]:

$$\frac{1}{(1 - q_{sens})} = \frac{1}{\alpha_{min}} - \frac{1}{\alpha_{max}}. \quad (4.16)$$

Posteriormente *Tsallis* identificou um conjunto de números, o “ $q$ -tripleto”  $\equiv (q_{stat}, q_{sens}, q_{ret})$ , para sistemas descritos pela mecânica estatística de não-extensiva. Um conjunto de  $q$ 's tais que  $q_{stat} = q_{sens} = q_{ret} = 1$ , corresponde a mecânica estatística Boltzmann-Gibbs (apêndice (G)). Aplicando os resultados acima às séries de volume negociado, a sensibilidade as condições iniciais poderia ser descrita por:

$$\xi = [1 + (1 - q_{sens})\lambda_{q_{sens}} t]^{\frac{1}{1 - q_{sens}}}, \quad (4.17)$$

com  $q_{sens} = 0,55 \pm 0,08$ , onde  $\xi$  é dado por  $\xi = x(t) - x'(t)$ , sendo  $x(t)$  e  $x'(t)$

duas trajetórias arbitrariamente próximas no espaço de fase do sistema em questão (detalhes no apêndice (G)).

## 4.5 Retornos

O retorno  $R$  de uma transação é definido em função do preço de uma ação  $S_t$ , da seguinte maneira:

$$R = \ln\left(\frac{S_t}{S_{t-1}}\right) = \ln(S_t) - \ln(S_{t-1}) \approx \frac{S_t - S_{t-1}}{S_{t-1}}, \quad (4.18)$$

e dá a informação sobre o lucro obtido na transação das ações. Antes da análise dos retornos, foi realizado o mesmo pré-processamento realizado para os volumes, para remoção da tendência intra-diária. Ou seja, foi calculado um retorno médio normalizado:

$$r(t) = \frac{R'(t)}{\langle R'(t) \rangle}, \quad (4.19)$$

onde o retorno com a extração do padrão intra-dia é dado por:

$$R'(t) \equiv \frac{R(t')}{A(t')}, \quad (4.20)$$

sendo o padrão de cada dia definido como a média dos retornos no tempo  $t'$ , para todos os dias:

$$A(t') \equiv \frac{\sum_{i=1}^N R(t'_i)}{N}. \quad (4.21)$$

Analogamente ao caso dos volumes, as figuras (4.6) e (4.7) mostram as funções densidade de probabilidade da série de retorno original e aleatorizada evidenciando a papel das PDF's na multifractalidade das série. Também foi calculado o espectro MF-DFA5 (figura(4.8)) e a média para cada  $q$  sobre as

30 companhias (figura (4.9)). Dentro da margem de erro todas as médias das séries dão um  $\alpha_2$  próximo de 0.5, ou seja o embaralhamento da série não retira o caráter aproximadamente “Browniano” desta, como já observado na literatura [93]. Por outro lado o embaralhamento desloca principalmente o braço direito da curva  $f(\alpha)$ , indicando que as pequenas flutuações são mais afetadas por correlações de longo alcance. Já as PDF’s afetam diretamente a série como pode ser visto da curva das séries com fase aleatória da figura (4.9), uma vez que o processo de adição de fases aleatórias diminui  $\Delta\alpha$ . Pela figura (4.10) podemos confirmar que o espectro de  $\tau$ ’s originais é mais afetado pela adição de fases aleatórias, indicando uma forte influência da função densidade de probabilidades no caráter multifractal das séries de volume negociado. Mais uma vez vamos testar a relação (4.17), com valores obtidos do gráfico (4.9):  $\alpha_{max} = 0,84 \pm 0.04$ , donde chegamos a  $q_{sens} = 0.58 \pm 0.10$ .

## 4.6 Comentário Finais

Os resultados obtidos neste parte do trabalho, permitiram observar o caráter multifractal dos volumes negociados e dos retornos das companhias do DJ30, sendo que foi verificado o caráter persistente das séries de volumes negociados e o caráter a aproximadamente Browniano das séries de retornos. Assim, em vista destes resultados, podemos afirmar que o mecanismo que a dinâmica subjacente ao lucro não depende muito dos eventos passados, em contrapartida aos mecanismos dinâmicos do volume de ações negociados, que exibem uma forte dependência de eventos passados. Também buscou-se, neste trabalhos, relacionar os parâmetros do espectro multifractal à chamado  $q$ -tripleto o qual foi conjecturado por Tsallis no contexto da Mecânica Es-

tatística não-Extensiva, em particular, ao  $q$ -índice relacionado a sensibilidade às condições iniciais. Assim, supondo que a ddinâmico do mercado financeiro apresenta sensibilidade fraca (lei-de-potência ou  $q$ -exponencial) às condições iniciais, podemos utilizar o espectro multifractal para calcular o mesmo. Estas relações poderão ser aprofundadas na continuidade deste trabalho.

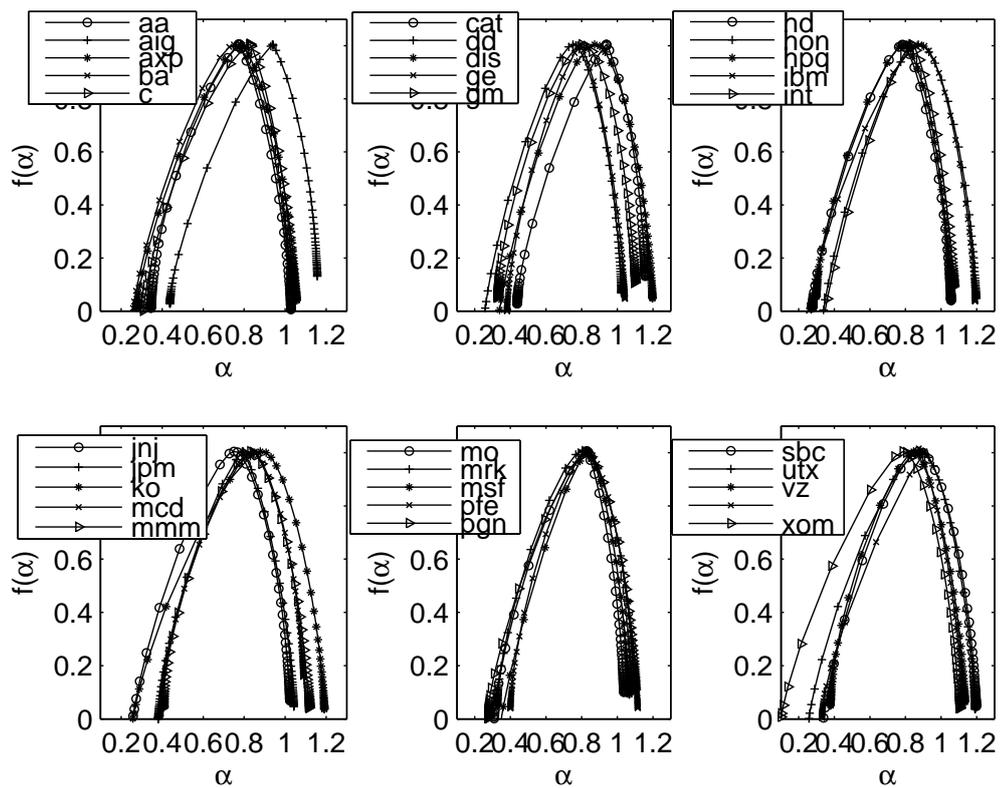


Figura 4.1: Espectro multifractal dos volumes negociados para as 30 companhias do DJ30 calculado com o método MF-DFA5. É possível notar o caráter fortemente persistente ( $\alpha_2 > 0.5$ ) das séries temporais.

AA	ALCOA INC
AIG	AMER INTL GROUP INC
AXP	AMER EXPRESS INC
BA	BOEING CO
C	CITIGROUP INC
CAT	CATERPILLAR INC
DD	DU PONT E I DE NEM
DIS	WALT DISNEY-DISNEY
GE	GEN ELECTRIC CO
GM	GEN MOTORS
HD	HOME DEPOT INC
HON	HONEYWELL INTL INC
HPQ	HEWLETT PACKARD CO
IBM	INTL BUSINESS MACH
INTC	INTEL CP
JNJ	JOHNSON AND JOHNS D
JPM	JP MORGAN CHASE CO
KO	COCA COLA CO THE
MCD	MCDONALDS CP
MMM	3M COMPANY
MO	ALTRIA GROUP INC
MRK	MERCK CO INC
MSFT	MICROSOFT CP
PFE	PFIZER INC
PG	PROCTER GAMBLE CO
sbc	SBC COMUNICATIONS
UTX	UNITED TECH
VZ	VERIZON COMMUN

Tabela 4.1: Legenda das companhias que compõem o DJ30.

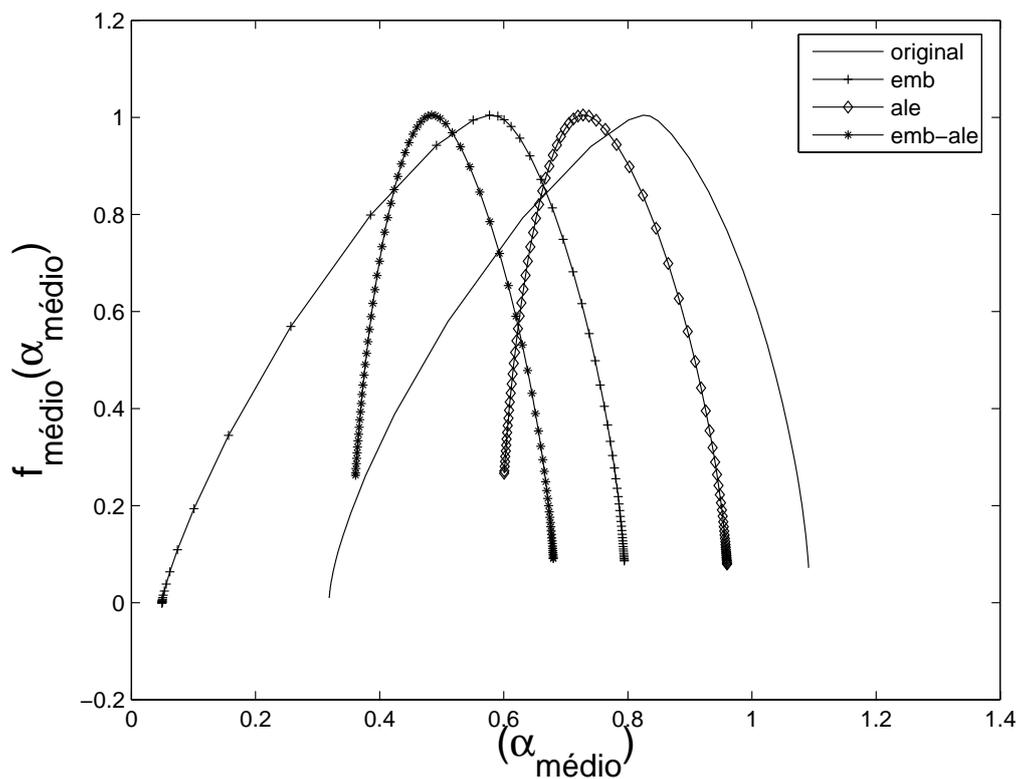


Figura 4.2: Espectro multifractal médio  $f(\alpha)$  vs.  $\alpha$ , com a média feita sobre os  $f$ 's e os  $\alpha$ 's para cada uma das 30 companhias do DJ-30. As séries temporais originais e as séries embaralhadas apresentam um forte caráter multifractal, enquanto as médias das séries que foram embaralhadas e depois adicionadas de uma fase aleatória, apresentam a estreita faixa de  $\alpha$ 's, o que pode ser relacionado com a forte contribuição da função densidade de probabilidade não-Gaussiana do volume negociado para a multifractalidade.

