

APROXIMAÇÕES UNIFORMES DE
OPERADORES DE DENSIDADE NO ESPAÇO
DE FASES

DAVID EDUARDO ZAMBRANO RAMÍREZ

CENTRO BRASILEIRO DE PESQUISAS FÍSICAS - CBPF/MCT

Rio de Janeiro, Brasil

2007

Tese de mestrado submetida ao Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas
sob orientação do Professor **Alfredo Miguel Ozorio de Almeida**
para a obtenção do título de Mestre em Física por
Eduardo Zambrano

2007

*“Si saber no es un derecho,
seguro será un izquierdo”*

S. Rodríguez

*A las mujeres que
alegran la casa con su presencia,
Doña Tere y Liliana Sol.*

Agradecimentos

A minha família, don Ricardo, doña Teresa, Pavel (Daniel), Pepe (Pedro) e Lili (Soledad), quem apesar da distância, ainda fazem parte importante da minha vida. E ao novo membro dela, Danielito, meu primeiro sobrinho. Ao quinto irmão Dru (Andrés), pela hospitalidade *bonairense*.

Ao professor Alfredo, o orientador desta dissertação, pelo apoio e por ser quem me incentivou a mergulhar no espaço de fases quântico.

Aos meus amigos, que me acompanharam antes e durante (e espero que depois) do mestrado. A lista é comprida, sem discriminação de ordem. Aos *impainos*: Javier Solano, Freddy Hernández, Damián Fernández, el costeño Juan Carlos Galvis, Wanderson Lambert, Francisco Valenzuela (pancho), César Vélez, Duílio Tadeu, Juan González, Maria João Soares, Jhon Mira e Gabriela Fernández, que me tenderam a mão na chegada ao Rio, embora não souberam onde ficava o CBPF. A Guillermo Rodríguez, John Morales, Toño Sánchez e Carlos Garavito (el rector), por me ajudar no primeiro passo na viagem para terras cariocas. Aos *panas*: Alexis Hernández, o mestre Cássio Amador, Juliancho Munévar, Carlos Ospina e Leonardo Pachón (el púracó). A Raúl Vallejos pelas discussões semiclássicas. Aos vizinhos de sala: Virginia Torres, Fernando Nicácio (boiúna), Raphael Pupio e Rômulo Abreu (fedini), que fizeram da ala B do 6 andar algo mais do que um simples corredor. Aos meus professores no mestrado: José Heläyel, Roldofo Bonifacio, Itzhak Roditi, Evaldo Curado e Caio Lewenkopf. Aos parceiros das *frijoladas*, as quais nos ocasionaram um coma gastronômico: Mayra Vargas, Carlos Molina, Ana

María, Angélica Acosta e Pablo Mariño. Ao *costeño* Fabio Fajardo e Nátaly Jiménez, pela hospitalidade pernambucana. Ao pessoal que *embuenahora* fizeram parte do meu convívio diário, tanto nativos quanto estrangeiros: Martín Aparicio (delfín), Gabriel Flórez (marmota), Gabriel Guerrer (lrl), Airon Fonteles, Carlos Bonilla, Johana Pacheco, Víctor Vásquez (victícor), William Trujillo (williamcín), o mestre Augustão Alves, José Palomino (palominenkov), Jandira Oliveira, Alfredo Vargas, Marcus Fonseca, Nathany Belmaia, Habib Dumet, Tiago Siman, Marcelo Apel, Fabrício Amaral (evangelito), Érico Goularth (oscar), Yolanda, Maria Borba, William Alayo, Rodrigo Muniz, Maurício Habert (crítico), Sílvio Queiroz, Tadeu Almeida, Octavio Rodríguez, Miguel Crokidakis (núnio), Felipe Poulis (jesús), Rodrigo Turcati, Guillermo Avendaño, Jefferson Morais e Juliana Passipieri; aos *Rafael*es Aranha, Bernardi, Chaves (planeta) e Perez; aos *Andrés* Gavini, Lemos e Marcianesi e aos *Diegos* Guimarães e Pantoja, demonstrando-se assim que esses três nomes são muito comuns no Brasil. A seu Osmar Amador e família, cuja ajuda é imensurável. A José Ricardo, Myriam Coutinho, Rosângela de Castro, Elizabeth Lemos, Almério de Castro, Denise Coutinho e ao pessoal administrativo do CBPF. Aos seguranças do CBPF, especialmente a seu Jorge, Flávio e Michel. A Alexander Ramírez e Augusto León pela torcida no *morumbazo*. Aos porteiros do meu prédio: Amauri, Espedito e Antônio, embora sempre durmam nos turnos de noite. À galera do futebol das quartas no Benjamím, especialmente ao Ivanildo de Oliveira (garoto-novo). Aos caras do Bina: Messías (moisés) e Geraldo (don muequito), pelo melhor mocotó de Botafogo. Aos que me visitaram, embora tenha sido para não pagar hotel: Moisés Delgado, Andrés Bautista (gordo-fotinho), Giovanni *Babato* Babativa.

Agradeço enormemente às agências brasileiras de fomento à pesquisa FAPERJ e CAPES, que fazem do Brasil um ótimo destino científico.

Finalmente a todos aqueles que fizeram parte do churrasco da defesa.

Resumo

Os operadores de densidade no espaço de fases são representados pela função de Wigner e a sua transformada de Fourier, a função de Cordas. No caso de um grau de liberdade, a função de Wigner semiclássica para autoestados de energia tipo Bohr-Sommerfeld apresenta uma cáustica ao longo da correspondente curva fechada clássica no espaço de fases. A sua transformada de Fourier, a função de Cordas semiclássica, também possui uma cáustica ao longo da curva conjugada definida pelo conjunto de diâmetros, isto é, as cordas maximais da curva original. Se a curva for convexa, sua conjugada também será e a cáustica resulta ser uma dobra simples. A aproximação uniforme através destas cáusticas, que derivamos neste trabalho, descreve a transição sofrida pela sobreposição de um estado e sua translação, entre um regime oscilatório e um evanescente, atingindo amplitude máxima perto da cáustica. Também avaliamos a cáustica de diâmetros para a função de Wigner.

Abstract

Density operators in phase space are represented by the Wigner function and its Fourier transform, i.e, the characteristic function or chord function. The semiclassical Wigner function for a Bohr-quantized energy eigenstate is known to have a caustic along the corresponding classical closed phase space curve in the case of a single degree of freedom. Its Fourier transform, the semiclassical chord function, also has a caustic along the conjugate curve defined as the locus of diameters, i.e. the maximal chords of the original curve. If the latter is convex, so is its conjugate, resulting in a simple fold caustic. The uniform approximation through this caustic, that is here derived, describes the transition undergone by the overlap of the state with its translation, from an oscillatory regime for small chords, to evanescent overlaps, rising to a maximum near the caustic. The diameter-caustic for the Wigner function is also treated.

Conteúdo

Resumo	vi
Abstract	vii
1 Introdução	1
2 Aproximações assintóticas	5
2.1 Soluções WKB para equações diferenciais	6
2.2 Método de ‘ponto de sela’ para integrais	9
2.3 Aproximação uniforme para integrais	12
3 Mecânica quântica no espaço de fases	16
3.1 Centros e cordas clássicas	16
3.2 Formalismo quântico	22
3.3 O operador densidade	26
3.4 A função de Wigner e a função de Cordas	27
4 Regime semiclássico da mecânica quântica	31
4.1 Funções WKB na mecânica quântica	31
5 Função de Wigner semiclássica	36
5.1 Construção semiclássica da função de Wigner	37
5.2 Catástrofes da função de Wigner	42
5.3 Aproximações uniformes da função de Wigner	45

5.3.1	Regime de corda curta	45
5.3.2	Regime de corda longa	48
5.4	Regime transicional da função de Wigner	53
6	Função de Cordas semiclássica	57
6.1	Cordas pequenas e o limite clássico	57
6.2	Fase estacionária para a função de Cordas	58
6.3	Aproximação uniforme da função de Cordas	61
6.4	Regime transicional para a função de Cordas	64
6.5	Regime de cordas longas para estados de Fock	65
6.6	Conexão Wigner-Cordas no regime de cordas longas	68
7	Discussões e Perspectivas	72
A	Cordas cruzadas	75
B	Função de centro para tempos curtos	78

Lista de Figuras

2.1	Gráfico da função $e^{Nf(x)}$	10
3.1	Representação clássica de centros e cordas	20
3.2	Funções geratrizes de centro e de cordas no espaço de fases duplo	20
5.1	Pontos estacionários da função de Wigner	39
5.2	Amplitudes semiclássicas para a função de Wigner.	42
5.3	Catástrofes da função de Wigner	43
5.4	Reflexões do toro com respeito a pontos no seu interior	44
5.5	Cordas estacionárias para a função de Wigner	49
5.6	$S_{\mathcal{I}}$ para pontos próximos do toro	54
5.7	Cordas estacionárias no regime transicional para a função de Wigner	55
6.1	Realizações da corda ξ sobre o toro	59
6.2	Fase semiclássica da função de Cordas	60
6.3	Construção semiclássica para a função de Cordas perto da cáustica	61
6.4	Fase para um estado de Fock	66
6.5	Fase semiclássica para um toro com simetria de reflexão	69
6.6	Comparação entre a função de Wigner e a de Cordas	71
A.1	Avaliação das fases semiclássicas para cordas cruzadas	76

Capítulo 1

Introdução

A representação clássica dos sistemas físicos baseia-se em conceitos que provêm da nossa experiência cotidiana; o mundo newtoniano ao nosso redor é descrito em termos de variáveis tangíveis como a *posição* e a *velocidade*. Mas esse acercamento* não deixa de ser uma aproximação dos fenômenos que acontecem em escalas microscópicas ou *quânticas*. A teoria desenvolvida por Lagrange e depois por Hamilton [1, 2] apresenta o marco teórico que formaliza as idéias do raciocínio newtoniano ou *clássico*; tendo esta teoria, no *espaço de fase* um importante ingrediente que encerra o paradigma da evolução dos sistemas físicos, provendo uma descrição global, além de ser uma poderosa ferramenta geométrica. Com a aparição da mecânica quântica, este grande triunfo intelectual pareceu chegar ao fim, pois, a relação de incerteza de Heisenberg [3] impede aquela representação simultânea da posição e velocidade (ou momento). Com o desenvolvimento de teorias estatísticas clássicas forneceu-se o conceito de distribuição de probabilidade sobre o espaço de fase; especificamente, estas distribuições dão conta da probabilidade do sistema estar localizado em uma região determinada do espaço de fase. Nesta direção, surgiram diferentes propostas para encontrar uma *versão* quântica

*Ao longo do texto, a palavra *acercamento* referir-se-á ao termo em inglês *approach*; diferente de *aproximação*, que fará referência ao termo *approximation*.

daquelas e assim reconciliar a mecânica quântica e o espaço de fase [4]. A função de Wigner [5], é talvez a distribuição mais bem sucedida, embora não possa ser considerada como uma distribuição de probabilidade, porque não é definida positiva.

Usualmente é suposto que a função de Wigner para auto-estados semiclássicos WKB, denotada por $W(\mathbf{x})$ no plano $\mathbf{x} = (\mathbf{p}, \mathbf{q})$, pode ser aproximada por uma função δ de Dirac sobre a correspondente curva clássica no espaço de fase (como é mostrado no capítulo 5). Esta aproximação é útil para calcular valores esperados de observáveis clássicos que apresentam um comportamento suave. Porém, é pouco adequada para descrever efeitos de interferência em experimentos, hoje mais acessíveis, relacionados a informação quântica, óptica quântica, armadilhas de átomos etc. Por isto, torna-se necessário desenvolver descrições semiclássicas mais refinadas para a representação no espaço de fase de estados quânticos, tal como a aproximação uniforme de Berry para a função de Wigner [6].

Um experimento típico de interferência superpõe duas cópias modificadas do mesmo estado inicial (ver [7]). Por exemplo, em óptica quântica, é possível implementar uma transformação unitária que corresponda a uma translação (ou deslocamento) uniforme no espaço de fase. Este estado deslocado interfere então com o estado original. Em geral, o *operador de translação*[†] unitário, \hat{T}_ξ , age sobre o estado $|\psi\rangle$ produzindo o novo estado $|\psi_\xi\rangle = \hat{T}_\xi|\psi\rangle$ em estrita correspondência com uma translação clássica: $\mathbf{x} \mapsto \mathbf{x} + \xi$. Assim, dada uma superposição de um estado e sua translação, $a|\psi\rangle + b|\psi_\xi\rangle$, com $|a|^2 + |b|^2 = 1$, a probabilidade de obter o estado original produto de uma medição sobre o sistema é $|a + b\langle\psi|\psi_\xi\rangle|^2$.

Evidentemente, as medidas dessas probabilidades mediante preparações

[†]No contexto da óptica, \hat{T}_ξ é usualmente chamado de *operador deslocamento* e é expressado em termos dos operadores de aniquilação e criação do oscilador harmônico. Este acercamento é inadequado para a análise semiclássica.

repetitivas fornecem informação detalhada sobre o estado inicial. O conjunto de todas as possíveis superposições desses estados define uma representação completa no espaço de fase. Essa representação corresponde à *função de Cordas* [8, 10], $\chi(\xi)$, também conhecida como a *função característica quântica* ou a *função de Weyl* [11], a qual é a transformada de Fourier da função de Wigner, $W(\mathbf{x})$. A reciprocidade entre a função de Cordas e a de Wigner provém da reciprocidade que existe entre as reflexões e translações no espaço de fase.

Uma conseqüência importante destas representações é que as correlações no espaço de fase [8, 11] para interferência translacional, isto é,[‡]

$$\begin{aligned} C(\xi) &= |\langle \psi | \psi_\xi \rangle|^2 \\ &= (2\pi\hbar)^2 \int d\eta e^{i\eta\wedge\xi/\hbar} |\chi(\eta)|^2 = (2\pi\hbar)^2 \int d\mathbf{x} W(\mathbf{x}) W(\mathbf{x} - \xi), \end{aligned} \quad (1.1)$$

coincide com a autocorrelação da função de Wigner. O fenômeno de interferência usando o formalismo do espaço de fase foi estudado em [11].