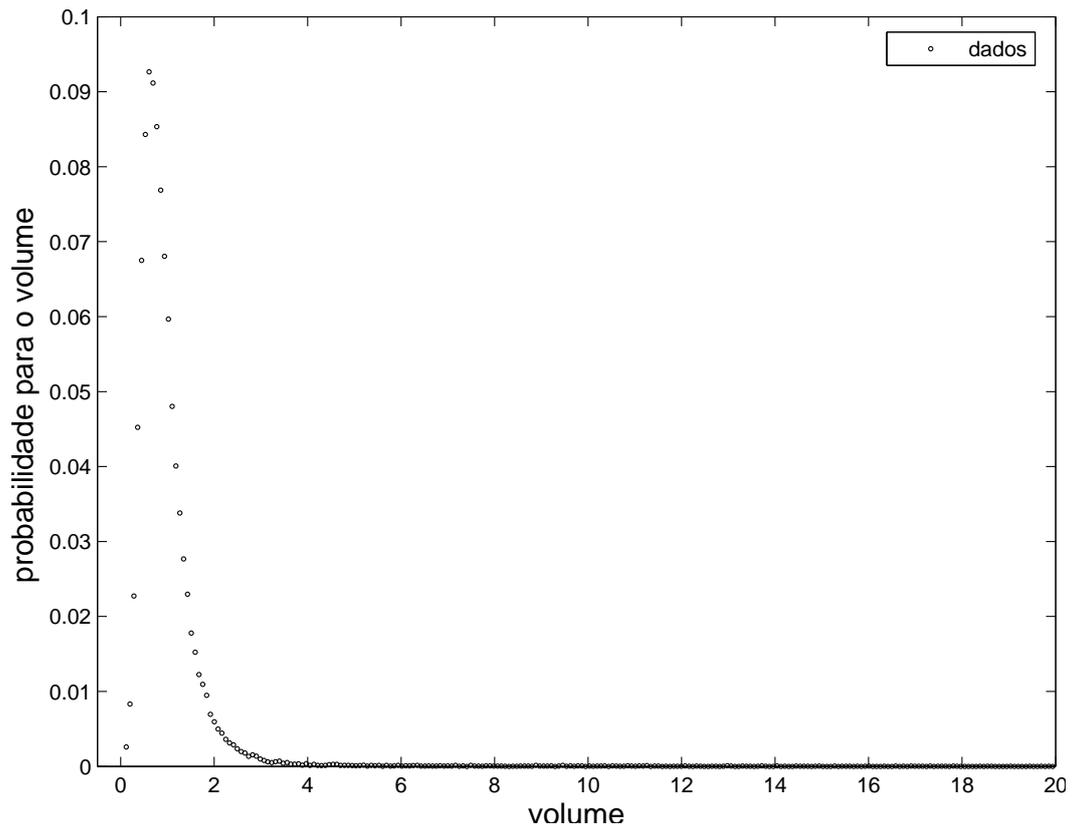


Figura 4.3: Função densidade de probabilidade para a série de volume observada (volume médio das 30 Companhias do DJ30). A curva exibe um claro caráter não-Gaussiano.

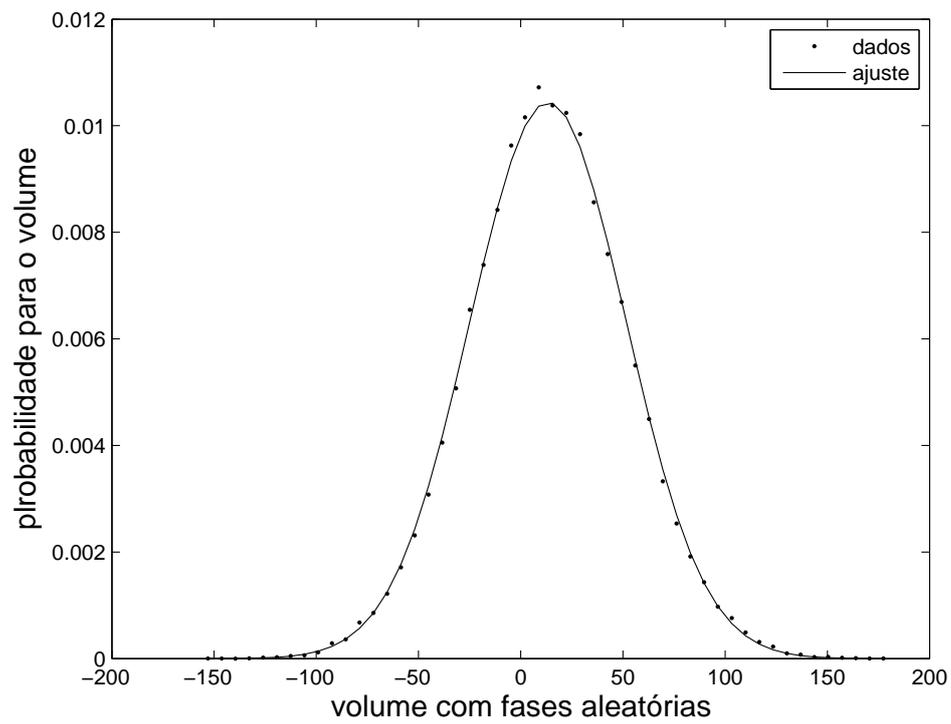


Figura 4.4: Função densidade de probabilidade para a série de volume observada aleatorizada (pontos) e ajustada (linha cheia) - volume médio das 30 Companhias do DJ30. A curva exibe um claro caráter Gaussiano.

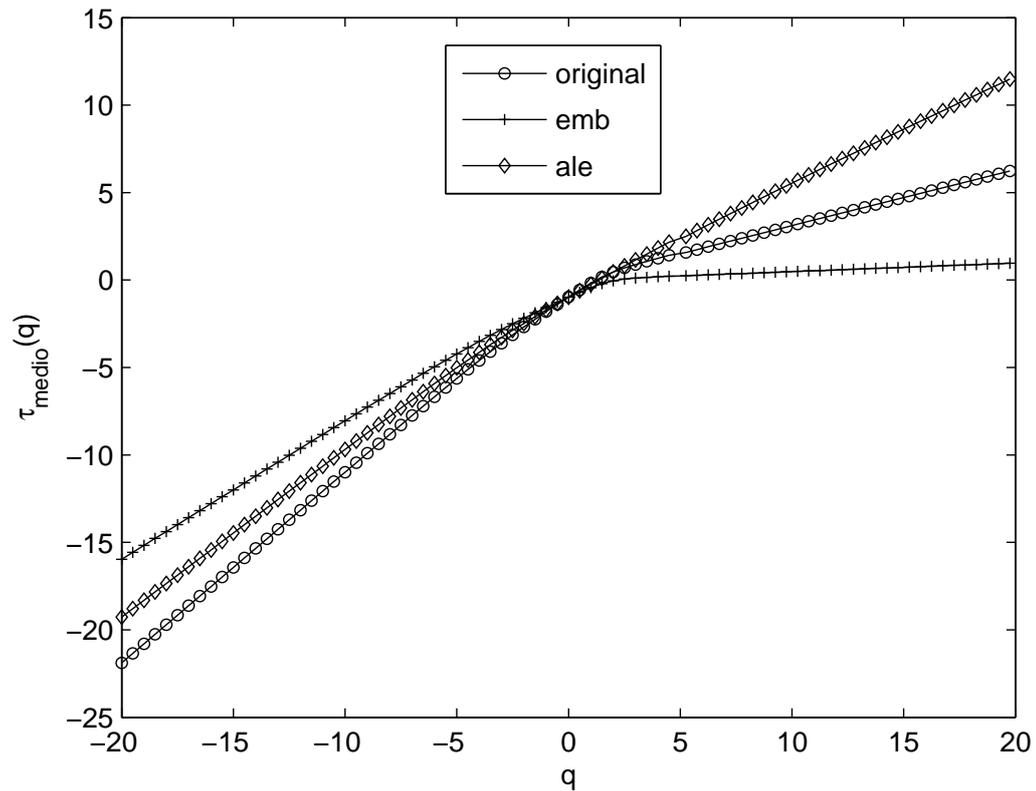


Figura 4.5: Expoentes  $\tau(q)$  vs.  $q$ , com a média feita sobre as 30 companhias do DJ30, para cada  $q$ , para as séries de volume negociado. Podemos observar que o embaralhamento aproxima a curva  $\tau(q)$  de uma reta, indicando que as correlações têm um forte influência no caráter multifractal das séries de volume negociado.