Assim, no limite de pequenos deslocamentos, $\xi \rightarrow 0$, as correlações atingem seu máximo valor, $C(0) = 1$. Logo, ao incrementar o tamanho das translações, $C(\xi)$ entra em um regime oscilatório. Tipicamente para os estados próprios de energia, a curva clássica é uma curva de nível do correspondente Hamiltoniano clássico, a qual deve satisfazer a regra de quantização de Bohr-Sommerfeld[11-14]. Para deslocamentos suficientemente longos, a curva original e a translada não se intersectam, obtendo assim uma correlação quase desprezível ou evanescente. A transição entre este comportamento e o regime oscilatório, nomeado anteriormente, toma lugar ao longo de uma cáustica (ou singularidade), onde a função de Cordas alcança valores máximos locais e a aproximação semiclássica mais simples perde a validade. O propósito fundamental desta dissertação é estabelecer a descrição correta desta transição entre o regime oscilatório e o evanescente, através de uma

[‡]As definições das funções $\chi(\xi)$ e $W(\mathbf{x})$ encontram-se no capítulo 3.

aproximação uniforme.

Inicialmente, no capítulo 2, fazemos uma introdução aos métodos de aproximações assintóticas, tanto para soluções de equações diferenciais como para integrais. Continuamos com uma exposição do formalismo da mecânica quântica sobre o espaço de fase, no capítulo 3, com ênfase na relevância das translações e reflexões, para logo, nos capítulos 4, 5 e 6, construir semiclassicamente as funções de Wigner e de Cordas para estados lagrangianos nas diferentes regiões, que são determinadas pela proximidade da singularidade. Como uma aplicação do formalismo desenvolvido, estudamos o comportamento dos estados de Fock (estados excitados do oscilador harmônico) nestas diferentes regiões. Finalmente fazemos uma discussão dos resultados obtidos no capítulo 7.

Capítulo 2

Aproximações assintóticas

Geralmente, os sistemas físicos mais simples são os únicos que possuem solução exata. Na maioria dos casos se faz necessário usar algum tipo de aproximação que descreva corretamente o comportamento das soluções, mediante procedimentos numéricos ou analíticos. Os métodos de *phase-integral* [16-18], ou soluções tipo WKB, são uma boa alternativa de aproximação analítica para a obtenção de soluções de equações diferenciais. Essa técnica é denominada assim no contexto da física em honra a Wentzel, Kramers e Brillouin [20], que foram os primeiros a introduzi-la na mecânica quântica. No entanto, adicionando Jeffreys [21], é denominada por alguns autores como WKBJ. O método foi primeiramente usado por Carlini (1817) (ver refs. em [19]), procurando propriedades das funções de Bessel. Mas em 1837, Liouville [22] e Green [23] publicaram formulações mais gerais do método. Tempos depois, Bailey [25] chamou esse tipo de aproximação como LR, por desconhecer o trabalho de Green, fazendo alusão a Liouville e Rayleigh [24], sendo este último quem aplicara essa teoria na propagação das ondas eletromagnéticas. Citando o mesmo Bailey: “*O uso comum, baseado em uma ignorância histórica, do nome BKW ou WKB (ou quaisquer permutação dessas três letras) está errado e corresponde a uma flagrante injustiça à verdade*”. Despreocupados com essa controvérsia histórica, daqui para frente vamos usar o termo WKB,

como é o usual no contexto da mecânica quântica.

O objetivo principal dessa dissertação é encontrar aproximações para integrais da forma

$$\int g(z) \exp(Nf(z, \alpha)), \quad (2.1)$$

onde as funções $g(z)$ e $f(z, \alpha)$ são analíticas em seus argumentos, α é um parâmetro e N é um parâmetro muito grande. Quando N tende para infinito, podemos encontrar expansões pelo método de *ponto de sela* ou *steepest descents* [17, 19, 21], onde, assume-se que a principal contribuição é devida às vizinhanças dos pontos de sela ou *pontos estacionários* da função f no expoente em (2.1). Quando essas vizinhanças encontram-se próximas umas das outras, não se pode garantir a convergência da aproximação. A restrição do *steepest descents* até segunda ordem da expansão é melhor conhecida na física como *aproximação de fase estacionária* [6, 14, 28]. Esses problemas de convergência podem ser tratados apelando-se ao uso de aproximações que tenham em conta a estrutura geométrica da colisão dos pontos estacionários com a variação dos parâmetros α . As aproximações desses tipo são conhecidas como *aproximações uniformes*, dado que continuam sendo uniformemente válidas, mesmo perto da singularidade*. O método que vamos usar foi proposto por Chester, Ursell e Friedman [26], o qual pode ser generalizado apoiando-se na *teoria das catástrofes* desenvolvida por Thom [31, 32]. A seguir vamos expor brevemente os métodos mencionados anteriormente.

2.1 Soluções WKB para equações diferenciais

Nesta seção seguiremos o mesmo procedimento que em Dingle [19]. Primeiro consideramos a equação diferencial:

$$\frac{d^2 f}{dx^2} + p(x) \frac{df}{dx} + q(x)f(x) = 0, \quad (2.2)$$

*Por singularidade nos referimos ao conjunto de pontos no espaço de parâmetros onde dois ou mais pontos estacionários unem-se.

para a qual, em geral, dificilmente pode-se achar soluções exatas. São diversos os problemas em física teórica que conduzem a equações desse tipo; é comum encontrá-la em sistemas que modelam comportamento ondulatório [17, 18]. Algumas equações transcendentais tem a forma de (2.2). Por exemplo, a *equação de Bessel* de ordem ν é obtida se $p = 1/x$ e $q = 1 - \nu^2/x^2$, enquanto a *equação de Airy* surge quando $p = 0$ e $q = -x$. Estes dois casos possuem soluções exatas em termos de integrais de contorno, a partir das quais podem-se obter soluções em *séries de potências* de x e soluções *assintóticas* para valores grandes de x [17, 18].

Agora fazemos a transformação $x \rightarrow z$, supondo que $x = x(z)$. A regra da cadeia fornece a expressão

$$\frac{d^2}{dx^2} = \frac{1}{x_z^2} \frac{d^2}{dz^2} - \frac{x_{zz}}{x_z^3} \frac{d}{dz}, \quad (2.3)$$

onde $x_z = dx/dz$. Assim a equação (2.2) fica

$$\frac{d^2 f}{dz^2} + \left(p(x)x_z - \frac{x_{zz}}{x_z} \right) \frac{df}{dz} + q(x)f(x)x_z^2 = 0. \quad (2.4)$$

Mudando a variável dependente f para y mediante

$$f(x) = y(x) \exp \left[-\frac{1}{2} \int \left(p(x)x_z - \frac{x_{zz}}{x_z} \right) dx \right], \quad (2.5)$$

obtemos que (2.4) toma a forma padrão da equação de Ricatti, a saber

$$\frac{d^2 y}{dx^2} = F(x)y(x), \quad (2.6)$$

onde $F(x) = (\frac{1}{4}p^2 - q)x_z^2 + \frac{1}{2}p_z x_z + \frac{3}{4}x_{zz}^2/x_z^2 - x_{zzz}/x_z$. Esta simplificação nem sempre pode ser feita (para mais detalhes ver por exemplo [19]). Quando $F(x)$ puder ser escrita como o produto

$$F(x) = \alpha^2 q(x, \alpha),$$

onde α é um parâmetro real muito grande e $q(x, \alpha)$ permanece finita no limite $\alpha \rightarrow \infty$ para x fixo; podemos presumir que a equação (2.6) admite soluções

do tipo *phase-integral* (exponenciais de uma integral), a saber

$$y(x) = \exp\left(\int_{x_0}^x \phi(x')dx'\right), \quad (2.7)$$

onde x_0 é uma constante. Obtemos assim as derivadas de y

$$\frac{dy}{dx} = \phi(x) \exp\left(\int_{x_0}^x \phi(x')dx'\right), \quad (2.8)$$

$$\frac{d^2y}{dx^2} = \left[\phi^2(x) + \frac{d\phi}{dx}\right] \exp\left(\int_{x_0}^x \phi(x')dx'\right). \quad (2.9)$$

Então a equação (2.6) leva a

$$\phi^2(x) + \frac{d\phi}{dx} + \alpha q(x, \alpha) = 0. \quad (2.10)$$

Logo, expandimos ϕ em uma série de potências decrescentes de α ,

$$\phi(x, \alpha) = \alpha\phi_0(x, \alpha) + \phi_1(x, \alpha) + \alpha^{-1}\phi_2(x, \alpha) + \dots \quad (2.11)$$

Substituímos essa expressão em (2.6), mantendo só os termos das ordens α^2 , α e α^0 , obtendo

$$\alpha^2\phi_0^2 + 2\phi_0\phi_1 + \phi_1^2 + 2\phi_0\phi_2 + \alpha\frac{d\phi_0}{dx} + \frac{d\phi_1}{dx} + \alpha^2q = 0. \quad (2.12)$$

Depois comparamos os termos de igual ordem em α , obtendo as relações

$$\phi_0^2 + q = 0, \quad 2\phi_0\phi_1 + \phi_0' = 0, \quad \phi_1^2 + 2\phi_0\phi_2 + \phi_1' = 0. \quad (2.13)$$

Onde $\phi_0' \equiv d\phi_0/dx$. Então, $\phi_0 = \pm q^{\frac{1}{2}}$ e $\phi_1 = -\phi_0'/2\phi_0$. Portanto as soluções WKB até ordem α^2 são

$$y(x) = \exp\left[\int_{x_0}^x (\alpha\phi_0(x', \alpha) + \phi_1(x', \alpha))dx'\right] \\ \propto q^{-\frac{1}{4}}(x, \alpha) \exp\left[\pm i\alpha \int_{x_0}^x q^{\frac{1}{2}}(x', \alpha)dx'\right]. \quad (2.14)$$

Os zeros da função $q(x, \alpha)$ são chamados *pontos transicionais*, pois as soluções WKB perdem validade perto de um desses pontos. De fato, o termo $q^{-\frac{1}{4}}$

diverge, mas nessa região a solução exata de (2.6) permanece finita. Estes tipos de aproximações podem ser melhoradas adicionando-se mais termos na expansão (2.11). Outra alternativa consiste em supor a solução em forma de produto de uma amplitude vezes uma exponencial, a saber

$$y(x) = A(x, \alpha) \exp \left(\int_{x_0}^x \phi(x', \alpha) dx' \right). \quad (2.15)$$

Este procedimento será utilizado no capítulo 4 para encontrar soluções da equação de Schrödinger no limite semiclássico.

2.2 Método de ‘ponto de sela’ para integrais

Para explicar brevemente o método e sua motivação, consideremos primeiro a função

$$y(x) = g(x)e^{Nf(x)} > 0 \quad \text{para} \quad x > 0, \quad (2.16)$$

onde as funções $g(x)$ e $f(x)$ são *analíticas*[†] e o parâmetro N real e positivo. Quando N toma valores muito grandes, a exponencial $e^{Nf(x)}$ também assume valores grandes para determinado conjunto de valores de x , dependendo de f , que denotaremos por R . Nas outras regiões, a exponencial é pequena. Suporemos que $g(x)$ varia, mas lentamente sobre aquele conjunto R . Se expandimos a função $f(x)$ em torno do máximo local, $x_0 \in R$, até segunda ordem, obtemos que

$$f(x) \simeq f(x_0) + \frac{1}{2}(x - x_0)^2 \frac{d^2 f}{dx^2}(x_0) + \dots, \quad (2.17)$$

onde o termo de primeira ordem em x não aparece. Como estamos considerando que g não varia muito no conjunto R , podemos aproximar $g(x)$ pelo

[†]Uma função analítica é aquela que pode ser expandida em séries de Taylor para todo ponto do plano complexo.

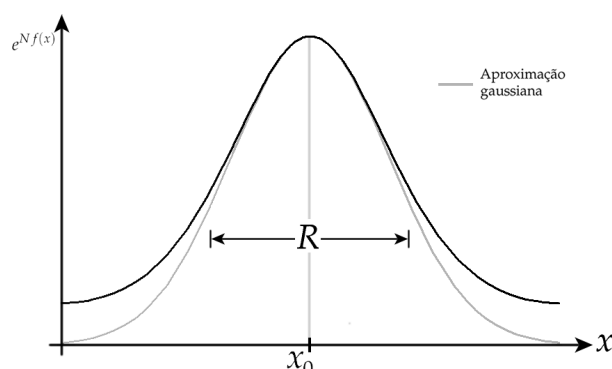


Figura 2.1: Gráfico da função $e^{Nf(x)}$ (preto) e sua aproximação gaussiana (cinza) perto do ponto estacionário x_0 .

seu valor no ponto x_0 . A área abaixo da curva $y(x)$ pode ser aproximada por

$$\begin{aligned} I &= \int dx g(x) e^{Nf(x)} \\ &\simeq g(x_0) e^{Nf(x_0)} \int dx \exp \left\{ \frac{N}{2} f''(x_0) (x - x_0)^2 \right\}. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Tendo em conta a identidade

$$\int_{-\infty}^{\infty} du e^{-au^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}, \quad \text{se } a > 0, \quad (2.19)$$

temos que

$$I \simeq g(x_0) \left[\frac{-2\pi}{N f''(x_0)} \right]^{\frac{1}{2}} e^{Nf(x_0)}. \quad (2.20)$$

Notemos primeiro que, dado que x_0 é um máximo local, $f''(x_0) < 0$, portanto o termo dentro da raiz é não negativo. A expressão (2.20) foi obtida fazendo-se muitas restrições, mas em essência se trata do método de fase estacionária.