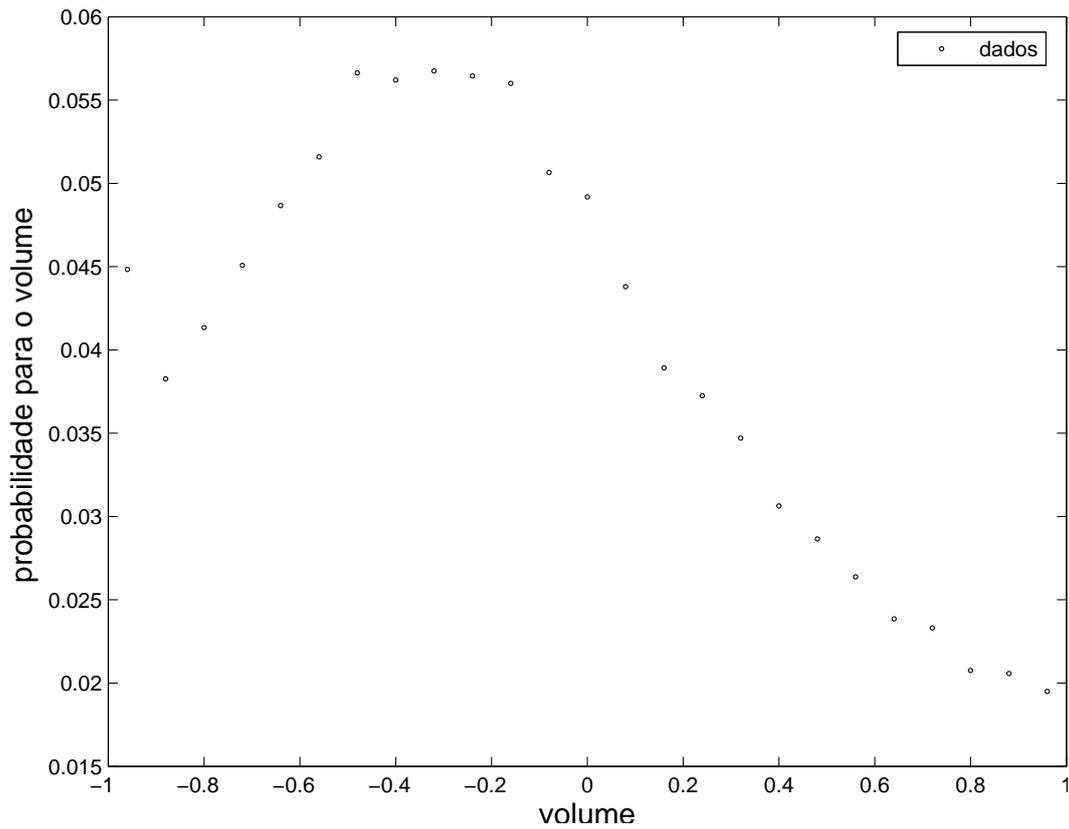


Figura 4.6: Função densidade de probabilidade para a série de retorno observada (retorno médio das 30 Companhias do DJ30). A curva exibe um claro caráter não-Gaussiano.

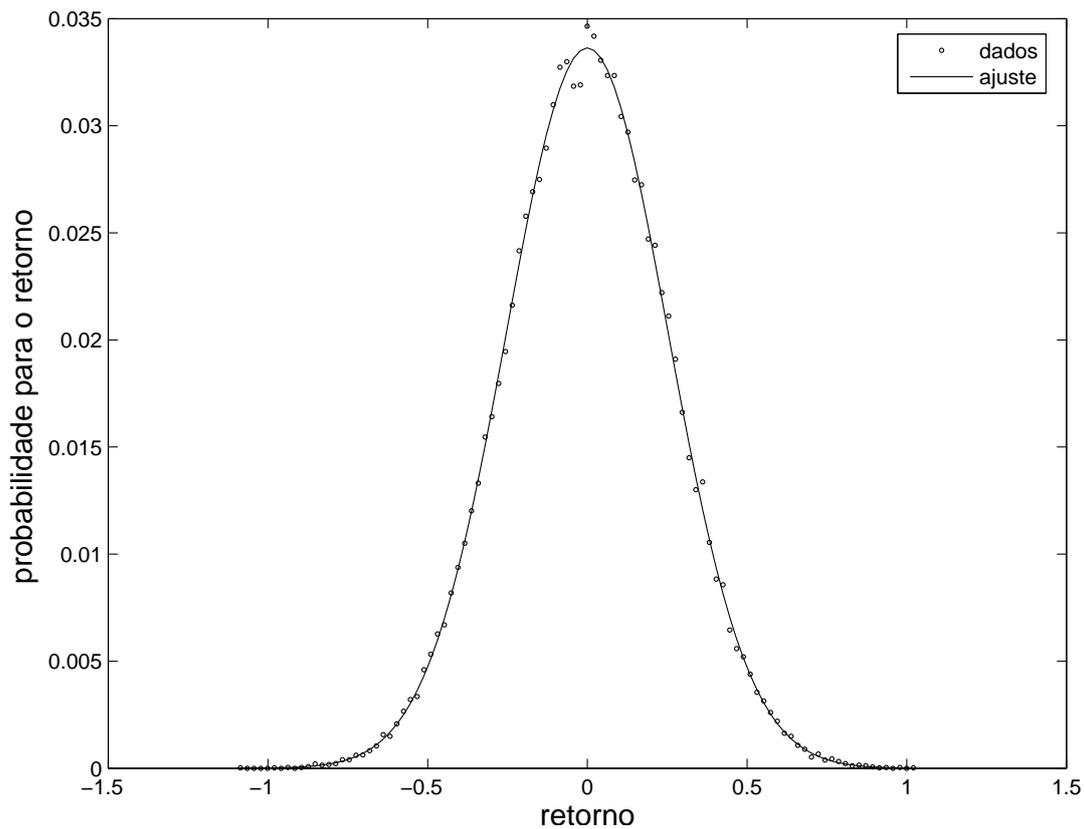


Figura 4.7: Função densidade de probabilidade para a série de retorno observada aleatorizada (pontos) e ajustada (linha cheia) - retorno médio das 30 Companhias do DJ30. A curva exibe um claro caráter Gaussiano.

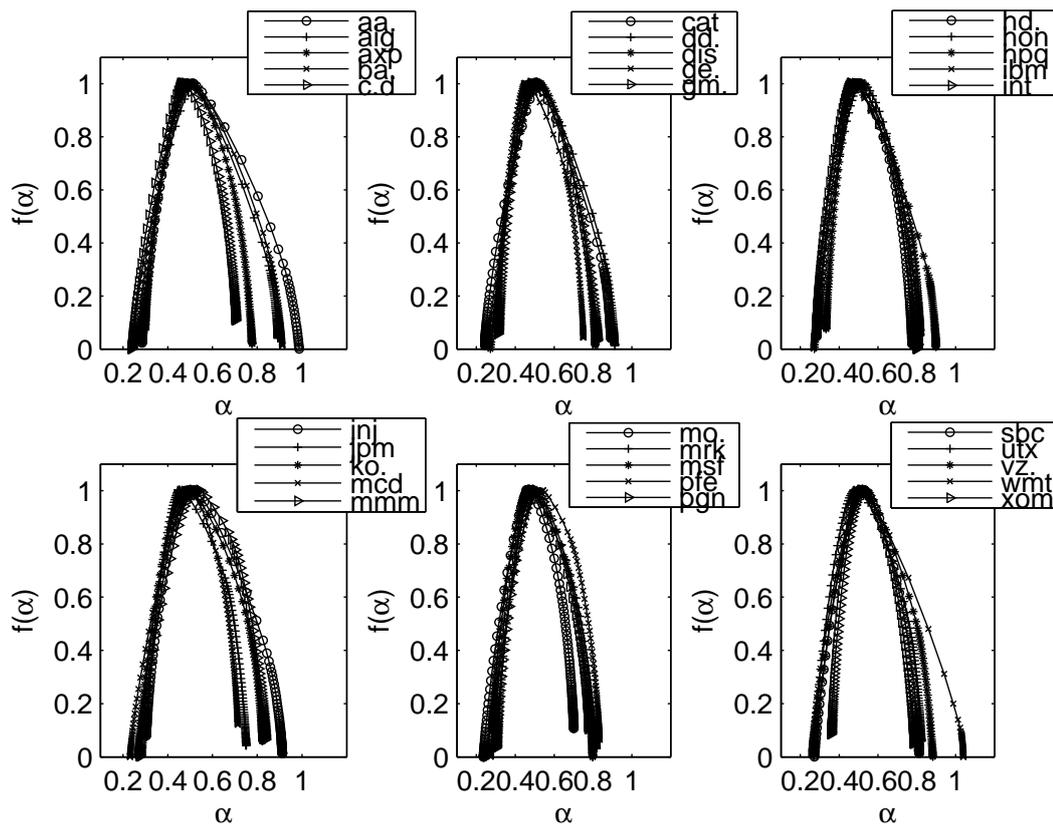


Figura 4.8: Espectro multifractal dos retornos para a 30 companhias do DJ-30, calculado com o método MF-DFA5. Pode-se notar o caráter aproximadamente “Browniano” ( $\alpha_2 \approx 0.5$ ) das séries temporais.

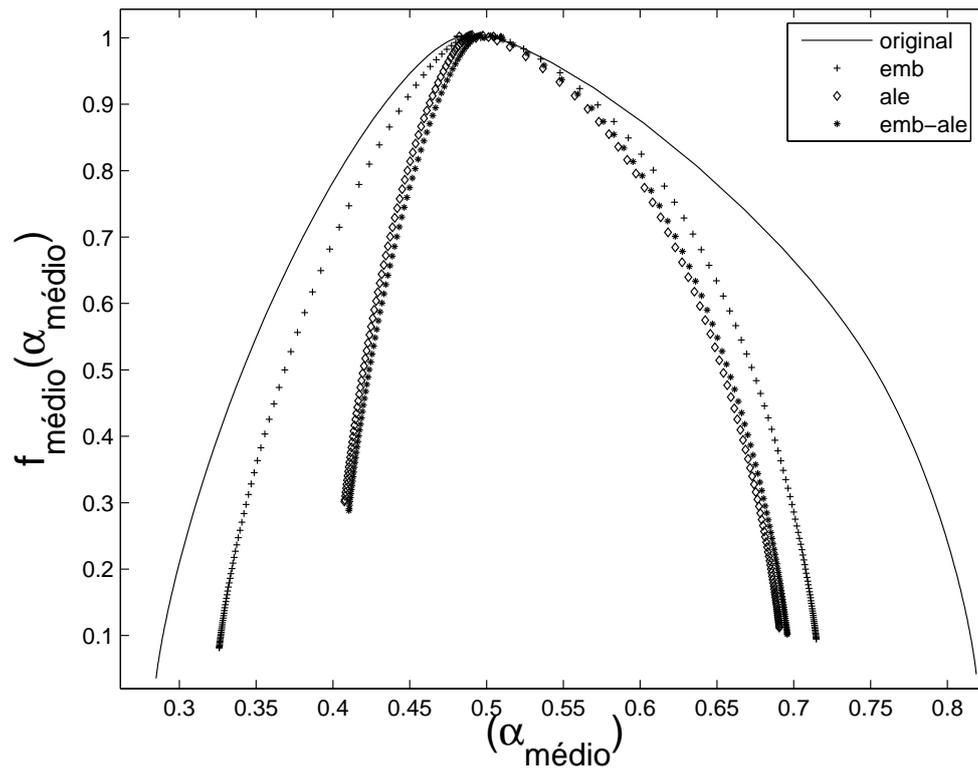


Figura 4.9: Espectro multifractal  $f(\alpha)$ , com a média feita sobre as 30 companhias para cada  $q$ . As séries temporais embaralhadas (*shuffled*) foram afetadas principalmente para  $q$ 's positivos, indicando que as pequenas flutuações são afetadas por correlações. As médias das séries adicionadas de uma fase aleatória apresentam a estreita faixa de  $\alpha$ 's indicando uma forte influência das PDF's sobre os retornos.