Para generalizar esse resultado, vamos supor que f é uma função sobre o plano complexo, cujo argumento denotaremos por z ao invés de x , para fazer alusão à natureza complexa desta função. Esta extensão introduz um caráter oscilatório sobre a exponencial de $f(z)$, com o qual é um pouco mais intuitivo supor que, quando N torna-se suficientemente grande, só as vizinhanças onde a função f oscila pouco contribuem à integral (2.18), pois em outros

casos, a função *oscila rapidamente*, obtendo-se uma contribuição média nula. Essas regiões são definidas como as vizinhanças dos *pontos de sela* ou *pontos estacionários* de f . Esses pontos estão definidos como os pontos $\{z_0\}$ onde o gradiente de f se anula, i.e.

$$\nabla_z f(z_0) = 0, \quad \text{se } z_0 \text{ for ponto estacionário de } f. \quad (2.21)$$

Consideremos então a integral de contorno da forma

$$I = \int g(z) \exp[Nf(z)] dz, \quad (2.22)$$

onde N é um parâmetro real muito grande e $f(z)$ e $g(z)$ são funções analíticas de z . Sendo z_0 um ponto estacionário, fazemos uma expansão de f até segunda ordem em z , a saber

$$\frac{1}{2}u^2 = f(z) - f(z_0) = \frac{1}{2}(z - z_0)^2 f''(z_0) + \dots, \quad (2.23)$$

donde

$$u = f'(z) \frac{dz}{du}. \quad (2.24)$$

Dado que $f''(z_0) \neq 0$, cada um dos ramos da transformação é biunívoca ao redor de $z = z_0$. Assim, como g é analítica, temos que a expansão de g vezes o jacobiano dz/du é uma série de Taylor, portanto

$$g(z) \frac{dz}{du} = -g(z) \frac{u(z)}{f'(z)} = \sum_n c_n u^n \quad (2.25)$$

é válida em vizinhanças de z_0 . O contorno de integração no plano u é escolhido paralelo ao eixo real próximo de $u = 0$. Esta escolha corresponde à curva de *steepest descent* no plano z , a qual passa por z_0 [19, 21, 26].

Inserindo as expressões anteriores na integral I , obtemos

$$I = e^{Nf(z_0)} \int \sum_n c_n u^n \exp \left[\frac{N}{2} (z - z_0)^2 f''(z_0) \right] du. \quad (2.26)$$

Presumindo a convergência desta série, podemos trocar a soma por uma integral. Logo, fazemos uma mudança de variáveis $u \rightarrow v/N$, obtendo

$$I = e^{Nf(z_0)} \sum_n c_n N^{-\frac{1}{2}(n+1)} \int dv v^n e^{-\frac{1}{2}v^2}. \quad (2.27)$$

Este resultado corresponde ao método de steepest descent. Esta série nem sempre converge [21, 26], razão pela qual é comum se tomar apenas o primeiro termo, pois para $N \rightarrow \infty$ espera-se que este tenha a maior contribuição. Explicitamente

$$c_0 = g(z_0) \sqrt{-f''(z_0)}. \quad (2.28)$$

Assim, uma simples integração nos conduz a

$$I = e^{Nf(z_0)} g(z_0) \left[-\frac{\pi}{Nf''(z_0)} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (2.29)$$

Deve-se ter cuidado na hora de tirar a raiz quadrada, pois depende do valor de N e do sinal de $f''(z_0)$. No caso da mecânica quântica no regime semiclássico, $N = i/\hbar$, sendo \hbar a constante de Planck normalizada. Portanto, supondo que f é uma função real, temos que

$$\begin{aligned} I &= e^{if(z_0)/\hbar} g(z_0) \left[\frac{2\pi\hbar}{if''(z_0)} \right]^{\frac{1}{2}} \\ &= g(z_0) \left[\frac{2\pi\hbar}{f''(z_0)} \right]^{\frac{1}{2}} \exp \left[i\frac{f(z_0)}{\hbar} + i\frac{\pi}{4} \text{sign} f''(z_0) \right]. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Temos que ter em conta que aqui fizemos uma expansão ao redor do ponto estacionário z_0 . No caso de vários pontos estacionários, teremos uma soma de integrais da forma (2.30) para cada ponto estacionário e portanto, esta aproximação é válida só se estes pontos estacionários estão suficientemente separados um dos outros.

2.3 Aproximação uniforme para integrais

Explicaremos a seguir o método proposto por Chester, Friedman e Ursell [26]. Supondo que a integral a aproximar, (2.22), depende de um parâmetro

α , explicitamente temos que

$$I(\alpha) = \int dz g(z) e^{Nf(z;\alpha)}. \quad (2.31)$$

Suporemos que existem dois pontos estacionários próximos um do outro e que para algum valor de α eles coalescem, o método de fase estacionária não é aplicável. Assim fazemos uma transformação de $z \rightarrow u$, mediante a forma cúbica

$$f(z, \alpha) = \frac{1}{3}u^3 - \zeta(\alpha)u + A(\alpha). \quad (2.32)$$

Esta expressão corresponde à forma normal da *catástrofe tipo dobra*, contemplada no teorema de classificação de Thom [31, 32]. As catástrofes correspondem a singularidades na transformação $z \rightarrow u$, as quais são conhecidas também como *cáusticas* em analogia com o termo da óptica, dado que correspondem a singularidades de projeção do plano complexo z ao plano que contém u . Derivando esta expressão com respeito a u obtemos

$$f'(z; \alpha) \frac{dz}{du} = u^2 - \zeta(\alpha). \quad (2.33)$$

Se z_1 e z_2 são os pontos estacionários de f , temos que $f'(z; \alpha)$ anula-se nestes pontos. Já o lado direito da equação anterior cancela-se quando $u = \pm\zeta(\alpha)$: estes são os pontos estacionários da forma cúbica (2.32). Assumimos a regularidade desta transformação, ou seja, que o jacobiano não é nem zero nem indeterminado. Portanto os pontos estacionários de f devem coincidir com os da forma cúbica (2.32). Isto implica que

$$f(z_1; \alpha) = -\frac{2}{3}\zeta^{\frac{3}{2}}(\alpha) + A(\alpha) \quad (2.34)$$

e

$$f(z_2; \alpha) = \frac{2}{3}\zeta^{\frac{3}{2}}(\alpha) + A(\alpha). \quad (2.35)$$

Estas duas equações caracterizam as variáveis intermediárias da transformação, $\zeta(\alpha)$ e $A(\alpha)$, dadas por

$$A(\alpha) = \frac{f(z_2; \alpha) + f(z_1; \alpha)}{2} \quad (2.36)$$

e

$$\frac{2}{3}\zeta^{\frac{3}{2}}(\alpha) = \frac{f(z_2; \alpha) - f(z_1; \alpha)}{2} \quad (2.37)$$

Definimos a função $G(u; \alpha)$ como o produto de g vezes o jacobiano dz/du . Esta função é expandida na forma

$$G(u, \alpha) \equiv g(z) \frac{dz}{du} = \sum_n p_n(\alpha)(u^2 - \zeta)^n + \sum_n q_n(\alpha)u(u^2 - \zeta)^n, \quad (2.38)$$

o que, de acordo com a proposta de Chester *et. al.* [26], garante a convergência da série, porém não como uma série de Taylor. Os coeficientes p_n e q_n são obtidos derivando $G(u; \alpha)$ e avaliando-a nos pontos estacionários $z = z_1$ e $u = \zeta^{\frac{1}{2}}$, e $z = z_2$ e $u = -\zeta^{\frac{1}{2}}$. Portanto, a integral $I(\alpha)$ fica

$$I(\alpha) = e^{-NA(\alpha)} \sum_n \left[\int du p_n(u^2 - \zeta)^n \exp \left(N \left(\frac{u^3}{3} - \zeta u \right) \right) + \int du q_n u(u^2 - \zeta)^n \exp \left(N \left(\frac{u^3}{3} - \zeta u \right) \right) \right]. \quad (2.39)$$

Como essas séries são convergentes [26], para N muito grande podemos considerar só até primeira ordem em u , isto é, tomar só os termos com $n = 0$, a saber

$$G(u, \alpha) \simeq p_0(\alpha) + q_0(\alpha)u, \quad (2.40)$$

onde p_0 e q_0 são soluções de

$$G(\zeta^{\frac{1}{2}}; \alpha) = p_0(\alpha) + \zeta^{\frac{1}{2}}q_0(\alpha), \quad (2.41)$$

$$G(-\zeta^{\frac{1}{2}}; \alpha) = p_0(\alpha) - \zeta^{\frac{1}{2}}q_0(\alpha). \quad (2.42)$$

Explicitamente

$$p_0(\alpha) = \frac{G(\zeta^{\frac{1}{2}}; \alpha) + G(-\zeta^{\frac{1}{2}}; \alpha)}{2}, \quad (2.43)$$

$$q_0(\alpha) = \frac{G(\zeta^{\frac{1}{2}}; \alpha) - G(-\zeta^{\frac{1}{2}}; \alpha)}{2\zeta^{\frac{1}{2}}}. \quad (2.44)$$

Portanto

$$I(\alpha) = e^{-NA(\alpha)} \int du (p_0 + q_0u) \exp \left(N \left(\frac{u^3}{3} - \zeta u \right) \right). \quad (2.45)$$

Lembrando a definição da função de Airy [34],

$$\text{Ai}(z) = \frac{1}{2\pi} \int du \exp \left[i \left(\frac{u^3}{3} + zu \right) \right], \quad (2.46)$$

podemos fazer a mudança de variáveis $u \rightarrow (i/N)^{\frac{1}{3}}v$ para reescrever (2.45) como

$$I(\alpha) = 2\pi e^{-NA(\alpha)} \left(\frac{i}{N} \right)^{\frac{1}{3}} \left[p_0 \text{Ai} \left(- \left[\frac{N}{i} \right]^{\frac{1}{3}} \zeta(\alpha) \right) - iq_0 \left(\frac{i}{N} \right)^{\frac{1}{3}} \text{Ai}' \left(- \left[\frac{N}{i} \right]^{\frac{1}{3}} \zeta(\alpha) \right) \right], \quad (2.47)$$

onde assumimos que o contorno de integração corresponde ao eixo real de u . Esta expressão corresponde à aproximação uniforme da integral $I(\alpha)$ para dois pontos estacionários coalescentes z_1 e z_2 .

No caso de ter mais de dois pontos estacionários coalescendo, temos que usar um mapeamento de f em uma função mais simples, que denotaremos por ϕ , tal como em (2.32), que preserve a topologia de coalescência desses pontos estacionários. O teorema de classificação de Thom [31, 32] fornece a forma normal dessas funções ϕ para o caso de até 7 pontos coalescentes. A generalização do método de aproximação uniforme aqui exposto pode ser encontrado em [27], no contexto de colisões moleculares, e em [32], aplicando a teoria das catástrofes na mecânica ondulatória. Não abordamos estas generalizações, dado que só usaremos o método para dois pontos coalescentes; além do que, estas precisam de uma linguagem técnica que desvia do objetivo fundamental do presente trabalho.

Capítulo 3

Mecânica quântica no espaço de fases

A geometria simplética, própria dos sistemas Hamiltonianos clássicos, estabelece uma estreita relação entre as translações e as reflexões com respeito a um ponto no espaço de fases, mediante uma transformada de Legendre [29]. Essa idéia é levada ao formalismo quântico obtendo-se a representação de Weyl (reflexões), incluindo a função de Wigner, e a representação de cordas (translações), onde está definida a transformada de Fourier da função de Wigner [29]. Estes dois pontos de vista constituem representações completas da mecânica quântica, baseadas na noção de espaço de fases.

No panorama mais geral do espaço de fases duplo [10], a função de Wigner e a função de Cordas correspondem às escolhas particulares das variáveis usadas para representar o operador densidade.

3.1 Centros e cordas clássicas

No formalismo Hamiltoniano, um sistema físico clássico é caracterizado por uma função real, $H(\mathbf{x}, t)$, denominada o *Hamiltoniano*, onde $\mathbf{x} = (\mathbf{p}, \mathbf{q})$ é um vetor de $2L$ componentes: as posições $\mathbf{q} = (q_1, \dots, q_L)$ e os momentos

$\mathbf{p} = (p_1, \dots, p_L)$. L é o número de graus de liberdade do sistema, pois corresponde ao número de variáveis necessárias descrevê-lo. A evolução do sistema está determinada pelas equações de Hamilton:

$$\dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{q}}, \quad \dot{\mathbf{q}} = \frac{\partial H}{\partial \mathbf{p}}, \quad (3.1)$$

as quais podem ser resumidas em

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{J} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}} \quad (3.2)$$

onde \mathbf{J} é a matriz de blocos de dimensão $L \times L$ escrita como

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & -\mathbf{1} \\ \mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

e conhecida como a *matriz simplética padrão*. A existência e unicidade das soluções das equações de movimento está garantida, pelo fato das equações serem de primeira ordem nas derivadas.

Definimos o *produto simplético* entre dois vetores do espaço de fases $\xi = (\xi_p, \xi_q)$ e $\eta = (\eta_p, \eta_q)$ como

$$\xi \wedge \eta = \sum_{k=1}^L (\xi_p \eta_q - \xi_q \eta_p), \quad (3.4)$$

o que corresponde à área do paralelogramo formado por ξ e η ; este produto é invariante no tempo pela ação de um fluxo Hamiltoniano linear [14].

Denomina-se *constante de movimento* a uma função $F(\mathbf{x})$ definida sobre o espaço de fases, que permanece constante no tempo, isto é

$$\begin{aligned} \frac{dF(\mathbf{x})}{dt} &= \sum_{k=1}^L \left(\frac{\partial F}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial F}{\partial p_k} \dot{p}_k \right) = \sum_{k=1}^L \left(\frac{\partial F}{\partial q_k} \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial F}{\partial p_k} \frac{\partial H}{\partial q_k} \right) \\ &= \{F, H\} = 0, \end{aligned} \quad (3.5)$$

onde o penúltimo termo define o *colchete de Poisson* das funções F e H . Um sistema Hamiltoniano com L graus de liberdade é *integrável* se existem L

constantes de movimento independentes, F_k , com $k = 1, \dots, L$; ou seja que os vetores

$$\dot{\mathbf{x}}_{F_k} = \mathbf{J} \frac{\partial F_k}{\partial \mathbf{x}}, \quad (3.6)$$

definidos pelo fluxo gerado pelos F_k 's são linearmente independentes. Esta é a *condição de involução*, que pode ser reescrita como

$$\dot{\mathbf{x}}_{F_k} \wedge \dot{\mathbf{x}}_{F_j} = \{F_k, F_j\} = 0 \quad \text{para } k \neq j. \quad (3.7)$$

Consideremos um sistema Hamiltoniano descrito pelas variáveis $\mathbf{x}_- = (\mathbf{p}_-, \mathbf{q}_-)$. Uma mudança de variáveis,

$$\mathbf{x}_- = (\mathbf{p}_-, \mathbf{q}_-) \rightarrow \mathbf{x}_+ = (\mathbf{p}_+, \mathbf{q}_+) = C(\mathbf{x}_-), \quad (3.8)$$

que mantenha invariantes as equações de Hamilton é conhecida como *transformação canônica*. Usualmente, este tipo de transformações permite reescrever o sistema em termos de coordenadas mais convenientes, simplificando a descrição do sistema [1, 2]. A evolução temporal é trivialmente um exemplo de uma transformação canônica, pois as equações de movimento são satisfeitas para todo tempo.