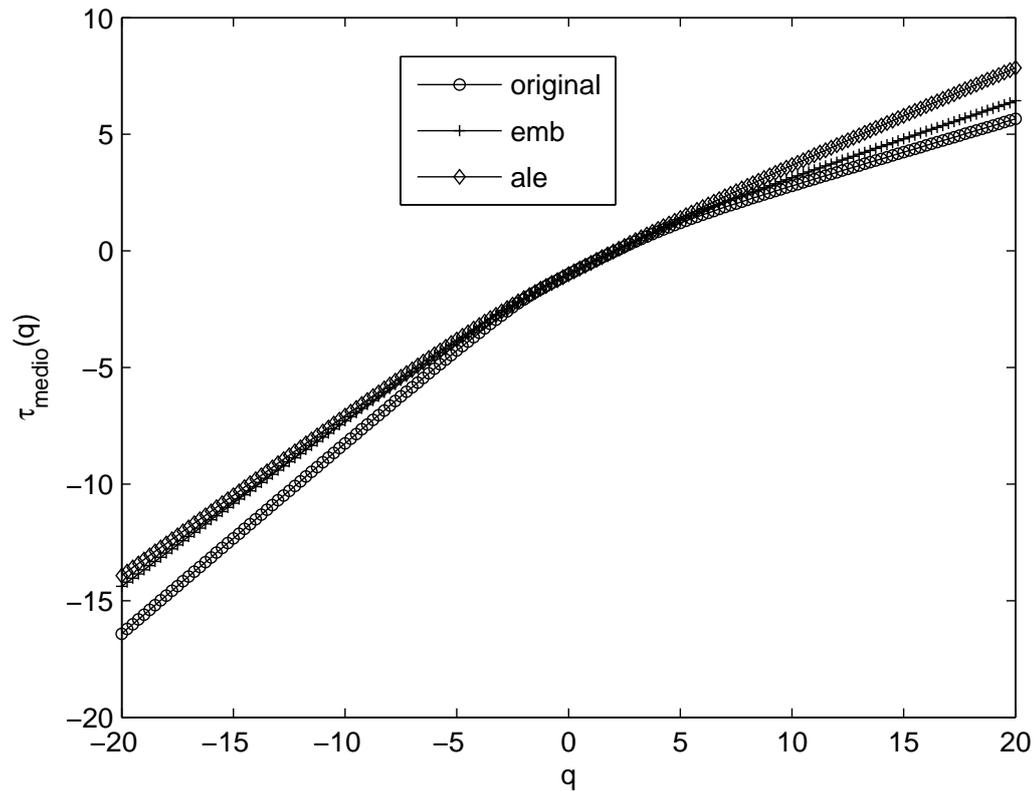


Figura 4.10: Expoentes  $\tau(q)$  vs.  $q$ , com a média feita sobre as 30 companhias do DJ-30, para cada  $q$ , para as séries de retornos. Podemos observar que o espectro de  $\tau$ 's originais é mais afetado pela adição de fases aleatórias, indicando uma forte influência da função densidade de probabilidades no caráter multifractal das séries de volume negociado.

# Parte III

## Conclusões

# Primeira Parte

Neste trabalho foi proposto um método baseado na Álgebra de Heisenberg Generalizada (AHG) para reproduzir o espectro vibracional de moléculas diatômicas. Para o caso da molécula de monóxido de carbono (CO), foi mostrado que um dos métodos anteriormente propostos na literatura, o qual é baseado na álgebra de  $q$ -osciladores (ou a AHG linear), é capaz de reproduzir o espectro vibracional molecular para as 20 primeiras transições da molécula de CO, mas não fornece a energia de dissociação correta, isto é, este modelo falha na descrição dos níveis vibracionais mais elevados. Usando um funcional não-linear de quarta ordem na AHG foi possível ajustar os 20 primeiros níveis de energia experimentais e calcular a energia de dissociação para a molécula de CO, com boa precisão. Para esta molécula, a AGH (com um funcional não-linear), forneceu resultados globais melhores do que os modelos de: Morse; Morse perturbado e o modelo de  $q$ -osciladores (AGH linear [9]). Este trabalho mostra que a AHG pode ser usada como uma ferramenta fenomenológica simples para se estudar partículas compostas. A AHG produz espectros diferentes para funções características diferentes, assim diferentes funções poderiam ser relacionadas a diferentes deformações no potencial harmônico. De fato, esta estrutura algébrica pode reproduzir uma grande variedade de espectros desde que seja utilizada a função carac-

terística apropriada. Conseqüentemente, esta álgebra poderia ser usada para estudar outras moléculas, simplesmente escolhendo as funções características apropriadas ou mudando-se os parâmetros das funções.

Este novo método, introduzido no presente trabalho, é uma generalização de métodos algébricos anteriormente propostos. O método foi testado para a molécula de CO e foi capaz de: ajustar os dados experimentais das 20 primeiras transições; prever níveis desconhecidos e calcular a energia de dissociação correta. Os resultados obtidos neste trabalho motivam a utilização da AHG para o estudo de sistemas moleculares. Investigações futuras devem incluir: 1) estudo da relação entre os parâmetros dos funcionais e os parâmetros moleculares; 2) a investigação da curva potencial subjacente à AHG; 3) o estudo dos estados eletrônicos e rotacionais através da AHG; 4) o estudo da aplicabilidade do método para moléculas com mais de dois átomos. Uma possível realização dos itens 3 e 4 poderia ser feita escolhendo-se outras funções características e/ou estendendo-se o número de operadores.

\*   \*   \*

Propomos também nesta tese uma álgebra tipo Heisenberg para, por exemplo, um sistema com espectro de energia descrito por uma seqüência de Fibonacci generalizada. Os geradores da estrutura algébrica são: o operador Hamiltoniano, os operadores ladeira e um operador auxiliar. Além disso, esta estrutura depende de duas funções analíticas  $f(x)$  e  $g(x)$ . Esta álgebra geral foi denominada “álgebra de Heisenberg generalizada a dois passos” [75]. Foram discutidas as representações para esta álgebra e as possíveis representações foram classificadas em termos das regiões no espaço dos parâmetros das funções  $f(x)$  e  $g(x)$ . Para fazer esta classificação foram utilizadas ferra-

mentas e técnicas usadas em teoria de sistemas dinâmicos, como a análise de estabilidade dos pontos-fixos de mapas. Esta estrutura algébrica pode descrever sistemas quânticos que possuem autovalores do operador  $H$  (o Hamiltoniano) que dependem de dois autovalores precedentes, isto é,  $\epsilon_{i+1} = h(\epsilon_i, \epsilon_{i-1})$ , onde  $h : \mathfrak{R}^2 \rightarrow \mathfrak{R}$  é uma função e  $\epsilon_i$  é o autovalor de  $H$  correspondente ao auto-estado  $|i\rangle$ , isto é,  $H|i\rangle = \epsilon_i|i\rangle$ . Esta álgebra pode descrever, para o caso de funções  $f(x)$  e  $g(x)$  lineares, um sistema quântico cujos autovalores do operador Hamiltoniano obedecem uma seqüência de Fibonacci generalizada. Os espectros possíveis gerados por esta álgebra podem ser vistos na figura 3.5. Pode ser constatado que espectros típicos, encontrados na natureza, podem ser gerados por esta álgebra. Futuramente, poderia ser interessante aplicar esta álgebra como uma ferramenta para se estudar sistemas que têm espectro mais complicado, como foi realizado em [22]. Também, poderia ser interessante analisar em detalhe a representação desta álgebra para funções características não-lineares.

## Segunda Parte

Na segunda parte desta tese foram estudadas algumas propriedades estatísticas das séries dos retornos e volumes negociados da Média Industrial de Dow Jones (DJ30). Foi comprovado o caráter persistente das séries temporais dos volumes negociados para o DJ30 e o caráter aproximadamente Browniano para os retornos [94]. Este caráter foi constatado através do expoente de Hurst das séries temporais, o qual foi calculado através do método “análise de flutuação de tendência multifractal” (*multifractal detrend fluctuation analysis*). Foi verificado, pela presença de um largo intervalo de expoentes de Hurst  $\alpha(q)$ , uma forte multifractalidade nas séries temporais de retorno e de volume. As origens desta multifractalidade foram investigadas pelos processos de embaralhamento e adição de fases aleatórias. Nas séries de volume a multifractalidade é originada principalmente devido a presença de um largo espectro de valores na função densidade de probabilidade, embora as correlações de longo-prazo também tenham um papel importante. A forte assimetria da função  $f(\alpha)$  para os volumes indica que as pequenas e as grandes flutuações são devidas a mecanismos dinâmicos diferentes, motivando futuras investigações destas séries temporais no contexto da chamada *super-estatística*. Nas séries de retorno, a multifractalidade também é devida principalmente à função densidade de probabilidade, sendo que as correlações têm influência

principalmente nas pequenas flutuações. Também foram calculados para os volumes negociados e para os retornos, à partir do espectro multifractal, o índice  $q_{sen}$ , o qual foi introduzido com base em argumentos da Mecânica Estatística não-Extensiva de *Tsallis*, o qual dá uma medida da sensibilidade às condições iniciais, em lei de potência ( $q$ -exponencial), das séries temporais estudadas. Estudos mais detalhados poderiam esclarecer diversos aspectos deste formalismo.

## Apêndice A

# Simetrias dinâmicas na equação de Schroedinger

Em [111] o autor classifica quatro tipos de simetrias em física: *i*) simetrias de calibre (*gauge*), as quais estão relacionadas, por exemplo, a transformações de escala dos campos magnéticos; *ii*) simetrias de espaço-tempo, que estão relacionadas a invariância de Lorentz em sistemas relativísticos; *iii*) as simetrias geométricas que estão relacionadas a invariância sob operações geométricas espaciais, tais como rotações, inversões, reflexões, translações e etc, as quais são muito usadas em física molecular e do estado sólido; *iv*) a simetrias dinâmicas, que são transformações dependentes do tempo que deixam invariante o Hamiltoniano do sistemas quântico em questão e determinam as propriedades espectrais do sistema. Os tipos de simetrias do sistema se refletem na álgebra dos operadores (em geral matrizes) de simetrias do sistema.