Uma transformação canônica pode ser especificada por uma função geratriz S que transforma o Hamiltoniano do sistema na forma

$$H_-(\mathbf{x}_-) \rightarrow H_+(\mathbf{x}_+) = H_-(\mathbf{x}_-) + \frac{\partial}{\partial t} S(\mathbf{p}_+, \mathbf{q}_-, t). \quad (3.9)$$

Assim as variáveis ficam determinadas pelas relações,

$$\mathbf{q}_+ = \frac{\partial S}{\partial \mathbf{p}_+} \quad \text{e} \quad \mathbf{p}_- = \frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}_-}. \quad (3.10)$$

Alternativamente, se \mathcal{A} é uma matriz de dimensão $2L \times 2L$, podemos também definir a função geratriz quadrática independente do tempo,

$$S(\mathbf{x}) = \mathbf{x} \mathcal{A} \mathbf{x}, \quad (3.11)$$

e um vetor no espaço de fase,

$$\xi = -\mathbf{J} \frac{\partial S}{\partial \mathbf{x}} = -2\mathbf{J}\mathcal{A}\mathbf{x}. \quad (3.12)$$

Temos que $S(\mathbf{x})$ gera implicitamente a transformação linear

$$\mathbf{x}_- \rightarrow \mathbf{x}_+ = \mathcal{M}\mathbf{x}_-,$$

mediante

$$\mathbf{x}_- = \mathbf{x} - \frac{\xi}{2} \quad \text{e} \quad \mathbf{x}_+ = \mathbf{x} + \frac{\xi}{2}, \quad (3.13)$$

pois é só inserir (3.12) na relação anterior, para obter a matriz \mathcal{M} escrita como

$$\mathcal{M} = (1 - \mathbf{J}\mathcal{A})(1 + \mathbf{J}\mathcal{A})^{-1} = (1 + \mathbf{J}\mathcal{A})^{-1}(1 - \mathbf{J}\mathcal{A}). \quad (3.14)$$

Esta fatoração da matriz \mathcal{M} é comumente conhecida como a *parametrização de Cayley* [29, 38]. Temos assim que \mathbf{x} resulta ser o ponto médio entre \mathbf{x}_- e \mathbf{x}_+ e ξ a corda que os liga. Assim, uma transformação canônica da forma $\mathbf{x}_- \rightarrow \mathbf{x}_+ = C(\mathbf{x}_-)$ pode ser vista como uma reflexão com respeito ao ponto \mathbf{x} ou como uma translação de ξ , quando a função geratriz S é quadrática, como ilustra a Figura 3.1. Explicitamente, as operações de reflexão e translação são

$$\mathbf{x}_+ = R_{\mathbf{x}}\mathbf{x}_- \equiv -\mathbf{x}_- + 2\mathbf{x} \quad \text{e} \quad \mathbf{x}_+ = T_{\xi}\mathbf{x}_- \equiv \mathbf{x}_- + \xi, \quad (3.15)$$

respectivamente. $S(\mathbf{x})$ é conhecida como a *função geratriz de centros*, a qual contém toda a informação sobre a transformação gerada por \mathcal{M} .

Podemos implementar uma transformada de Legendre para obter uma representação em termos de cordas, a saber

$$S(\xi) = S(\mathbf{x}) + \mathbf{x} \cdot \mathbf{J} \frac{\partial S}{\partial \mathbf{x}} = S(\mathbf{x}) - \mathbf{x} \wedge \xi, \quad (3.16)$$

de modo que

$$\mathbf{x}(\xi) = \mathbf{J} \frac{\partial S}{\partial \xi}. \quad (3.17)$$

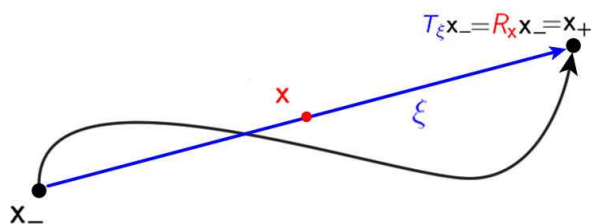


Figura 3.1: **Representação clássica de centros e cordas.** A transformação canônica $\mathbf{x}_- \rightarrow \mathbf{x}_+$ pode ser vista como uma reflexão com respeito a \mathbf{x} , ou como uma translação por ξ .

Da mesma maneira que acontece com as variáveis usuais, \mathbf{p} e \mathbf{q} , esta reciprocidade entre as representações de centros e cordas, implica que podem existir regiões no espaço de fases onde uma representação não está definida e a outra sim. Isto acontece quando a aplicação $\mathbf{x} \rightarrow \xi$ definida por $S(\mathbf{x})$ é singular, ou seja, o jacobiano fica:

$$\det \frac{\partial \xi}{\partial \mathbf{x}} = - \det \mathbf{J} \frac{\partial^2 S}{\partial \mathbf{x}^2} = \infty. \quad (3.18)$$

Esta equação define as *cáusticas de centro*. A figura 3.2 ilustra essas cáusticas. Estas aparecem devido ao fato que a função geratriz $S(\mathbf{x})$, em geral, é

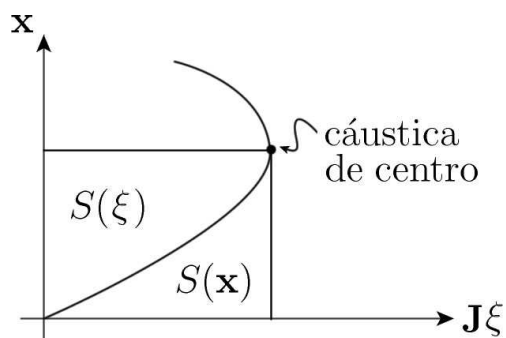


Figura 3.2: **Representação geométrica das funções geratrizes de centro e de cordas para uma variedade no espaço de fases duplo.** Ilustra-se também um ponto de cáustica de centro.

multívoca. Quando $S(\mathbf{x})$ é a função geratriz que define as soluções das

equações de movimento (3.2), temos que as cústicas limitam o movimento no espaço dos centros \mathbf{x} 's e são os pontos que separam os diferentes ramos de S . É simples ver que nas cústicas de centro, a transformação inversa $\xi \rightarrow \mathbf{x}$ não é singular, pois

$$\det \frac{\partial^2 S}{\partial \xi^2} = 0. \quad (3.19)$$

Assim, a representação de cordas descreve sem problemas as cústicas de centro e vice-versa. Isto é uma consequência da relação de reciprocidade entre cordas e centros, mediada por uma transformação de Legendre.

Podemos também considerar \mathbf{x} e ξ como coordenadas de um espaço de fases de $4L$ dimensões, o que seria um *espaço de fases duplo*. O fato de S ser uma diferencial exata (ver (3.19)) implica a existência de uma superfície $2L$ dimensional no espaço de $4L$ -dimensões, tal que a integral de contorno

$$\oint \xi \wedge d\mathbf{x} = \oint (\xi_p \cdot d\mathbf{q} - \xi_q \cdot d\mathbf{p}) = 0 \quad (3.20)$$

para todo circuito redutível*. Esta relação fornece uma estrutura simplética, onde ξ_p é conjugado a \mathbf{q} e $-\xi_q$ é conjugado a \mathbf{p} . Em resumo, \mathbf{x} e $\mathbf{J}\xi$ são as variáveis canonicamente conjugadas neste espaço de fases duplo.

Falta mencionar que as reflexões e translações no espaço de fases formam um grupo descrito pela álgebra

$$\begin{aligned} T_{\xi_2} \circ T_{\xi_1} &= T_{\xi_1 + \xi_2}, & R_{\mathbf{x}_2} \circ R_{\mathbf{x}_1} &= T_{2(\mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1)}, \\ T_{\xi} \circ R_{\mathbf{x}} &= R_{\mathbf{x} + \xi/2}, & R_{\mathbf{x}} \circ T_{\xi} &= R_{\mathbf{x} - \xi/2}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Outro fato importante é que a operação de reflexão ao quadrado, $R_{\mathbf{x}}^2$, é a identidade do grupo.

*Um circuito redutível é aquele que pode ser deformado continuamente até obter um ponto só.

3.2 Formalismo quântico

Em contraste com a mecânica clássica, os estados quânticos são representados por vetores $|\psi\rangle$ de um espaço de Hilbert. A evolução temporal é determinada pela *equação de Schrödinger*,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle, \quad (3.22)$$

onde \hbar é a constante de Planck e \hat{H} é um operador auto-adjunto (ou hermitiano) sobre o espaço de Hilbert, conhecido como o *operador Hamiltoniano*. Como os auto-valores dos operadores hermitianos são reais, podem ser identificados com os resultados de medidas experimentais ideais. Portanto, os operadores hermitianos são considerados como os equivalentes quânticos dos observáveis clássicos e o operador \hat{H} é identificado com o Hamiltoniano clássico $H(\mathbf{x})$.

Consideremos então que a posição do sistema é \mathbf{q}' . O operador de posição $\hat{\mathbf{q}}$ satisfaz a equação de auto-valores

$$\hat{\mathbf{q}}|\mathbf{q}'\rangle = \mathbf{q}'|\mathbf{q}'\rangle, \quad (3.23)$$

onde $|\mathbf{q}\rangle$ determina o estado do sistema. Igualmente, temos que, se o momento é \mathbf{p}' ,

$$\hat{\mathbf{p}}|\mathbf{p}'\rangle = \mathbf{p}'|\mathbf{p}'\rangle. \quad (3.24)$$

Um dos postulados fundamentais da mecânica quântica diz que os operadores $\hat{\mathbf{q}}$ e $\hat{\mathbf{p}}$ não comutam, ou seja, que as componentes \hat{q}_j e \hat{p}_k satisfazem a relação:

$$[\hat{q}_j, \hat{p}_k] = \hat{q}_j\hat{p}_k - \hat{p}_k\hat{q}_j = i\hbar\delta_{jk}\hat{1}, \quad (3.25)$$

com δ_{ij} a função delta de Kronecker. Esta relação tem conseqüências importantes, entre elas o princípio de incerteza de Heisenberg, o qual impede o conhecimento simultâneo da posição e do momento de uma partícula [3].

Construímos agora a família de operadores unitários com parâmetro \mathbf{q} ,

$$\hat{T}_{\mathbf{q}} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{p}}\right). \quad (3.26)$$

Notemos que $\hat{T}_{\mathbf{q}}^\dagger = \hat{T}_{-\mathbf{q}} = \hat{T}_{\mathbf{q}}^{-1}$. Aplicando este operador sobre auto-estado de posição $|\mathbf{q}\rangle$, temos que [3]

$$\hat{T}_{\mathbf{q}_0}|\mathbf{q}\rangle = |\mathbf{q}_0 + \mathbf{q}\rangle, \quad (3.27)$$

de modo que o operador $\hat{T}_{\mathbf{q}}$ corresponde a uma translação na variável de posição. No cenário de Heisenberg[†], a transformação de translação pode ser aplicada sobre o operador posição, mediante uma transformação de similaridade, a saber

$$\hat{\mathbf{q}} \rightarrow \hat{\mathbf{q}}' = \hat{T}_{-\mathbf{q}_0} \hat{\mathbf{q}} \hat{T}_{\mathbf{q}_0} = \hat{\mathbf{q}} + \mathbf{q}_0 \hat{1}. \quad (3.28)$$

De forma análoga podemos definir uma translação na variável de momento, usando a família de operadores

$$\hat{T}_{\mathbf{p}} = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \hat{\mathbf{q}}\right), \quad (3.29)$$

de modo que

$$\hat{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\mathbf{p}}' = \hat{T}_{-\mathbf{p}_0} \hat{\mathbf{p}} \hat{T}_{\mathbf{p}_0} = \hat{\mathbf{p}} + \mathbf{p}_0 \hat{1}, \quad (3.30)$$

e

$$\hat{T}_{\mathbf{p}_0}|\mathbf{p}\rangle = |\mathbf{p}_0 + \mathbf{p}\rangle. \quad (3.31)$$

Podemos combinar $\hat{T}_{\mathbf{q}}$ e $\hat{T}_{\mathbf{p}}$ para obter uma translação geral no espaço de fases. Como $\hat{\mathbf{q}}$ e $\hat{\mathbf{p}}$ não comutam, $\hat{T}_{\mathbf{q}}$ e $\hat{T}_{\mathbf{p}}$ também não. Tendo em conta a identidade de Hausdorff: se \hat{A} e \hat{B} comutam com $[\hat{A}, \hat{B}]$, temos que [3]

$$e^{\hat{A}+\hat{B}} = e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} e^{-[\hat{A}, \hat{B}]/2}. \quad (3.32)$$

Definimos o operador $\hat{\mathbf{x}} \equiv (\hat{\mathbf{p}}, \hat{\mathbf{q}})$, para definir o operador translação na direção do vetor $\xi = (\xi_p, \xi_q)$ como

$$\begin{aligned} \hat{T}_{\xi} &\equiv \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\xi \wedge \hat{\mathbf{x}})\right] = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\xi_p \cdot \hat{\mathbf{q}} - \xi_q \cdot \hat{\mathbf{p}})\right] \\ &= \hat{T}_{\xi_p} \hat{T}_{\xi_q} e^{-i\xi_p \cdot \xi_q / 2\hbar} = \hat{T}_{\xi_q} \hat{T}_{\xi_p} e^{i\xi_p \cdot \xi_q / 2\hbar}. \end{aligned} \quad (3.33)$$

[†]Em inglês *Heisenberg's picture*.