A simetria de translação temporal [111] apresentada pela solução da equação de Schroedinger é um exemplo de simetria dinâmica simples que facilita a solução de problemas físicos. A ligação entre a teoria quântica e os

métodos algébricos se torna clara quando analisamos a evolução temporal de um sistema quântico dada pela equação de Schroedinger:

$$\left( \hat{H}(\mathbf{x}, \mathbf{p}) - i \frac{\partial}{\partial t} \right) \psi(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (\text{A.1})$$

onde  $\hat{H}(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(x)$ , é o operado hamiltoniano. Para o caso em que o espectro de energia não varia no tempo a função de onda deve têm a forma

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \hat{U}(t)\psi(\mathbf{x}, 0), \quad (\text{A.2})$$

onde  $\hat{U}$  é o operador de evolução temporal. Para que o sistema permaneça invariante sob deslocamentos temporais é necessário que o operador  $\hat{U}$  tenha a propriedade:

$$\hat{U}(t_1)\hat{U}(t_2) = \hat{U}(t_1 + t_2), \quad (\text{A.3})$$

o que é possível somente se

$$\hat{U} = e^{-i\hat{H}t}, \quad (\text{A.4})$$

ou seja,  $\hat{U}^\dagger \hat{U} = 1$ . Assim, pode-se interpretar o operador de evolução temporal como um gerador de simetria do sistema. Ao lado da translação temporal, outras simetrias são comuns em sistemas quânticos, tais como rotações no espaço, transformações de Lorentz, transformações de fase, permutação de partículas idênticas, etc [2].

Como vimos acima, a invariância sob a evolução temporal levou a conservação de uma quantidade física observável. Em MQ um observável é representada por um operador auto-adjunto  $\hat{k}$  que atua no espaço de Hilbert e que assume o valor  $k$  para um dado estado  $\psi_k$ :

$$\hat{k}\psi_k(\mathbf{x}, t) = k\psi_k(\mathbf{x}, t). \quad (\text{A.5})$$

Agora, considerando a equação Schrodinger dependente do tempo e aplicando um operador qualquer sobre a função de onda  $\hat{k}\psi(\mathbf{x}, t)$ , a função de onda transformada será ainda uma solução para a ES (ou seja, será uma transformação de simetria) se for satisfeita a condição:

$$[\hat{H}(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t), \hat{k}] - i \frac{\partial \hat{k}}{\partial t} = 0, \quad (\text{A.6})$$

onde foi usada a definição da derivada total de uma operador  $\hat{k}$  [2]:

$$\frac{d\hat{k}}{dt} = \frac{\partial \hat{k}}{\partial t} + i[\hat{H}, \hat{k}]. \quad (\text{A.7})$$

Assim, o operador  $\hat{k}$  está associado à uma quantidade conservada, ou seja, o operador deixa a função  $\psi$  invariante sob a ação da ES. Se  $\hat{k}_i$  e  $\hat{k}_j$  satisfazem a equação (A.6) então o próprio comutador é uma constante de movimento. Se  $[\hat{k}_i, \hat{k}_j]$ <sup>1</sup> é fechado com relação a comutação então  $k_i$  é um "gerador da álgebra de simetria" do sistema quântico independente do tempo. Em geral, os operadores  $k_i$  não comutam com o Hamiltoniano, ao invés satisfazem a relação:

$$[\hat{H}(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t) - i \frac{\partial}{\partial t}, \hat{k}] = 0. \quad (\text{A.8})$$

Se este for o caso, então

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \psi_n(\mathbf{x}) e^{-iE_n t}, \quad (\text{A.9})$$

levando à

$$\left( \hat{H}(\mathbf{x}, \mathbf{p}) - E_n \right) \psi(\mathbf{x}) = 0. \quad (\text{A.10})$$

Os  $\hat{k}$  geradores constituem a "álgebra dinâmica". Para que estes sejam constantes de movimento é necessário que os  $\hat{k}_i$ 's sejam independentes do tempo,

---

<sup>1</sup>Constituindo assim uma álgebra de Lie.

ou seja

$$[\hat{H}, \hat{k}] = 0. \quad (\text{A.11})$$

De maneira o raciocínio desenvolvido aqui poderia ser estendido para um operador geral, ao invés do operador da equação (A.1) [2]:

$$\hat{O}\psi(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (\text{A.12})$$

onde o operador  $\hat{O}$  poderia representar a equação de Maxwell ou de Dirac, por exemplo.

## Apêndice B

# Álgebra de Heisenberg e Vibrações Moleculares

O fundamento dos métodos algébricos no contexto da física molecular pode ser compreendido a partir da formulação de Heisenberg da mecânica quântica, já discutida no capítulo 2.

Quando o potencial  $V$  for um potencial geral, ao invés do potencial harmônico, podemos expandi-lo em potências de  $\hat{x}$  e conseqüentemente, em função de  $a^\dagger$  e  $a$  [1]:

$$V(x) = \sum_i k_i \hat{x}^i. \quad (\text{B.1})$$

Considerando os termos de ordem maior que dois como perturbações no potencial harmônico, o Hamiltoniano pode ser reescrito como:

$$H = H_0 + \lambda U, \quad (\text{B.2})$$

onde  $H_0$  é o potencial harmônico,  $U$  representa os termos de mais alta ordem do potencial e  $0 \leq \lambda \leq 1$  é um parâmetro adimensional que controla a

perturbação. Se  $\lambda = 0$ , tem-se o caso não-perturbado:

$$H_0|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle \quad , \quad n^{(0)} = 0, 1, 2, 3, \dots \quad , \quad (\text{B.3})$$

onde o super-índice (0) indica que as quantidades são associadas com o sistema não perturbado. Supondo que a perturbação seja suficientemente fraca ( $\lambda$  pequeno) e não existam estados degenerados, o espectro de autovalores pode ser expandido em potências de  $\lambda$ :

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots \quad (\text{B.4})$$

E da mesma maneira os auto-estados perturbados são dados por:

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda|n^{(1)}\rangle + \lambda^2|n^{(2)}\rangle + \dots \quad (\text{B.5})$$

Note-se que quando  $\lambda = 0$ , recupera-se o sistema não-perturbado.

O primeiro termo na expressão da energia corresponde ao espectro do Hamiltoniano não-perturbado. O segundo e o terceiro correspondem aos termos de perturbação de segunda e terceira ordem, respectivamente, e são dados por:

$$E_n^{(1)} = \langle n^{(0)}|U|n^{(0)}\rangle \quad (\text{B.6})$$

$$E_n^{(2)} = \sum_{k \neq n} \frac{|\langle k^{(0)}|U|n^{(0)}\rangle|^2}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad (\text{B.7})$$

Quanto mais alta a ordem dos cálculo perturbativo, mais difícil é o trabalho de encontrá-los, além da dificuldade de diagonalização.

Para um potencial que é muito diferente do potencial do oscilador harmônico, a expansão (B.1) tem muitos parâmetros. Isto torna o problema difícil para estados quânticos muito excitados ( $n \rightarrow \infty$ ) [1], devido à existência de um grande número de termos. Este é o caso, por exemplo de vibrações moleculares. Para superar este problema pode-se usar um potencial que seja mais

próximo do potencial real como ponto de partida, sendo o mais comum para o caso de moléculas diatômicas, o uso de potencial de Morse [49]:

$$V(x) = V_0[1 - \exp(-a(x - x_0))]^2 \quad (\text{B.8})$$

Substituindo este potencial na ES e após uma série de transformações a ES pode ser escrita em termos de três operadores  $F_+, F_-$  e  $F_z$  [1], os quais satisfazem:

$$[F_+, F_-] = 2F_z; \quad (\text{B.9})$$

$$[F_\pm, F_z] = \pm F_\pm; \quad (\text{B.10})$$

$$[N, F_\pm] = [N, F_z] = 0. \quad (\text{B.11})$$

A álgebra resultante é isomórfica a álgebra  $su(2)$ . O Hamiltoniano para o oscilador de Morse na forma algébrica pode ser escrito como:

$$H = E_0 + AF_z^2, \quad (\text{B.12})$$

onde  $E_0$  e  $A$  são constantes. O espectro de energia da equação (B.12) tem a conhecida forma:

$$E(\nu) = \hbar\omega_e\nu + \left(\nu + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_e\chi_e\left(\nu + \frac{1}{2}\right)^2 \quad \nu = 0, 1, 2, \dots, \quad (\text{B.13})$$

onde  $\chi_e$  é a constante de anarmonicidade e  $\omega_e$  é a frequência do estado fundamental.

## Apêndice C

# Propriedades das Seqüências de Fibonacci

Os números de Fibonacci (ou outros números relacionados) foram conhecidos por muitas culturas desde a antigüidade. A seqüência de números de Fibonacci é gerada pela relação  $F_{n+1} = F_n + F_{n-1}$  ( $\{F_n\}_{n=1}^{\infty} = 1, 1, 2, 3, 5, 8, 13, \dots$ ). Os números de Fibonacci ou números relacionados, como o número de ouro, aparecem em muitas áreas das ciência e das artes. Além da fórmula acima, existem muitas outras formas de se obter os números de Fibonacci. A número de ouro é obtido quando se faz o limite da razão de dois números de Fibonacci consecutivos:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} F_n / F_{n-1} \equiv \phi = \frac{1 + \sqrt{5}}{2}. \quad (\text{C.1})$$

Como vimos este também é um dos pontos-fixo instáveis da equação de Fibonacci.

A partir do número de ouro  $\phi$  podem ser obter muitas outras fórmulas para se gerar as seqüências de Fibonacci. Uma das mais importantes é a de

Binnet:

$$F_n = \frac{\phi^n - (-\phi)^{-n}}{\sqrt{5}}. \quad (\text{C.2})$$

Duas outras maneiras interessantes de se obter a seqüência de Fibonacci é através das fórmulas:

$$F_n = \left[ \frac{\phi^n}{\sqrt{5}} \right] \quad (\text{C.3})$$

e

$$F_{n+1} = \text{floor}(\phi F_n + 1/2) \quad (\text{C.4})$$

onde  $[x]$  representa o arredondamento de  $x$ , ou seja, o número inteiro mais próximo de  $x$  e a função  $\text{floor}(x)$  retorna o maior inteiro cujo valor é menor do que  $x$ .

Existem muitas outras relações interessantes que envolvem os números de Fibonacci as quais aparecem nas mais variadas áreas, como a física (por exemplo em quase-cristais), na arquitetura (proporção áurea das pirâmides de Gisé), na biologia (flor de gira-sol), na computação (algoritmo da transformada rápida de Fourier), etc. Recomenda-se o página da Rede Mundial de Computadores [http://en.wikipedia.org/wiki/Fibonacci\\_number](http://en.wikipedia.org/wiki/Fibonacci_number) e a revista especializada *Fibonacci Quarterly*, para mais informações.

# Apêndice D

## Estabilidade Segundo Lyapunov em Mapas: Critério de Jury

A estabilidade de pontos-fixos em mapas lineares, pode ser analisada através da matriz Jacobiana do mapa linearizado<sup>1</sup> (se este for não-linear) desde que todos os pontos-fixos sejam hiperbólicos, ou seja, se todos os autovalores forem diferentes da unidade em módulo (Teorema de Hartman-Grobman). Se um dos autovalores for igual a um a estabilidade deve ser avaliada pelo chamado método de Lyapunov ou pela Teoria da Variedade Central. Dada uma equação de diferenças (ou mapa), os pontos-fixos  $x^*$  são definidos como os valores  $\vec{x}_n$  tais que  $\vec{x}_n = \vec{x}_{n+1} = \dots = \vec{x}^*$ , ou seja, é o conjunto de valores para qual o mapa

$$\vec{x}_{n+1} = \vec{f}(\vec{x}_n), \quad (\text{D.1})$$

---

<sup>1</sup>O mapa pode ser linearizado pela expansão de Taylor em torno do ponto-fixa, desprezando os termos de ordem maior que dois.

terá os mesmos valores a partir de um certo  $n$ :

$$\vec{x}^* = \vec{f}(\vec{x}^*). \quad (\text{D.2})$$

A matriz Jacobiana pode ser escrita como:

$$A = \begin{pmatrix} \partial f^{(1)}/\partial x^{(1)} & \partial f^{(1)}/\partial x^{(2)} & \dots & \partial f^{(1)}/\partial x^{(N)} \\ \partial f^{(2)}/\partial x^{(1)} & \partial f^{(2)}/\partial x^{(2)} & \dots & \partial f^{(2)}/\partial x^{(N)} \\ \vdots & & & \\ \partial f^{(N)}/\partial x^{(1)} & \partial f^{(N)}/\partial x^{(2)} & \dots & \partial f^{(N)}/\partial x^{(N)} \end{pmatrix}_{P=\vec{x}^*} \quad (\text{D.3})$$

O conjunto de pontos-fixos de uma mapa é a solução da equação D.2 e para se avaliar sua estabilidade deve-se encontrar os autovalores  $\lambda$  através do determinante de  $A$ , o qual gera o polinômio:

$$P(\lambda) = \lambda^n + a_1\lambda^{n-1} + a_2\lambda^{n-2} + \dots + a_{n-1}\lambda + a_n. \quad (\text{D.4})$$

Para se avaliar a estabilidade pode-se usar o critério de Jury. Este garante que todas as raízes do polinômio são menores que 1 se os coeficientes  $a_j$  satisfazem as seguintes condições:

1.  $|a_n| < 1$ ;
2.  $P(1) > 0$ ;
3.  $P(-1) > 0$  se  $n$  for par;  $P(-1) < 0$  se  $n$  é ímpar;
4.  $|b_{n-1}| > |b_0|$ ;  $|c_{n-2}| > |c_0|$ ; ...;  $|q_2| > |q_0|$ , onde:

$$b_j = \begin{vmatrix} a_n & a_{n-1-j} \\ 1 & a_{j+1} \end{vmatrix} \quad j = 1, 2, \dots, n-1; \quad (\text{D.5})$$

$$c_j = \begin{vmatrix} b_{n-1} & b_{n-2-j} \\ b_0 & b_{j+1} \end{vmatrix} \quad j = 1, 2, \dots, n-2; \quad (\text{D.6})$$

$$\vdots \quad (\text{D.7})$$

$$q_j = \begin{vmatrix} p_3 & p_{2-j} \\ p_0 & p_{j+1} \end{vmatrix} \quad j = 1, 2. \quad (\text{D.8})$$

Os determinantes  $b_j, c_j, \dots$  são calculados os sucessores em função dos antecessores, sendo  $b_j$  calculado em função dos coeficientes  $a_j$  do polinômio D.4. Por exemplo, no caso bidimensional ( $n = 2$ ), a equação de auto-valores é:

$$\lambda^2 + a_1\lambda + a_2 + a_2\lambda = 0, \quad (\text{D.9})$$

e pelo critério de Jury têm-se as condições para que o sistema seja estável serão:  $|a_2| < 1, P(1) > 0$  e  $P(-1) > 0$ . Para um estudo detalhado da estabilidade em mapas é indicada a bastante interessante referência [112].

# Apêndice E

## A análise de Hurst

A chamada análise de Hurst ou “rescaled range analysis” ou ainda análise “R/S”, consiste em calcular a relação entre quantidade denominada *range* e o desvio padrão. Para a série temporal representada por  $x_k$ , ( $k = 1, 2, \dots, N_{max}$ ), o *range*  $R$  é dado por:

$$R(\tau) = \max_{1 \leq t \leq \tau} X(t, \tau) - \min_{1 \leq t \leq \tau} X(t, \tau), \quad (\text{E.1})$$

ou seja, é a diferença entre o mínimo e máximo da quantidade  $X(t, \tau)$ , que representa a soma cumulativa em relação a média da série temporal, e é dada por:

$$X(t, \tau) = \sum_{k=1}^t (x_k - \langle x \rangle_\tau), \quad (\text{E.2})$$

com a média sobre um período  $\tau$  dada por:

$$\langle \xi \rangle = \frac{1}{\tau} \sum_{k=1}^{(\tau)} x_k. \quad (\text{E.3})$$

A quantidade de  $S$  é o desvio padrão usual, calculado para um período  $\tau$ :

$$S = \sqrt{\frac{1}{\tau} \sum_{k=1}^{\tau} (x_k - \langle x \rangle_\tau)^2}. \quad (\text{E.4})$$

Hurst observou que para muitos registros temporais  $R/S$  segue uma lei do tipo:

$$R/S = (\tau/2)^H. \quad (\text{E.5})$$

O valor do expoente  $H$  reflete três tipos básicos de comportamento do registro temporal (espacial): *i*)  $H = 1/2$  - as correlações decaem muito rapidamente e a série representa então um processo aleatório independente, como no caso do movimento Browniano ordinário; *ii*)  $H > 1/2$  - tem-se o chamado comportamento persistente, ou seja, uma tendência do passado da série (seja ela uma tendência de aumento ou decaimento), *persistirá* - em média - no futuro; *iii*)  $H < 1/2$  - tem-se a antipersistência, ou seja, uma tendência no passado, provocará o efeito contrário no futuro. Para uma melhor discussão do método, é recomendada a referência [97]

# Apêndice F

## O formalismo Multifractal.

Considere um conjunto de pontos distribuídos sobre um (hiper)-volume de tamanho linear  $L$ , ou seja um volume  $L^E$ , onde  $E$  é a dimensão volume do espaço euclidiano no qual a medida está embutida. Os pontos podem representar membros de uma população de seres vivos distribuídos sobre a superfície da Terra, pontos num espaço de fases, medidas geofísicas sobre a superfícies da Terra, ou qualquer outra medida física. Seja  $N$  o número total de pontos,  $N_i$  o número de pontos na  $i$ -ésima caixa de tamanho  $\epsilon$ .  $P_i$  é definida como a probabilidade da medida na  $i$ -ésima caixa de tamanho  $\epsilon$ :

$$P_i(\epsilon) = \frac{N_i(\epsilon)}{N}. \quad (\text{F.1})$$

Definindo uma função de partição:

$$Z_q(\epsilon) = \sum_i^{n_i(\epsilon)} P_i^q, \quad (\text{F.2})$$

onde  $n_i(\epsilon)$  representa o número de caixas na resolução  $\epsilon$ , se a medida tiver uma distribuição multifractal, espera-se que a função de partição seja uma

função da escala  $\epsilon$  com a forma:

$$Z(q) \propto \epsilon^{\tau_q}, \quad (\text{F.3})$$

onde  $\tau$  é chamado de expoente de correlação ou expoente de massa de ordem  $q$ . Cada  $P_i$  segue uma relação de escala com  $\epsilon$ :

$$P_i(\epsilon) \propto \epsilon^{\alpha_i}, \quad (\text{F.4})$$

onde  $\alpha_i$  é o chamado de expoente de Lipschitz-Hölder. O espectro de dimensões generalizadas é definido por:

$$D_q = \frac{1}{q-1} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\ln Z_q(\epsilon)}{\ln \epsilon}. \quad (\text{F.5})$$

Assim a relação entre  $D_q$  e o expoente  $\tau_q$  é

$$\tau_q = (q-1)D_q. \quad (\text{F.6})$$

A mesma informação dada pelas dimensões generalizadas pode ser obtida de forma mais intuitiva pela conhecida função  $f(\alpha)$ , a qual é obtida pela transformada de Legendre da função  $\tau(q)$ :

$$f(\alpha_q) = q\alpha_q - \tau_q; \quad (\text{F.7})$$

$$\alpha_q = \frac{d\tau_q}{dq}. \quad (\text{F.8})$$

A função  $f(\alpha)$  fornece o dimensão fractal  $f$  do sub-conjunto da medida com expoente de Lipschitz-Hölder  $\alpha$ .

# Apêndice G

## O $q$ -tripleto da Mecânica

## Estatística não-Extensiva

Inspirado na teoria dos multifractais, C. Tsallis propôs em 1988 [96] a chamada entropia não-extensiva dada por:

$$S_q = k \frac{1 - \sum_{i=1}^W p_i^q}{q - 1}, \quad (\text{G.1})$$

a qual se reduz a entropia de Boltzmann-Gibbs ( $S_{BG}$ ), quando  $q$  se aproxima de um:  $\lim_{q \rightarrow 1} S_q = S_{BG}$ . O valor do “índice entrópico”  $q$  é uma característica de cada sistema. Acredita-se que o valor de  $q$  para um sistema específico deve ser determinado a partir da dinâmica microscópica. Esta discussão está na origem de uma explicação dinâmica para mecânica estatística, a qual, mesmo no formalismo de BG, ainda não é completamente compreendida [113]. O formalismo não-extensivo tem sido intensivamente estudado e tem tido sucesso na descrição de fenômenos complexos que, em geral, exibem comportamentos do tipo lei-de-potência, além de aplicações em várias disciplinas [113]. Para que haja uma compreensão dinâmica da Mecânica estatística não-extensiva,

um ponto fundamental, seria o conhecimento *a priori* do parâmetro  $q$ . Assim os aspectos macroscópicos do sistema trariam informações sobre comportamento microscópico deste. Este ponto ainda tem aspectos a serem esclarecidos (assim como o mesmo problema na física estatística usual). Acredita-se que a resposta esteja ligada a uma ocupação parcial (multifractal) do espaço de fases do sistema. Este tipo de ocupação viola a hipótese de equiprobabilidade dos estados acessíveis. Tsallis [114] conjecturou que, para certos sistemas, seria necessário um conjunto de três índices - o chamado *q-tripletto*:  $(q_{sen}; q_{rel}; q_{est})$ , para uma completa descrição destes, onde *sen*, *rel* e *est* significam, respectivamente, sensibilidade, relaxação e estado estacionário. Os três índices recuperam a mecânica estatística padrão quando  $q_{sen} = q_{rel} = q_{est} = 1$ . A seguir será feita uma breve descrição de como o *q-tripletto* surge no contexto da mecânica estatística.