Os termos de fase na última linha de (3.33) são tais que \hat{T}_ξ agindo sobre o operador $\hat{\mathbf{x}}$ é

$$\hat{T}_{-\xi} \hat{\mathbf{x}} \hat{T}_\xi = \hat{\mathbf{x}} + \xi \hat{1}. \quad (3.34)$$

Igualmente temos que $\hat{T}_\xi^\dagger = \hat{T}_\xi^{-1} = \hat{T}_{-\xi}$. A propriedade do grupo de translações clássicas é mantida, exceto por um fator de fase:

$$\hat{T}_{\xi_2} \hat{T}_{\xi_1} = \hat{T}_{\xi_2 + \xi_1} \exp\left(-\frac{i}{2\hbar} \xi_1 \wedge \xi_2\right). \quad (3.35)$$

Definamos o operador $\hat{R}_\mathbf{x}$ proporcional à transformada de Fourier do operador translação \hat{T}_ξ ,

$$\hat{R}_\mathbf{x} \equiv (4\pi\hbar)^{-L} \int d\xi e^{i\mathbf{x}\wedge\xi/\hbar} \hat{T}_\xi = (4\pi\hbar)^{-L} \int d\xi \exp\left(\frac{i}{\hbar} \xi \wedge [\hat{\mathbf{x}} - \mathbf{x}]\right). \quad (3.36)$$

Esta relação pode ser invertida, de modo que

$$\begin{aligned} \hat{T}_\xi &= \int d\eta \delta(\xi - \eta) \hat{T}_\eta = (2\pi\hbar)^{2L} \int d\mathbf{x} d\eta \exp\left(\frac{i}{\hbar} [\xi - \eta] \wedge \mathbf{x}\right) \hat{T}_\eta \\ &= (\pi\hbar)^{-L} \int d\mathbf{x} e^{-i\mathbf{x}\wedge\xi/\hbar} \hat{R}_\mathbf{x}. \end{aligned} \quad (3.37)$$

Comparando a última integral de (3.36) com a integral do meio de (3.37), vemos que $\hat{R}_\mathbf{x}$ corresponde a uma versão de operadores da função δ de Dirac. Entretanto, as possíveis combinações de produtos de $\hat{R}_\mathbf{x}$ e \hat{T}_ξ mostram que [29]

$$\hat{R}_\mathbf{x} \hat{T}_\xi = e^{-i\mathbf{x}\wedge\xi/\hbar} \hat{R}_{\mathbf{x}-\xi/2}, \quad (3.38)$$

$$\hat{T}_\xi \hat{R}_\mathbf{x} = e^{-i\mathbf{x}\wedge\xi/\hbar} \hat{R}_{\mathbf{x}+\xi/2}, \quad (3.39)$$

$$\hat{R}_{\mathbf{x}_2} \hat{R}_{\mathbf{x}_1} = e^{-2i\mathbf{x}_2\wedge\mathbf{x}_1/\hbar} \hat{T}_{2(\mathbf{x}_2-\mathbf{x}_1)}. \quad (3.40)$$

Da eq. (3.40) podemos ver que $\hat{R}_\mathbf{x}^2 = \hat{1}$, ademais $\hat{R}_\mathbf{x}$ é hermitiano. Comparando estas relações com (3.21), verificamos que os operadores $\hat{R}_\mathbf{x}$ e \hat{T}_ξ formam um grupo que é análogo ao grupo de reflexões e translações clássicas no espaço de fases.

Os respectivos traços dos operadores \hat{T}_ξ e $\hat{R}_\mathbf{x}$ são calculados facilmente:

$$\begin{aligned} \text{tr } \hat{T}_\xi &= \int d\mathbf{q} \langle \mathbf{q} | \hat{T}_\xi | \mathbf{q} \rangle = \int d\mathbf{q} e^{i\xi_p \cdot \xi_q / 2\hbar} \langle \mathbf{q} | \hat{T}_{\xi_q} \hat{T}_{\xi_p} | \mathbf{q} \rangle \\ &= e^{i\xi_p \cdot \xi_q / 2\hbar} \int d\mathbf{q} e^{i\xi_p \cdot \mathbf{q} / \hbar} \langle \mathbf{q} | \mathbf{q} + \xi_q \rangle = (2\pi\hbar)^L \delta(\xi_p) \delta(\xi_q) \\ &= (2\pi\hbar)^L \delta(\xi) \end{aligned} \quad (3.41)$$

e

$$2^L \text{tr } \hat{R}_\mathbf{x} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^L} \int d\xi e^{i\mathbf{x} \wedge \xi / \hbar} \text{tr } \hat{T}_\xi = 1. \quad (3.42)$$

Falta enunciar a forma dos operadores $\hat{R}_\mathbf{x}$ e \hat{T}_ξ na representação usual de posição, a qual é usada com frequência para fazer cálculos explícitos:

$$2^L \hat{R}_\mathbf{x} = \int d\xi \left| \mathbf{q} + \frac{\xi}{2} \right\rangle \left\langle \mathbf{q} - \frac{\xi}{2} \right| e^{i\mathbf{q} \cdot \xi_q / \hbar}, \quad (3.43)$$

$$\hat{T}_\xi = \int d\mathbf{q} \left| \mathbf{q} + \frac{\xi}{2} \right\rangle \left\langle \mathbf{q} - \frac{\xi}{2} \right| e^{i\xi_p \cdot \mathbf{q} / \hbar}. \quad (3.44)$$

Podemos considerar a possibilidade de expressar um operador arbitrário \hat{A} como uma superposição linear de operadores translação, da forma

$$\hat{A} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^L} \int d\xi A(\xi) \hat{T}_\xi. \quad (3.45)$$

O coeficiente desta expansão, $A(\xi)$, pode ser calculado por

$$\begin{aligned} \text{tr } \hat{T}_{-\xi} \hat{A} &= \text{tr} \frac{1}{(2\pi\hbar)^L} \int d\eta A(\eta) \hat{T}_{-\xi} \hat{T}_\eta \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^L} \int d\eta A(\eta) e^{i\eta \wedge \xi / 2\hbar} \text{tr } \hat{T}_{\eta-\xi} = A(\xi). \end{aligned} \quad (3.46)$$

Por conseguinte, a função $A(\xi)$ é uma função sobre o espaço das cordas, ξ , a qual especifica de maneira única o operador \hat{A} . $A(\xi)$ é denominado o *símbolo de cordas*, o qual permite uma representação completa do operador \hat{A} em termos de translações unitárias no espaço de fases.

A transformada de Fourier do símbolo de cordas $A(\xi)$ é

$$A(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^L} \int d\xi e^{-i\mathbf{x} \wedge \xi / \hbar} A(\xi), \quad (3.47)$$

igual ao traço de \hat{A} vezes o operador $2^L \hat{R}_{\mathbf{x}}$, isto é

$$\begin{aligned} 2^L \text{tr} \hat{R}_{\mathbf{x}} \hat{A} &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^L} \int d\xi e^{i\mathbf{x}\wedge\xi/\hbar} \text{tr} \hat{T}_{\xi} \hat{A} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^L} \int d\xi e^{-i\mathbf{x}\wedge\xi/\hbar} \text{tr} \hat{T}_{-\xi} \hat{A} \\ &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^L} \int d\xi e^{-i\mathbf{x}\wedge\xi/\hbar} A(\xi) = A(\mathbf{x}). \end{aligned} \tag{3.48}$$

Da mesma forma, $A(\mathbf{x})$ é uma função sobre o espaço de fases \mathbf{x} , que representa completamente o operador \hat{A} e é conhecida como o *símbolo de centros* ou *símbolo de Weyl* [29, 14]. É conveniente notar que, da mesma maneira que no caso clássico, onde os centros \mathbf{x} e as cordas ξ eram variáveis conjugadas, a condição de reciprocidade continua sendo válida no nível quântico, dado que as representações de centros e de cordas estão conectadas por uma transformação de Fourier. Ou seja, devido ao princípio de incerteza de Heisenberg, não podemos ter um conhecimento simultâneo da corda ξ e do centro \mathbf{x} . A grande vantagem é o fato de que \mathbf{x} (ou ξ) é uma variável sobre o espaço de fases completo, o que implica que podemos representar operadores por funções sobre este espaço onde se desenvolve a mecânica hamiltoniana.

3.3 O operador densidade

Uma forma mais geral de representar os estados de um sistema quântico é mediante o *operador densidade*. Ele é construído como a superposição de operadores de projeção,

$$\hat{\rho} = \sum_k p_k |\psi_k\rangle \langle\psi_k|, \quad \text{onde } 1 \geq p_k \geq 0. \tag{3.49}$$

Se $\{|\psi_k\rangle\}$ formam uma base normalizada do espaço, temos que os auto-valores de $\hat{\rho}$ correspondem às probabilidades $\{p_k\}$, que satisfazem

$$\sum_k p_k = 1. \tag{3.50}$$

Quando a soma se reduz a só um termo, este representa um *estado puro*. Caso contrário, representa um *estado misto* [37]. Neste trabalho, limitaremos-nos ao estudo de estados puros, os quais podem ser representados tanto por um vetor $|\psi\rangle$ no espaço de Hilbert ou pelo operador densidade,

$$\hat{\rho} = |\psi\rangle\langle\psi|. \quad (3.51)$$

O operador densidade para estados puros tem as seguintes propriedades: Traço igual a um, é idempotente ($\hat{\rho}^2 = \hat{\rho}$) e hermitiano, portanto os autovalores do operador densidade são não negativos. Em resumo, $\hat{\rho}$ pode ser considerado como a contra-parte quântica da distribuição de probabilidade clássica, denotada por $\rho(\mathbf{p}, \mathbf{q})$, só que ele corresponde a um operador hermitiano e a noção de espaço de fases não está presente na definição dele.

Para reconciliar essas duas idéias, espaço de fases e mecânica quântica, procuramos as representações de centros e de cordas para o operador densidade, obtendo a conhecida função de Wigner e a sua transformada de Fourier.

3.4 A função de Wigner e a função de Cordas

Definamos primeiro o operador densidade normalizado como:

$$\frac{\hat{\rho}}{(2\pi\hbar)^L}. \quad (3.52)$$

A função de Wigner $W(\mathbf{x})$, está definida como o símbolo de Weyl do operador densidade normalizado [29], explicitamente

$$W(\mathbf{x}) = \frac{1}{(\pi\hbar)^L} \text{tr} \hat{R}_{\mathbf{x}} \hat{\rho} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^L} \int d\xi_q \langle \mathbf{q}^+ | \psi_I \rangle \langle \psi_I | \mathbf{q}^- \rangle e^{i\mathbf{p}\cdot\xi_q/\hbar} \quad (3.53)$$

onde $\mathbf{q}^\pm = \mathbf{q} \pm \boldsymbol{\xi}_q/2$. A função de Wigner é real. O fator de normalização $(2\pi\hbar)^L$ acarreta que

$$1 = \int d\mathbf{x} W(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{q} d\mathbf{p} W(\mathbf{p}, \mathbf{q}). \quad (3.54)$$

As distribuições marginais em \mathbf{q} e \mathbf{p} coincidem com as respectivas probabilidades,

$$\int d\mathbf{q} W(\mathbf{x}) = |\langle \mathbf{p} | \psi \rangle|^2 \quad \text{e} \quad \int d\mathbf{p} W(\mathbf{x}) = |\langle \mathbf{q} | \psi \rangle|^2. \quad (3.55)$$

Outra propriedade importante é que o valor esperado de um observável arbitrário \hat{A} pode ser calculado por

$$\text{tr } \hat{\rho} \hat{A} = \int d\mathbf{x} A(\mathbf{x}) W(\mathbf{x}), \quad (3.56)$$

onde $A(\mathbf{x})$ é o símbolo de Weyl de \hat{A} , o qual corresponde à versão simetrizada da função clássica que representa o observável A [7]. Estas propriedades permitem considerar a função de Wigner como a distribuição quântica que corresponde diretamente à distribuição clássica sobre o espaço de fases. Mas, lamentavelmente, a função de Wigner não é definida positiva. Estas propriedades são satisfeitas tanto para estados misturados como para estados puros.

Analogamente, definimos a função de Cordas como o símbolo de cordas do operador densidade normalizado (3.52),

$$\chi(\xi) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^L} \text{tr } \hat{T}_{-\xi} \hat{\rho} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^L} \int d\mathbf{q} \langle \mathbf{q}_+ | \psi_I \rangle \langle \psi_I | \mathbf{q}_- \rangle e^{i\xi_p \cdot \mathbf{q} / \hbar}. \quad (3.57)$$

A função de Cordas pode assumir valores complexos, pois é a transformada de Fourier da função de Wigner; é também conhecida como *função característica quântica*; seu complexo conjugado é determinado por $\chi^*(\xi) = \chi(-\xi)$. A condição de normalização do operador densidade restringe o valor da função de Cordas na origem,

$$1 = (2\pi\hbar)^L \chi(\mathbf{0}). \quad (3.58)$$

O valor esperado de um operador \hat{A} pode ser avaliado usando

$$\text{tr } \hat{\rho} \hat{A} = \int d\mathbf{x} A(\mathbf{x}) \chi(-\mathbf{x}). \quad (3.59)$$

A função de Cordas pode ser visualizada como a *função de correlação generalizada* [11], pois ela corresponde à superposição entre o estado $\hat{\rho}$ e todas

suas possíveis translações no espaço de fases,

$$\chi(\xi) = \frac{1}{(2\pi\hbar)} \langle \psi | \hat{T}_{-\xi} | \psi \rangle. \quad (3.60)$$

Combinando a definição da função de Wigner e a de Cordas, com as propriedades do grupo quântico de translações e reflexões, encontramos que para o estado transladado por um vetor η , $\hat{\rho}_\eta = \hat{T}_\eta \hat{\rho} \hat{T}_{-\eta}$, as correspondentes distribuições são

$$W_\eta(\mathbf{x}) = W(\mathbf{x} - \eta) \quad \text{e} \quad \chi_\eta(\xi) = e^{i\eta \wedge \xi / \hbar} \chi(\xi). \quad (3.61)$$

Isto é, mudar a origem do espaço só modifica a função de Cordas em uma fase global.

Em contraste com a função de Wigner, a função de Cordas não é necessariamente real, mas pode ser para uma escolha particular da origem [8, 30]. Para que isto ocorra, deve existir um centro de simetria \mathbf{x}_0 , escolhido como a origem, tal que $\hat{\rho}$ e $\hat{R}_{\mathbf{x}_0}$ comutem. Como $\hat{R}_{\mathbf{x}}$ é idempotente, seus auto-valores são ± 1 , assim o estado $\hat{\rho}$ deve estar definido em subespaços com paridade definida [8, 30]. Para esses estados com paridade definida, denotados por $\hat{\rho}_\pm$, a função de Wigner e a de Cordas são proporcionais, exceto por um fator de escala,

$$W_\pm(\mathbf{x}) = \pm 2^L \chi_\pm(-2\mathbf{x}). \quad (3.62)$$

Para estados não-simétricos gerais, a parte real da função de Corda é determinada pela parte diagonal do operador $\hat{\rho}$ com respeito à paridade, enquanto a parte imaginária depende dos termos não diagonais de $\hat{\rho}$. Porém, em termos práticos, é o módulo quadrado da função de Cordas, $|\chi(\xi)|^2$, a parte mais usada [8].

Por exemplo, podemos considerar os estados excitados do oscilador harmônico ou *estados de Fock*, $|n\rangle$, os quais têm simetria de reflexão com respeito à origem. A forma exata da função de Wigner, derivada por Grönewold [16],

para estes estados é

$$W_n(\mathbf{x}) = \frac{(-1)^n}{\pi \hbar} e^{-\mathbf{x}^2/\hbar} L_n \left(\frac{2\mathbf{x}^2}{\hbar} \right), \quad (3.63)$$

onde L_n é o polinômio de Laguerre de ordem n . Usando (3.62) podemos achar a função de Cordas, a saber [8]

$$\chi_n(\xi) = \frac{e^{-\xi^2/4\hbar}}{2\pi \hbar} L_n \left(\frac{\xi^2}{2\hbar} \right). \quad (3.64)$$

Nas equações (3.63) e (3.64), \mathbf{x}^2 tem unidades de ação, como será explicado na seção 6.5.

A definição intrínseca da correlação no espaço de fases C_ξ , como a projeção de $|\psi\rangle$ sobre sua translação por um vetor ξ , pode ser escrita em termos das distribuições sobre o espaço de fases através de

$$\text{tr} \hat{\rho} \hat{\rho}_\eta = (2\pi \hbar)^L \int d\mathbf{x} W(\mathbf{x}) W(\mathbf{x} - \eta) = (2\pi \hbar)^L \int d\eta e^{i\eta \wedge \mathbf{x}/\hbar} |\chi(\eta)|^2. \quad (3.65)$$

No caso de um estado puro

$$\text{tr} \hat{\rho} \hat{\rho}_\eta = |\langle \psi | T_\xi | \psi \rangle|^2 \propto |\chi(\eta)|^2, \quad (3.66)$$

de modo que as auto-correlações da função de Wigner podem ser identificadas com C_ξ e $|\chi(\eta)|^2$.

Capítulo 4

Regime semiclássico da mecânica quântica

A transição entre a descrição clássica e a quântica de sistemas físicos é abordada neste capítulo. Consideramos o limite assintótico no qual a constante de Planck tende a zero, $\hbar \rightarrow 0$, conhecido como o *regime semiclássico*; isto é, o limite em que as ações clássicas associadas ao sistema forem muito maiores do que \hbar . Primeiramente calculamos nesse regime as funções de onda quânticas associadas a órbitas de um sistema físico classicamente integrável mediante expansões em aproximações WKB. Este procedimento é também conhecido como a *quantização do toro*. Para calcular nos seguintes capítulos as funções de Wigner e de Cordas destes estados.

4.1 Funções WKB na mecânica quântica

Na mecânica quântica, a equação de Schrödinger determina a evolução dos estados gerada pela ação de um Hamiltoniano $H(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{q})$ [3, 14]. Vamos resolver esta equação semiclassicamente na representação de coordenadas, o

que é equivalente a encontrar soluções tipo WKB de

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{q}, t)}{\partial t} = H(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{q})\psi(\mathbf{q}, t), \quad (4.1)$$

onde $\psi(\mathbf{q}, t) \equiv \langle \mathbf{q} | \psi(t) \rangle$. Usando a forma polar da função ψ ,

$$\psi(\mathbf{q}, t) = A(\mathbf{q}, t) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \phi(\mathbf{q}, t) \right], \quad (4.2)$$

sem explicitar as dependências funcionais, a equação (4.1) fica

$$\left[i\hbar \frac{\partial A}{\partial t} - A \frac{\partial \phi}{\partial t} \right] = e^{-i\phi/\hbar} H(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{q}) e^{i\phi/\hbar} A. \quad (4.3)$$

Dado que,

$$e^{-i\phi/\hbar} H(\hat{\mathbf{p}}, \mathbf{q}) e^{i\phi/\hbar} = H \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{q}}, \mathbf{q} \right) \quad (4.4)$$

temos que

$$\left[i\hbar \frac{\partial A}{\partial t} - A \frac{\partial \phi}{\partial t} \right] = H \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{q}}, \mathbf{q} \right) A. \quad (4.5)$$

Quando $\hbar \rightarrow 0$, podemos desprezar o termo de primeira ordem em \hbar , obtendo a equação de Hamilton-Jacobi da mecânica clássica [1, 2] para a função ϕ ,

$$H \left(\frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{q}}, \mathbf{q} \right) + \frac{\partial \phi}{\partial t} = 0. \quad (4.6)$$

Com isto fazemos a identificação da função ϕ com a função geratriz de uma transformação canônica do sistema, ao nível clássico. Assim, para uma condição inicial $\phi(\mathbf{q}, t) = S(\mathbf{q})$, temos que

$$\phi(\mathbf{q}, t) = S(\mathbf{q}_0) + \int_{\mathbf{q}_0, t}^{\mathbf{q}, t} dt [\mathbf{p} \cdot \dot{\mathbf{q}} - H]. \quad (4.7)$$

Quando o sistema é integrável, toda órbita está restrita a uma superfície L dimensional, formada pelas múltiplas interseções entre L superfícies de dimensão $2L - 1$ da forma $F_i(\mathbf{x}) = \text{constante}$, com $i = 1, \dots, L$.

Mediante uma transformação canônica podemos reduzir o movimento de um sistema integrável a translações sobre a superfície de um toro L dimensional, assim o sistema pode ser descrito usando um par de L -vetores: um

de ângulos $\boldsymbol{\theta}$ e outro de ações \mathbf{I} . Como a transformação $(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \rightarrow (\mathbf{I}, \boldsymbol{\theta})$ é canônica, esta preserva a área simplética para qualquer circuito fechado no espaço de fases:

$$\oint \mathbf{p} \cdot d\mathbf{q} = \oint \mathbf{I} \cdot d\boldsymbol{\theta}. \quad (4.8)$$

Se tomarmos $S(\mathbf{q}, \mathbf{I})$ como a função geratriz desta transformação canônica, temos que

$$\frac{\partial S}{\partial \mathbf{I}} = \boldsymbol{\theta}, \quad \frac{\partial S}{\partial \mathbf{q}} = \mathbf{p}. \quad (4.9)$$

Esta função geratriz S define uma *superfície lagrangiana*, pois a ação para todo circuito redutível γ sobre um toro definido por \mathbf{I} é nula, escrevendo explicitamente

$$\oint_{\gamma} \mathbf{p} \cdot d\mathbf{q} = 0. \quad (4.10)$$

Este resultado é de se esperar, pois é nulo o produto simplético entre qualquer par de vetores tangente ao toro, $\dot{\mathbf{x}}_{F_k}$'s, associados às constantes de movimento F_k 's (ver (3.7)).

Portanto, deixando fora a dependência temporal em (4.7), escolhermos a função $\phi = S(\mathbf{q}, \mathbf{I})$, para obter as funções de onda WKB associadas ao toro definido pela ação \mathbf{I} . As variáveis \mathbf{I} e $\boldsymbol{\theta}$, no limite semiclássico podem ser interpretadas como as correspondentes a operadores $\hat{\mathbf{I}}$ e $\hat{\boldsymbol{\theta}}$, com as relações de comutação

$$[\hat{\mathbf{I}}_k, \hat{\boldsymbol{\theta}}_j] = i\delta_{kj}\hbar. \quad (4.11)$$

Este resultado é válido no regime semiclássico, embora existam dificuldades para se definir exatamente este operador ângulo no regime quântico. Como \mathbf{I} é uma constante de movimento, a função $|\langle \boldsymbol{\theta} | \psi_{\mathbf{I}} \rangle|^2$, associada a uma escolha particular das ações \mathbf{I} , deve ser constante. Como a probabilidade não pode depender da escolha da representação, temos que

$$|\langle \boldsymbol{\theta} | \psi_{\mathbf{I}} \rangle|^2 d\boldsymbol{\theta} = |\langle \mathbf{q} | \psi_{\mathbf{I}} \rangle|^2 d\mathbf{q}, \quad (4.12)$$

obtendo que a amplitude em (4.2) é

$$A^2 = |\langle \mathbf{q} | \psi_I \rangle|^2 \propto \left| \det \frac{\partial \boldsymbol{\theta}}{\partial \mathbf{q}} \right| = \left| \frac{\partial^2 S}{\partial \mathbf{q} \partial \mathbf{I}} \right|. \quad (4.13)$$

Portanto, supondo que S só tem um ramo, temos que a função de onda WKB associada é

$$\langle \mathbf{q} | \psi_I \rangle = N \left| \det \frac{\partial^2 S(\mathbf{q}, \mathbf{I})}{\partial \mathbf{q} \partial \mathbf{I}} \right|^{\frac{1}{2}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(\mathbf{q}, \mathbf{I}) \right], \quad (4.14)$$

onde N é a constante de normalização. Entretanto em geral S é uma função *multivalorada*^{*}, o que pode gerar problemas na interface entre dois dos seus ramos para esta aproximação. Estas dificuldades são resolvidas pelo método de Maslov [13, 14, 35, 36].

Longe destas singularidades, para uma superfície lagrangiana descrita pela função geratriz $S(\mathbf{q}, \mathbf{I})$, a função de onda quântica na aproximação WKB [12, 14] será a superposição:

$$\langle \mathbf{q} | \psi_I \rangle = N \sum_j \left| \det \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{q}, \mathbf{I})}{\partial q_i \partial I_j} \right|^{\frac{1}{2}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_j(\mathbf{q}, \mathbf{I}) + i\beta_j \right], \quad (4.15)$$

onde $S_j(\mathbf{q}, \mathbf{I})$ corresponde ao j -ésimo ramo da função geratriz S , β_j à correção de Maslov e N a constante de normalização. O índice de Maslov β_j , é introduzido para especificar a mudança de fase entre os ramos da ação [14, 35, 36].

Explicitamente,

$$S_j(\mathbf{q}, \mathbf{I}) = \int_{\mathbf{q}_0}^{\mathbf{q}} \mathbf{p}_j(\mathbf{Q}, \mathbf{I}) \cdot d\mathbf{Q}, \quad \frac{\partial S_j}{\partial \mathbf{I}} = \boldsymbol{\theta}_j, \quad \frac{\partial S_j}{\partial \mathbf{q}} = \mathbf{p}_j, \quad (4.16)$$

com o qual podemos reescrever o termo do determinante como

$$\det \frac{\partial^2 S_j(\mathbf{q}, \mathbf{I})}{\partial \mathbf{q} \partial \mathbf{I}} = \det \frac{\partial \mathbf{p}_j}{\partial \mathbf{I}}(\mathbf{q}) = \left[\det \frac{\partial \mathbf{I}}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{p}_j(\mathbf{q}), \mathbf{q}) \right]^{-1}, \quad (4.17)$$

^{*}Este termo corresponde ao aportuguesamento da palavra inglesa *multivalued*.

obtendo finalmente

$$\langle \mathbf{q} | \psi_I \rangle = N \sum_j \left| \det \frac{\partial \mathbf{I}}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{p}_j(\mathbf{q}), \mathbf{q}) \right|^{-\frac{1}{2}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} S_j(\mathbf{q}, \mathbf{I}) + i\beta_j \right]. \quad (4.18)$$

Esta é a forma da função de onda semiclássica mais apropriada para os cálculos dos próximos capítulos.

Na mecânica clássica, a variável de ação \mathbf{I} pode assumir qualquer valor, mas a quantização restringe o valor de \mathbf{I} . Aquela restrição é conhecida como a condição de quantização de Bohr-Sommerfeld: se γ_k é um circuito irreduzível no plano (p_k, q_k) e I_k é a k -ésima componente de \mathbf{I} , temos que

$$2\pi I_k = \oint_{\gamma_k} \mathbf{p} \cdot d\mathbf{q} = 2\pi\hbar \left(n_k + \frac{1}{2} \right), \quad n_k \in \mathbb{Z}. \quad (4.19)$$

Isto ocorre porque a função de onda não pode depender do número de voltas que se façam sobre o circuito da integral acima [14]. Esta condição simplifica-se para um grau de liberdade

$$2\pi I = \oint p dq = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (4.20)$$

Capítulo 5

Função de Wigner semiclássica

Um primeiro acercamento para a função de Wigner no regime semiclássico é o denominado *limite clássico* proposto por Berry [6]. Se consideramos o estado semiclássico WKB (4.18) associado a uma superfície lagrangiana S e para a ação \mathbf{I} , a função de Wigner associada ao ramo j de S é

$$W_j(\mathbf{x}) = \frac{N^2}{(2\pi\hbar)^L} \int d\mathbf{Q} \left| \det \frac{\partial \mathbf{I}}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{p}_j(\mathbf{q}^+), \mathbf{q}^+) \det \frac{\partial \mathbf{I}}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{p}_j(\mathbf{q}^-), \mathbf{q}^-) \right|^{\frac{1}{2}} \times \exp \left(\frac{i}{\hbar} [S_j(\mathbf{q}^+, \mathbf{I}) - S_j(\mathbf{q}^-, \mathbf{I}) - \mathbf{p} \cdot \mathbf{Q}] \right), \quad (5.1)$$

onde $\mathbf{q}^\pm = \mathbf{q} \pm \mathbf{Q}/2$. A correção de Maslov é anulada, já que consideramos só um estado da superposição (4.18).