1. **Sensibilidade às condições iniciais** - A mecânica estatística BG é relacionada a alta sensibilidade às condições iniciais ou seja dada duas trajetória no espaço de fase arbitrariamente próximas  $x(t)$  e  $x'(t)$ , a quantidade  $\xi(t) = \lim_{\Delta(0) \rightarrow 0} \frac{\Delta(t)}{\Delta(0)}$ , com  $\Delta(t) = x(t) - x'(t)$ , evolui segundo a equação:

$$\frac{d\xi}{dt} = \lambda_1 \xi, \quad (\text{G.2})$$

com solução

$$\xi(dt) = e^{\lambda_1 t}, \quad (\text{G.3})$$

onde os expoentes  $\lambda_1$  (expoentes de Lyapunov) são positivos e diferentes de zero (caos molecular). Mas se  $\lambda_1 = 0$  (caos fraco) a evolução de  $\xi$  é dada por

$$\frac{d\xi}{dt} = \lambda_{q_{sen}} \xi^{q_{sen}}, \quad (\text{G.4})$$

com solução (sensibilidade em lei de potência)

$$\xi(t) = e_{q_{sen}}^{\lambda_{q_{sen}}^t}, \quad (\text{G.5})$$

onde

$$e_q^x \equiv [1 + (1 + q)x]^{1/(1+q)} \quad (e_1^x = e^x) \quad (\text{G.6})$$

é a chamada  $q$ -exponencial, e

$$\ln_q x \equiv \frac{x^{1-q} - 1}{1 - q} \quad (\ln_1 x = \ln x), \quad (\text{G.7})$$

é o chamado  $q$ -logaritmo. Para  $q = 1$ :  $e_1^x = e^x$  e  $\ln_1 x = \ln x$ . Assim, mecânica estatística de BG é recuperada.

2. **Relaxação** - A mecânica estatística BG está relacionada a relaxação exponencial de quantidades macroscópicas rumo ao equilíbrio. Assim, seja a grandeza macroscópica  $O$ , e a quantidade

$$\Omega \equiv \frac{O(t) - O(\infty)}{O(0) - O(\infty)}, \quad (\text{G.8})$$

cuja evolução rumo ao equilíbrio é dada por

$$\frac{d\Omega}{dt} = -\frac{1}{\tau_1}\Omega, \quad (\text{G.9})$$

com solução

$$\Omega(dt) = e^{-t/\tau_1}, \quad (\text{G.10})$$

onde  $\tau$  é o tempo de relaxação. Por analogia, em sistemas não-extensivos teremos

$$\frac{d\Omega}{dt} = -\frac{1}{\tau_{qrel}}\Omega^{qrel} \quad (\text{G.11})$$

com solução

$$\Omega(t) = e_{qrel}^{t/\tau_{qrel}}. \quad (\text{G.12})$$

3. **Estado estacionário** - A função densidade de probabilidade de BG é um exponencial que descreve o estado de equilíbrio térmico caracterizado pela temperatura  $T$ . Para um sistema com interações locais e com auto-valores do Hamiltoniano dados por  $E_i$ , as probabilidades para os estados, no equilíbrio térmico são dadas por:

$$p_i = \frac{e^{-\beta_1 E_i}}{Z_1} \quad (\beta_1 \equiv 1/kT; \quad Z_1 \equiv \sum_j e^{-\beta_1 E_j}). \quad (\text{G.13})$$

Como já foi observado na literatura [114], esta distribuição pode também ser obtida por:

$$\frac{d(p_i Z_1)}{dE_i} = -\beta_1 (p_i Z_1). \quad (\text{G.14})$$

Para sistemas com interações de longo alcance, teremos por analogia

$$\frac{d(p_i Z_{qstat})}{dE_i} = -\beta_{qstat} (p_i Z_{qstat})^{qstat}, \quad (\text{G.15})$$

com solução

$$p_i = \frac{e^{-\beta_{qstat} E_i}}{Z_{qstat}} \quad (\beta_{qstat} \equiv 1/kT_{stat}; \quad Z_{qstat} \equiv \sum_j e^{-\beta_{qstat} E_j}). \quad (\text{G.16})$$

# Apêndice H

## Código MATLAB/OCTAVE para o Cálculo da MF-DFA

```
function mdfda
% d0=ordem da mdfda
do=5;

entra e le os arquivos de dados
%arq=(dir('retornos/*.dat'));
arq=(dir('/home/jeferson/duvida/*.dat'));
arq=[char(arq.name)]
ndata=[size(arq)];
ndata=ndata(1,1);

for ia =1:ndata;

c=strcat('/home/jeferson/duvida/',arq(ia,:));
```

```

file=load(c);
file=file(:,2);

% faz a dupla soma da serie
N=length(file');
y=cumsum(file-mean(file));
y=cumsum(y-mean(y));
clear file

% a funcao scale define uma escala s em potencias de 2
s=scale;

% duplo 'loop' sobre a escala k e sobre cada segmento nu numa dada
% escala k, onde e ajustado um polinomio de ordem do para cada segmento
for k=1:length(s);
    for nu=1:1:floor(N/s(k));
        F2(k,nu)= sum((y(((nu-1)*s(k)+1 ) : ((nu-1)*s(k)+s(k))))-
polyval(polyfit((1:s(k))',y(((nu-1)*s(k)+1) : ((nu-1)*s(k)+s(k))),do),(1:s(k))')).
    end
    ni(k)=N/s(k);
    F2(k,:)=F2(k,+)/s(k);
end

clear y

%calculo de da funcao F(q,s) para cada escala e para cada momento de ordem q
qmin=-20;

```

```
qmax=20;
q=qmin:0.25:qmax;
for i=1:length(s);
    for j=1:length(q);
        F=F2(i,find(F2(i,:)));
        Fq(i,j)=( sum(F.^(q(j)/2)) / ni(i) ).^(1/q(j));
    end
    fqs(i,:)=Fq(i,+)/s(i);
end
% claculo de F(q,s) para q=0
j=find(q==0);
for i=1:length(s);
    F=F2(i,find(F2(i,:)));
    Fq(i,j)=exp( sum(log(F.^2)) / (2*ni(i)));
    fqs(i,:)=Fq(i,+)/s(i);
end

% salva os parametros utilizados
save /home/jeferson/retornos/s.mat s
save /home/jeferson/retornos/q.mat q
save /home/jeferson/retornos/fqs.mat fqs
save /home/jeferson/retornos/nome.mat c

% chama a rotina para ajustar os expoentes h(q) a partir de F(q,s)
% e fazer a transformada de Legendre
```

```
ajuste(ia);
```

```
end
```

```
toc
```

# Bibliografia

- [1] F. Iachello e S. Oss. *Eur. Phys. J. D* , **19**, 307 (2002).
- [2] P. Van Isacker A. Frank. *Algebraic method in molecular and nuclear structure physics*. John Wiley, New York (1994).
- [3] W. Heisenberg. *Z. Phys.*, **33**, 879 (1925).
- [4] M. Born e W. Heisenberg e P. Jordan. *Z. Phys.*, **35**, 557 (1926).
- [5] J.J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*. Addison-Wesley Publishing Company, Boston (1994).
- [6] S. Majid. *Foundations of Quantum Group Theory*. Cambridge University Press, Cambridge (1995).
- [7] N.M. Oliveira Neto. *Álgebras de Heisenberg Generalizadas: Partículas Compostas e Estados de Qause-Equilíbrio*. Tese de Doutorado, Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas (2006).
- [8] C. Daskaloyannis e D. Bonatsos. *Prog. Part. Nucl. Phys.*, **43**, 537 (1999).
- [9] E.M.F. Curado e M.A. Rego-Monteiro. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **34**, 3253 (2001).

- [10] J.C.A. Barata. *Curso de Física-Matemática*.  
[http://denebola.if.usp.br/~jbarata/Notas\\_de\\_aula/](http://denebola.if.usp.br/~jbarata/Notas_de_aula/).
- [11] P. Kulish e N. Reshetikhin. *J. Sov. Math.*, **23**, 2435 (1983).
- [12] L.C. Biedenharn. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **22**, L873 (1989).
- [13] A.J. Macfarlane. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **22**, 4581 (1989).
- [14] I. Roditi, M.A. Rego-Monteiro e L.C.M.S. Rodrigues. *Phys. Lett. A*, **188**, 11 (1994).
- [15] S. Wolck, M.A. Monteiro e L.M.C.S. Rodrigues. *Phys. Rev. Lett.*, **76**, 1098 (1996).
- [16] A. Lavagno e P.N. Swamy. *Phys. Rev. E*, **65**, 036101 (2002).
- [17] N.M. Oliveira-Neto, E.M.F. Curado, F.D. Nobre e M.A. Rego-Monteiro. *Physica A*, **344**, 573 (2004).
- [18] M. Angelova, V.K. Dobrev e A. Frank. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **34**, L503 (2001).
- [19] M. Angelova. *Phys. Part. Nucl.*, **33**, S37 (2002).
- [20] A. Algin e B. Deviren. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **38**, 5945 (2005).
- [21] L.D. Faddeev. *Les Houches Session XXXIX*. Elsevier, Amsterdam (1982).
- [22] J. de Souza, N.M. Oliveira-Neto e C.I. Ribeiro Silva. *Eur. J. Phys. D*, **40**, 205 (2006).

- [23] D. Bonatsos, P. P. Raychev e A. Faessler. *Chem. Phys. Lett.*, **178**, 221 (1991).
- [24] E.M.F. Curado, V.B. Bezerra e M. A. Rego-Monteiro. *Phys. Rev. D*, **66**, 085013 (2002).
- [25] M.A. Rego-Monteiro V.B. Bezerra, E.M.F. Curado. *Int. J. Mod. Phys. A*, **18**, 2025 (2003).
- [26] D. Bonatsos e C. Daskaloyannis. *Phys. Rev. A*, **46**, 75 (1992).
- [27] D. Bonatsos, E.N. Argyres, S.B. Drenska, P.P. Raychev, R.P. Roussev e Yu. F. Smirnov. *Phys. Lett. B*, **251**, 477 (1990).
- [28] V.K. Dobrev, M.N. Angelova e A. Frank. *Eur. Phys. J. D*, **31**, 27 (2004).
- [29] R.J. Finkelstein. *Lett. Math. Phys.*, **34**, 169 (1995).
- [30] E.M.F. Curado, V.B. Bezerra e M. A. Rego-Monteiro. *Phys. Rev. D*, **65**, 065020 (2002).
- [31] M.A. Rego-Monteiro, Y. Hassouni e E.M.F. Curado. *Phys. Rev. A*, **71**, 022104 (2005).
- [32] B.P. Palladino e P.L. Ferreira. *Rev. Bras. Ens. Fis.*, **21**, 490 (1999).
- [33] M. Arik e D.D. Coon. *J. Math. Phys.*, **17**, 524 (1976).
- [34] R. Parthasarathy e K.S. Viswanathan. *J. Phys. A*, **24**, 613 (1991).
- [35] K.S. Viswanathan, R. Parthasarathy e R. Jagannathan. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **25**, L335 (1992).