Para pontos \mathbf{x} perto do toro \mathbf{I} , teremos que \mathbf{p} está perto de um único ramo $\mathbf{p}_j(\mathbf{q})$

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}_j(\mathbf{q}) = \frac{\partial S_j}{\partial \mathbf{q}}. \quad (5.2)$$

Nestas condições a função correspondente $\langle \mathbf{q} | \psi_I \rangle_j$ contribui predominantemente à função de Wigner, pois as funções dos outros ramos produzem termos altamente oscilatórios.

O limite clássico obtém-se, segundo Berry [6], tomando $\mathbf{Q} = 0$ nos determinantes de (5.1), e expandindo até primeira ordem o argumento da expo-

nencial, a saber

$$S_j(\mathbf{q}^+, \mathbf{I}) - S_j(\mathbf{q}^-, \mathbf{I}) - \mathbf{p} \cdot \mathbf{Q} \simeq [\mathbf{p}_j(\mathbf{q}, \mathbf{I}) - \mathbf{p}] \cdot \mathbf{Q}, \quad (5.3)$$

de modo que

$$W_j(\mathbf{x}) = N^2 \left| \det \frac{\partial \mathbf{I}}{\partial \mathbf{p}}(\mathbf{p}_j(\mathbf{q}), \mathbf{q}) \right| \delta(\mathbf{p}_j(\mathbf{q}, \mathbf{I}) - \mathbf{p}). \quad (5.4)$$

Esta expressão pode ser escrita como função de $\mathbf{I}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$, dado que o determinante sugere uma mudança de variáveis, obtendo

$$W_j(\mathbf{x}) = N^2 \delta(I(\mathbf{x}) - \mathbf{I}_j). \quad (5.5)$$

Tomando $N^2 = (2\pi)^{-L}$, temos a normalização correta [6], dado que o jacobiano da transformação $(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \rightarrow (\mathbf{I}, \boldsymbol{\theta})$ é igual a 1. Assim, o limite clássico da função de Wigner resulta ser uma função δ de Dirac sobre sua correspondente superfície clássica. Essa aproximação não é muito útil para estudar efeitos quânticos mais detalhados. Por essa razão, faz-se necessário implementar aproximações mais *suaves*, mais em acordo com a mecânica quântica e ao mesmo tempo vinculada às estruturas no espaço de fases clássico.

Vale a pena enfatizar que essa aproximação semiclássica da função de Wigner, e as aproximações desenvolvidas ao longo dos próximos capítulos, estão feitas na representação do espaço de fases \mathbf{pq} e não correspondem a expressões na representação da ação \mathbf{I} , a qual omitimos, dado sair dos objetivos desta dissertação. Para leitores interessados, pode-se consultar o trabalho de Berry [6], onde esta representação é amplamente discutida.

5.1 Construção semiclássica da função de Wigner

Dado que no regime semiclássico a constante de Planck tende a zero, podemos fazer uma aproximação de fase estacionária para a função de Wigner.

Para um grau de liberdade, $L = 1$, temos que $\mathbf{x} = (p, q)$, e

$$W(\mathbf{x}) = \frac{N^2}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dQ G(Q; \mathbf{x}), e^{iF(Q; \mathbf{x})} \quad (5.6)$$

onde

$$G(Q; \mathbf{x}) = \left| \frac{\partial I}{\partial p}(p(q^+), q^+) \frac{\partial I}{\partial p}(p(q^-), q^-) \right|^{-\frac{1}{2}}, \quad (5.7)$$

$$F(Q; \mathbf{x}) = \frac{1}{h} \left[\int_{q^+}^{q^-} p(q') dq' - pQ \right]. \quad (5.8)$$

Portanto o expoente $F(Q, \mathbf{x})$ oscila *rapidamente*, assim a integral (5.6) é dominada pela vizinhança dos pontos estacionários de F , os quais estão determinados pela relação*

$$\frac{1}{2}[p_I(q + Q/2) + p_I(q - Q/2)] = p. \quad (5.9)$$

É importante notar as implicações geométricas desta condição: especificamente, (5.9) define a componente sobre o eixo q das *cordas* (ou vetores) cujo centro é o ponto $\mathbf{x} = (q, p)$ e com extremos sobre o toro I (ver Fig 5.1). Denominaremos como *cordas estacionárias* os vetores que ligam as interseções do toro e sua reflexão com respeito ao ponto $\mathbf{x} = (q, p)$. Esta condição é uma razão a mais pela qual só consideramos um dos ramos da função $S(q, I)$, pois para pontos perto do toro I , os extremos das possíveis cordas pertencem a um ramo só. Esta afirmação é garantida pela invariância simplética da função de Wigner [29, 39], dado que permite escolher o eixo q paralelo à corda estacionária. Assim, lidamos com um único ramo de $S(q)$, a não ser que \mathbf{x}^{\pm} sejam pontos de retorno, pois nesse caso, a corda estacionária corresponde a um diâmetro do toro, onde, como veremos logo, a aproximação de fase estacionária não é válida.

*Aqui utilizamos a regra de Leibniz,

$$\frac{d}{dx} \int^{x+\alpha} f(y) dy = f(x + \alpha).$$

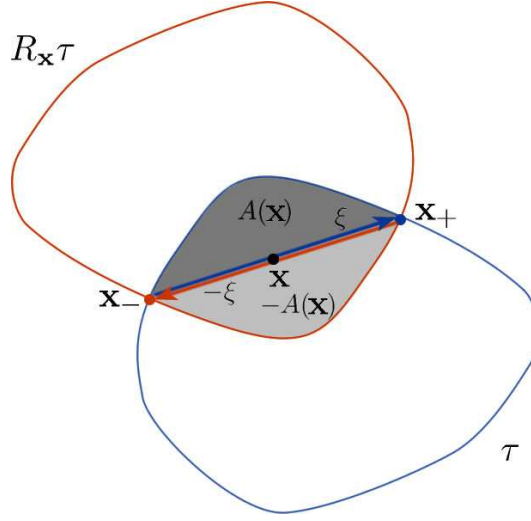


Figura 5.1: Construção geométrica dos pontos estacionários da função de Wigner. As interseções da curva clássica com sua reflexão com respeito a x definem um par de cordas centradas em x . A projeção dessas cordas no eixo q define os pontos estacionários. A área $A(x)$ determina a fase semiclássica da função de Wigner.

A simetria que a equação (5.9) apresenta indica que os pontos estacionários aparecem em pares. A fase avaliada em um ponto estacionário ξ_q é proporcional à área entre a corda estacionária e o toro, a saber

$$F(\pm\xi_q/2; \mathbf{x}) = \pm \frac{A(\mathbf{x})}{\hbar}, \quad (5.10)$$

como mostra a figura 5.1.

Por outra parte, a segunda derivada da fase é

$$F''(\pm\xi_q/2; \mathbf{x}) = \frac{1}{4\hbar} \left(\frac{\partial p}{\partial q}(q \pm \xi_q/2) - \frac{\partial p}{\partial q}(q \mp \xi_q/2) \right), \quad (5.11)$$

a qual é positiva (ou negativa) para ξ (ou $-\xi$). Assim

$$F(Q; \mathbf{x}) \simeq \pm \frac{A(\mathbf{x})}{\hbar} + \frac{1}{8\hbar} \left[\frac{\partial p}{\partial q}(q \pm \xi_q/2) - \frac{\partial p}{\partial q}(q \mp \xi_q/2) \right] (Q \pm \xi)^2 + \dots \quad (5.12)$$

Inserindo (5.12) em (5.6) e tendo em conta a identidade

$$\int_{-\infty}^{\infty} du \exp\left(\frac{iau^2}{2\hbar}\right) = \left(\frac{2\pi\hbar}{a}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{i\pi}{4} \text{sign } a\right), \quad (5.13)$$

obtemos que a contribuição da corda estacionária $\pm\xi$ à função de Wigner é

$$W^\pm(\mathbf{x}) = \frac{N^2}{h} \left| \frac{\partial I}{\partial p}(q + \xi_q/2) \frac{\partial I}{\partial p}(q - \xi_q/2) \right|^{-\frac{1}{2}} \times \left[\frac{2\pi\hbar}{F''(\pm\xi_q/2; \mathbf{x})} \right]^{\frac{1}{2}} e^{\pm i(A(\mathbf{x})/\hbar + \pi/4)}. \quad (5.14)$$

Considerando que a relação é satisfeita sobre o toro

$$\frac{\partial I}{\partial p} \frac{\partial p}{\partial q} = -\frac{\partial I}{\partial q}, \quad (5.15)$$

a função de Wigner fica

$$W(\mathbf{x}) = W^+ + W^- = \frac{\sqrt{2}N^2}{\sqrt{\pi\hbar}} \frac{\cos(A(\mathbf{x})/\hbar + \pi/4)}{|\{I(\mathbf{x} + \boldsymbol{\xi}/2), I(\mathbf{x} - \boldsymbol{\xi}/2)\}|^{\frac{1}{2}}}. \quad (5.16)$$

Esta expressão é a primeira aproximação da função de Wigner semiclássica. Tomando $N^2 = 1/2\pi$, obtemos a normalização adequada [6].

Vamos observar alguns aspectos relevantes da aproximação (5.16). Primeiramente, a aproximação de fase estacionária fornece à função de Wigner um carácter oscilatório [6, 14], tomando a forma

$$W(\mathbf{x}) = \Re \sum_j a_j(\mathbf{x}) e^{iA_j(\mathbf{x})/\hbar}, \quad (5.17)$$

onde as amplitudes e fases estão determinadas pela curva clássica.

Vimos que os pontos estacionários definem um par de valores q^\pm , os quais são as coordenadas de posição de um par de pontos \mathbf{x}^\pm sobre a curva clássica. Especificamente, cada ponto \mathbf{x}^\pm é a interseção da curva clássica e a reflexão dela com respeito ao ponto \mathbf{x} . A saber [29]

$$\mathbf{x}^+ = R_{\mathbf{x}}\mathbf{x}^- = -\mathbf{x}^- + 2\mathbf{x}. \quad (5.18)$$

Assim podemos ver que o ponto \mathbf{x} , onde avaliamos a função de Wigner, resulta ser o centro das *cordas estacionárias*, definidas por $\boldsymbol{\xi} = \pm(\mathbf{x}^+ - \mathbf{x}^-)$. Para uma curva convexa simples existe no mínimo um par de cordas $\pm\boldsymbol{\xi}(\mathbf{x})$ para cada centro de reflexão dentro da curva.

Por outro lado, as amplitudes $a_j(\mathbf{x})$ em (5.17) podem ser expressas em termos da variável canônica de ação, $I(\mathbf{x})$, a qual define a curva fechada junto com a variável ângulo $\theta(\mathbf{x})$, sua conjugada sobre a curva. Definimos então a variável transportada de ação ,

$$I^\pm = I(\mathbf{x} \pm \boldsymbol{\xi}/2), \quad (5.19)$$

assim, geralmente, os colchetes de Poisson desse par de funções são

$$\{I^+, I^-\} = \frac{\partial I^+}{\partial \mathbf{x}} \wedge \frac{\partial I^-}{\partial \mathbf{x}} \neq 0 \quad (5.20)$$

e pode-se encontrar que as amplitudes em (5.17) são

$$a(\mathbf{x}) = |\{I^+, I^-\}|^{-\frac{1}{2}}. \quad (5.21)$$

O que está por trás dessa relação é a identificação da variável de ação $I(\mathbf{x})$ com um Hamiltoniano clássico, como acontece no apêndice B. Essa suposição será fundamental nas seções seguintes. Assim, a curva clássica é uma trajetória fechada, tangente ao vetor velocidade $\dot{\mathbf{x}}$ no espaço de fases, o qual obedece a equação

$$\dot{\mathbf{x}}^\pm = \mathcal{J} \frac{\partial I^\pm}{\partial \mathbf{x}}. \quad (5.22)$$

Portanto

$$\{I^-, I^+\} = \dot{\mathbf{x}}^- \wedge \dot{\mathbf{x}}^+, \quad (5.23)$$

como é mostrado na figura 5.2. Essa anotação consta de uma teoria semiclássica mais geral desenvolvida por Littlejohn [35]. Segue-se então, que as amplitudes dependem do grau de transversalidade da interseção entre o toro e sua reflexão [6, 8], e divergerão nos pontos onde $\dot{\mathbf{x}}^+$ e $\dot{\mathbf{x}}^-$ forem paralelos.

No caso geral em que se considera todos os ramos da função de onda WKB, o cálculo por fase estacionária de cada integral para a função de

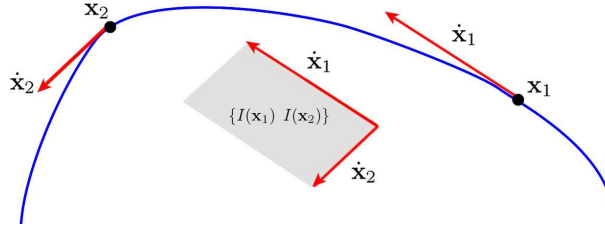


Figura 5.2: Interpretação geométrica das amplitudes semiclássicas para a função de Wigner.

Wigner se reduz a

$$W_{ij}(\mathbf{x}) = \frac{N^2}{2\pi\hbar} \int d\xi_q \left| \frac{\partial I}{\partial p}(p_i(q^+), q^+) \frac{\partial I}{\partial p}(p_j(q^-), q^-) \right|^{\frac{1}{2}} \times \exp \left[\frac{i}{\hbar} [S_i(q^+, I) - S_j(q^-, I) - p \cdot \xi_q + \beta_i - \beta_j] \right]. \quad (5.24)$$

É usual supor que as cordas estacionárias ligam pontos do mesmo ramo da curva, isto é, $i = j$, mas o tratamento das cáusticas na seção 5.3 necessitará de termos cruzados. Também vimos que fase estacionária é a metade da área entre a curva e a reflexão dela, denominada como “área da corda”, como mostra a Figura 5.1, exceto a correção de Maslov. A única diferença entre as duas fases correspondentes às cordas $\pm \xi(\mathbf{x})$, é o sinal, portanto a aproximação semiclássica é real [6].