- [36] R. Chakrabarti e R. Jagannathan. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **24**, L711 (1991).
- [37] D. Bonatsos, N. Karoussos, P. P. Raychev e R. P. Roussev. *Condens. Matter Theor.* **15**, 25 (2000).
- [38] B.P. Palladino e P.L.Ferreira. *Braz. J. Phys.*, **28**, 444 (1998).
- [39] G. E. M. Vargas. *Introdução aos Métodos Algébricos Adimensionais em Espectroscopia Molecular*. Tese de Mestrado , Inst. de Física de São Carlos - USP (2003).
- [40] C. Lawrence e L.C. Biedenharn. *Quantum Group Symmetry and  $q$ -Tensor Algebras*. World Scientific Publishing Co., Singapore (1995).
- [41] H.N. Nazareno, E.M.F Curado e M.A. Rego-Monteiro. *Phys. Rev. A*, **64**, 012105 (2001).
- [42] A. W. Mantz, J.K.G Watson, K.N. Rao, D.L. Albritton, A.L. Schmeltekopf e R.N. Zare. *J. Mol. Spectrosc.*, **39**, 180 (1971).
- [43] H. Haken e H.C. Wolf. *Molecular Physics And Elements Of Quantum Chemistry: Introduction To Experiments And Theory*. Springer International, Berlin (1995).
- [44] C. Frankenberg, J. F. Meirink, M. van Weele, U. Platt e T. Wagner. *Science*, **308**, 1010 (2005).
- [45] M. Wang, S. Ding, D. Feng e H. Liu. *Phys. Rev. A*, **66**, 022506 (2002).
- [46] E. Kim e S. Yamamoto. *J. Mol. Spectrosc.*, **219**, 296 (2003).

- [47] A. Mishra, B.J. Shetty e R.J. Kshirsagar. *J. Mol. Spectrosc.*, **232**, 296 (2005).
- [48] Z. Chang e H. Yan. *Phys.Rev. A*, **44**, 7405 (1991).
- [49] P. M. Morse. *Phys. Rev.*, **34**, 57 (1929).
- [50] A. R. Lee, T.M. Kalotas e N.A. Adams. *J. Mol. Spectrosc.*, **191**, 137 (1998).
- [51] J. N. Huffaker. *J. Chem. Phys.*, **64**, 3175 (1976).
- [52] A. Requena, A. López Pieiro e B. Moreno. *Phys. Rev. A*, **34**, 4380 (1986).
- [53] J. Plíva. *J. Mol. Spectrosc.*, **193**, 7 (1999).
- [54] S.R. Langhoff e H. Partridge. *J. Chem. Phys.*, **74**, 2361 (1981).
- [55] M. Selg. *Phys. Scripta*, **60**, 491 (1999).
- [56] M. Dulick, K.Q. Zhang, e B. Guo. *J. Mol. Spectrosc.*, **188**, 14 (1998).
- [57] W. Sun, W. Ren, S. Hou e H. Feng. *Mol. Phys.*, **103**, 2335 (2005).
- [58] M. Kobersi, M. Dagher e H. Kobeissi. *J. Comput. Chem.*, **16**, 723 (1995).
- [59] H.A. Witek, D.G. Fedorov, A. Viel, P-O. Widmar e K. Hirao. *J. Chem. Phys.*, **116**, 8396 (2002).
- [60] R. D. Levine e F. Iachello. *J. Chem. Phys.*, **77**, 3046 (1982).
- [61] F. Iachello. *Chem. Phys. Lett* , **78**, 581 (1981).

- [62] Xi-Wen Hou, Mi Xie e Zhong-Qi Ma. *Chem. Phys. Lett.*, **262**, 1153 (1996).
- [63] R. Lemus e A. Frank. *J. Mol. Spectrosc.*, **201**, 198 (2000).
- [64] S. Ding e Y. Zheng. *J. Mol. Spectrosc.*, **201**, 109 (2000).
- [65] M. A. Rego-Monteiro, I. Roditi e L. M. C. S. Rodrigues. *Int. J. Mod. Phys. B*, **8**, 3281 (1994).
- [66] V. Spiridonov. *Phys. Rev. Lett*, **69**, 398 (1992).
- [67] C. Daskaloyannis, D. Bonatsos e K.D. Kokkotas. *J. Math. Phys.*, **9**, 2958 (1992).
- [68] D. Bonatsos e C. Daskaloyannis. *Chem. Phys. Lett.*, **203**, 150 (1993).
- [69] K.D. Sviratcheva, C. Bahri, A. I. Georgieva e J. P. Draayer. *Phys. Rev. Lett.*, **93**, 152501 (2004).
- [70] D. Bonatsos, C. Daskaloyannis e K. Kokkotas. *Phys. Rev. A* , **45**, R6153 (1992).
- [71] A. Fazzio, J.D.M. Vianna e S. Canuto. *Teoria Quântica de Moléculas e Sólidos: Simulação Computacional*. Livraria da Física Editora, São Paulo (2004).
- [72] L.S. Rothman *et al.*. *J. Quant. Spectrosc. & Radiat. Transfer*, **82**, 5 (2003).
- [73] E.L. Albuquerque e M.G. Cottam. *Phys. Rep.*, **376**, 225 (2003).
- [74] A.A. Grinberg e S. Luryi. *Phys. Rev. Lett.*, **65**, 1251 (1990).

- [75] J. de Souza, E.M.F. Curado e M.A. Rego-Monteiro. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **39**, 10415 (2006).
- [76] A.F. Horadam. *Fibonacci Quart.*, **3**, 161 (1965).
- [77] A.F. Horadam. *Duke Math. J.*, **32** 437 (1965).
- [78] J. Meyer, R. Barbier e M. Kibler. *Int. J. Mod. Phys. E - Nuc. Phys.*, **4**, 385 (1995).
- [79] M. Arik, E. Demircan, T. Turgut, L. Ekinici e M. Mungan. *Z. Phys. C - Part. Fields*, **55**, 89 (1992).
- [80] R.N. Mantegna e H.E. Stanley. *An introduction to Econophysics: Correlations and Complexity in Finance*. Cambridge University Press, Cambridge (1999).
- [81] J.P. Bouchaud e M. Potters. *Theory of Financial Risks: From Statistical Physics to Risk Management*. Cambridge University Press, Cambridge (2000).
- [82] J. Voit. *The Statistical Mechanics of Financial Markets*. Springer-Verlag, Berlin (2003).
- [83] M. Gell-Mann e C. Tsallis (Editores). *Nonextensive Entropy - Interdisciplinary Applications*. Oxford University Press, New York (2004).
- [84] B.B. Mandelbrot. *Sci. Am.*, **280**, 70 (1999).
- [85] K. Matia, Y. Ashkenazy e H.E. Stanley. *Europhys. Lett.*, **61** 422 (2003).
- [86] S. Ghashghaie, W. Breymann, J. Peinke, P. Talkner e Y. Dodge. *Nature*, **381**, 767 (1996).

- [87] J.F. Muzy, A. Arnéodo e D. Sornette. *Eur. Phys. J. B*, **2**, 277 (1998).
- [88] J.M. Karpoff. *J. Finan. Quantitat. Anal.*, **22**, 109 (1997).
- [89] X. Gabaix, P. Gopikrishnan, V. Plerou e H.E. Stanley. *Phys. Rev. E*, **62**, R4493 (2000).
- [90] L. Borland, R. Osorio e C. Tsallis. *Nonextensive Entropy - Interdisciplinary Applications* (M. Gell-Mann e C. Tsallis, Eds.). Oxford University Press, New York, pp. 321 (2004).
- [91] S.M. Duarte Queirós. *Europhys. Lett.*, **73**, 339 (2005).
- [92] L.G. Moyano J. de Souza e S.M. Duarte Queirós. *Physica A*, **371**, 118 (2006).
- [93] S.M. Duarte Queirós, L.G. Moyano, J. de Souza e C. Tsallis. *Eur. Phys. J. B* **55**, 161 (2006).
- [94] J. de Souza, L.G. Moyano e S.M. Duarte Queirós. *Eur. Phys. J. B*, **50**, 165 (2006).
- [95] J. W. Kantelhardt, S.A. Zschiegner, E. Koscielny-Bunde, A. Bunde, S. Havlin e H.E. Stanley. *Physica A*, **316**, 87 (2002).
- [96] C. Tsallis. *J. Stat. Phys.*, **52**, 479 (1988).
- [97] J. Feder. *Fractals*. Plenum, New York (1988).
- [98] H.E. Hurst. Long-term storage capacity of reservoirs. *Trans. Am. Soc. Civil. Eng.*, **116**, 770 (1951).
- [99] A. Admati e P. Pfleiderer. *Rev. Financ. Stud.*, **1**, 3 (1988).

- [100] Y. Liu, P. Gopikrishnan, P. Cizeau, M. Meyer, C-K. Peng, e H.E. Stanley. *Phys. Rev. E.*, **60**, 1390 (1999).
- [101] P. Ch. Ivanov, L.A.N. Amaral, A.L. Goldberger, S. Havlin, M.G. Rosenblum, H.E. Stanley e Z. Struzik. *Chaos*, **11**, 641-652 (2001).
- [102] M. Montero, J. Perelló, J. Masoliver, F. Lillo, S. Miccichè e R. Mantegna. *Phys. Rev. E*, **72**, 056101 (2005).
- [103] S. M. Duarte Queirós. *Europhys. Lett.* **80**, 30005 (2007).
- [104] G. M. Schütz e S. Trimper. *Phys. Rev. E*, **70**, 045101 (2004).
- [105] C. Tsallis. *Phys. Rev. E*, **58**, 1442 (1998).
- [106] A.R. Plastino, L. Borland e C. Tsallis. *J. Math. Phys.: Math. Gen.*, **39**, 6490 (1998).
- [107] E.G.D. Cohen e C. Beck. *Physica A*, **322**, 267 (2003).
- [108] E.G.D. Cohen. *Physica D*, **193**, 35 (2004).
- [109] M.L. Lyra e C. Tsallis. *Phys. Rev. Lett.*, **80**, 53 (1998).
- [110] F. Baldovin e A. Robledo. *Phys. Rev. E*, **69**, 045202(R) (2004).
- [111] F. Iachello. *Nucl. Phys. A*, **751**, 329 (2005).
- [112] L.H.A. Monteiro. *Sistemas Dinâmicos*. Editora Livraria da Física, São Paulo (2002).
- [113] L.G. Moyano. *Mecânica estatística não-extensiva em sistemas complexos: fundamentos dinâmicos e aplicações*. Tese de Doutorado, Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas - Rio de Janeiro (2006).

- [114] C. Tsallis. *Physica A*, **340**, 11 (2004).