5.2 Catástrofes da função de Wigner

De acordo com Berry [6], as catástrofes da função de Wigner para um grau de liberdade ocorrem quando a amplitude na aproximação semiclássica (5.38) diverge. Estas catástrofes genéricas correspondem a cúspides (do inglês *cusps*) e dobras (*folds*). Especificamente acontecem quando o colchete de Poisson das ações transportadas vai a zero ($\{I^+, I^-\} \rightarrow 0$). Como vimos na seção anterior, esse colchete corresponde ao produto simplético entre os vetores tangentes ao toro nos pontos \mathbf{x}^+ e \mathbf{x}^- , (5.23); temos então que as

catástrofes correspondem aos pontos onde estes vetores tangentes em \mathbf{x}^- e \mathbf{x}^+ tendem a ser paralelos, o que é equivalente a que a área sombreada na figura 5.2 seja nula. Lembremos que a corda que liga os pontos \mathbf{x}^+ e \mathbf{x}^- é a corda estacionária. Se a corda estacionária for nula, os vetores tangentes nos extremos dela são trivialmente paralelos, obtendo a catástrofe *dobra de cordas curtas*, para a qual já foi calculada a função de Wigner por Berry (ver equação (5.36)).

Definindo como diâmetro a corda secante do toro que une partes paralelas dele, podemos afirmar que as demais catástrofes acontecem quando o ponto \mathbf{x} no qual é avaliada a função de Wigner é o ponto médio de um diâmetro. Neste caso a corda estacionária é um diâmetro, como ilustra a figura 5.3. Porém existem dois tipos de catástrofes que satisfazem essa característica:

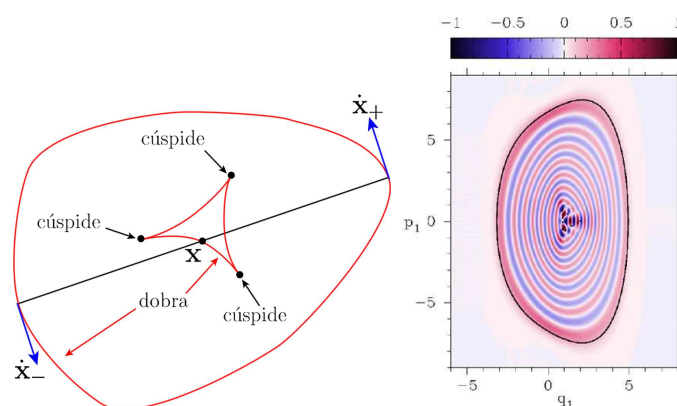


Figura 5.3: (*Esquerda*) Catástrofes da função de Wigner sobre um toro não simétrico. Existem no mínimo três pontos de cúspide ligados por dobras. Ilustra-se também as tangentes paralelas. (*Direita*) Função de Wigner para uma curva convexa e suas catástrofes [Tomado de Toscano *etal* arXiv:0705.2841v1 [nlin.CD] (2007)]

quando a curvatura do toro perto do ponto \mathbf{x}^- é igual à da região perto de \mathbf{x}^+ , e quando não ocorre isto. A primeira corresponde aos pontos de cúspide, o segundo tipo são do tipo dobra. Berry mostrou que uma curva

convexa simples tem um número ímpar de cúspides, sendo no mínimo três [6].

Outra forma de visualizar essas catástrofes é refletir o toro com respeito a pontos perto do centro. Primeiro aparecem seis interseções entre o toro e o toro refletido, as quais ligam as cordas estacionárias não paralelas, tal como mostra a figura 5.4.a). Podemos mudar continuamente o ponto de

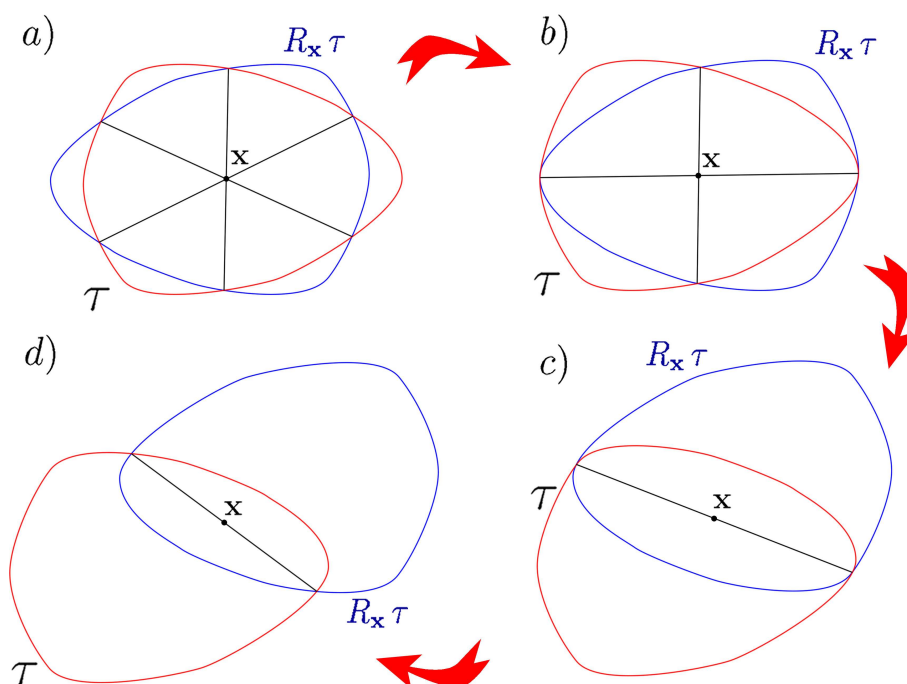


Figura 5.4: **Reflexões do toro com respeito ao ponto x .** *a) Perto da catástrofe dobra de corda longa, aparecem três cordas estacionárias. b) Catástrofe dobra de cordas longas, duas das cordas do caso a) coalescem. c) Ponto de cúspide. As três cordas colapsam para uma só. d) Ponto longe das catástrofes de cordas longas, onde é válida a aproximação de fase estacionária.*

reflexão de maneira que duas das cordas tornem-se uma só, deixando quatro interseções somente (figura 5.4.b), obtendo um ponto sobre a dobra. Agora, se deslocamos o ponto de reflexão sem sair da dobra, chegaremos ao ponto no

qual as duas cordas coalescem em uma só (esse é um ponto de cúspide, ver figura 5.4.c). Se continuamos deslocando o ponto de reflexão, mas de maneira arbitrária, obteremos um ponto onde a aproximação de fase estacionária é válida (figura 5.4.d). A diferença entre o ponto de cúspide e os pontos onde a aproximação de fase estacionária é válida é que a curvatura local nos extremos da corda no caso da cúspide é a mesma, o que não acontece no outro caso.

5.3 Aproximações uniformes da função de Wigner

Faremos aproximações para as catástrofes do tipo dobra da função de Wigner, tanto para cordas curtas como para cordas longas. A primeira corresponde só a uma extensão do caso de fase estacionária, enquanto que perto dos diâmetros a geometria exibida é mais complexa, já que tem-se uma singularidade de ordem maior.

5.3.1 Regime de corda curta

Esta aproximação foi obtida primeiramente por Berry [6]. Como vimos anteriormente, a catástrofe de cordas curtas atinge-se quando a corda estacionária for nula, ou seja que o ponto \mathbf{x} pertence ao toro \mathcal{I} .

A forma normal da catástrofe do tipo dobra é

$$\phi(u; \boldsymbol{\Omega}) = \Omega_1 u^3 + \Omega_2 u, \quad (5.25)$$

onde, no contexto da teoria das catástrofes [32, 31], $\boldsymbol{\Omega} = (\Omega_1, \Omega_2)$ é o *parâmetro de controle* e u a variável de estado.

Fazemos a transformação do expoente $F(Q; \mathbf{x})$ na equação (5.6) mediante

$$F(\xi_q; \mathbf{x}) = C(\mathbf{x}) + \frac{u^3}{3} - \zeta(\mathbf{x})u. \quad (5.26)$$

Isto é, tomar $\Omega_1 = 1$ e $\Omega_2 = -\zeta$ em (5.25). Os pontos estacionários de $\phi(u; \zeta)$ são $u = \pm\zeta^{\frac{1}{2}}$.

Para caracterizar a transformação, devemos encontrar $C(\mathbf{x})$ e $\zeta(\mathbf{x})$. Para este propósito avaliamos a equação (5.26) nos pontos estacionários, obtendo o sistema de equações:

$$\begin{aligned} F(\mathcal{E}_q; \mathbf{x}) &= +\frac{A(\mathbf{x})}{\hbar} = C(\mathbf{x}) + \phi(+\zeta^{\frac{1}{2}}, \zeta) = C(\mathbf{x}) - \frac{2}{3}\zeta^{\frac{3}{2}}, \\ F(-\mathcal{E}_q; \mathbf{x}) &= -\frac{A(\mathbf{x})}{\hbar} = C(\mathbf{x}) + \phi(-\zeta^{\frac{1}{2}}, \zeta) = C(\mathbf{x}) + \frac{2}{3}\zeta^{\frac{3}{2}}, \end{aligned}$$

onde $A(\mathbf{x})$ é a área entre a corda e o toro (ver Fig 5.1). Portanto,

$$C(\mathbf{x}) = 0, \quad \zeta^{\frac{3}{2}}(\mathbf{x}) = \frac{3A(\mathbf{x})}{2\hbar}. \quad (5.27)$$

Assim a integral (5.6) toma a forma

$$W(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} du g(u, \mathbf{x}) \exp \left[i \left(\frac{u^3}{3} - u \left[\frac{3A(\mathbf{x})}{2\hbar} \right]^{\frac{2}{3}} \right) \right], \quad (5.28)$$

onde expandimos de acordo com a proposta de Chester, Friedman e Ursell [26] até primeira ordem, para obter

$$g(u; \mathbf{x}) = G(\xi_q(u); \mathbf{x}) \left(\frac{d\xi_q}{du} \right) \simeq a(\mathbf{x}) + b(\mathbf{x}) u. \quad (5.29)$$

Lembrando que $\xi_q(\pm\zeta^{\frac{1}{2}}) = \pm\mathcal{E}_q$, os coeficientes $a(\mathbf{x})$ e $b(\mathbf{x})$ são

$$a(\mathbf{x}) = \frac{g(+\zeta^{\frac{1}{2}}; \mathbf{x}) + g(-\zeta^{\frac{1}{2}}; \mathbf{x})}{2}, \quad (5.30)$$

$$b(\mathbf{x}) = \frac{g(+\zeta^{\frac{1}{2}}; \mathbf{x}) - g(-\zeta^{\frac{1}{2}}; \mathbf{x})}{2\zeta^{\frac{1}{2}}}. \quad (5.31)$$

e

$$\frac{d\xi_q}{du} \Big|_{u=\pm\zeta^{\frac{1}{2}}} = \left| \frac{\phi''(u; \zeta)}{F''(\xi_q; \mathbf{x})} \right|^{\frac{1}{2}} \Big|_{u=\pm\zeta^{\frac{1}{2}}}, \quad (5.32)$$

onde F'' e ϕ'' representam as derivadas com respeito à variável de estado, ξ_q e u respectivamente. Explicitamente

$$\phi''(u; \zeta) = 2u, \quad F''(\xi_q; \mathbf{x}) = \frac{1}{4\hbar} \left(\frac{\partial p}{\partial q}(q + \xi_q/2) - \frac{\partial p}{\partial q}(q - \xi_q/2) \right). \quad (5.33)$$

Como $G(\xi_q; \mathbf{x})$ e $F''(\xi_q; \mathbf{x})$ são funções pares de ξ_q , temos que $g(u; \zeta)$ é par com respeito a u , portanto $b(\mathbf{x}) = 0$ e

$$\begin{aligned} a(\mathbf{x}) &= g(\zeta^{\frac{1}{2}}; \mathbf{x}) = \left| \frac{8\hbar \zeta^{\frac{1}{2}}}{\left[\frac{\partial I}{\partial p}(\mathbf{x}^+) \frac{\partial I}{\partial p}(\mathbf{x}^-) \right] \left[\frac{\partial p}{\partial q}(\mathbf{x}^+) - \frac{\partial p}{\partial q}(\mathbf{x}^-) \right]} \right|^{\frac{1}{2}} \\ &= \frac{\sqrt{8\hbar} \left(\frac{3A(\mathbf{x})}{2\hbar} \right)^{\frac{1}{6}}}{|\{I^+, I^-\}|^{\frac{1}{2}}}. \end{aligned} \quad (5.34)$$

Substituindo (5.34) em (5.28), temos

$$W(\mathbf{x}) = \frac{N^2 \sqrt{8\hbar} \left(\frac{3A(\mathbf{x})}{2\hbar} \right)^{\frac{1}{6}}}{|\{I^+, I^-\}|^{\frac{1}{2}} h} \int_{-\infty}^{\infty} du \exp \left[i \left(\frac{u^3}{3} - u \left[\frac{3A(\mathbf{x})}{2\hbar} \right]^{\frac{2}{3}} \right) \right]. \quad (5.35)$$

Finalmente obtemos a expressão para a função de Wigner de Berry [6],

$$W(\mathbf{x}) = \frac{N^2 \sqrt{8} \left[\frac{3}{2} A(\mathbf{x}) \right]^{\frac{1}{6}}}{\hbar^{\frac{2}{3}} |\{I^+, I^-\}|^{\frac{1}{2}}} \text{Ai} \left(- \left[\frac{3A(\mathbf{x})}{2\hbar} \right]^{\frac{2}{3}} \right), \quad (5.36)$$

onde Ai é a função de Airy [34]. A amplitude da aproximação semiclássica está expressada como função de colchetes de Poisson da ação I , tal como é mostrado na teoria de Littlejohn [35]. Quando \mathbf{x} está dentro do toro, mas longe dele —a área $A(\mathbf{x})$ é muito maior comparada com \hbar — podemos usar a forma assintótica da função de Airy [34], que podem ser escritas como

$$\text{Ai}(x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} \pi^{-\frac{1}{2}} (-x)^{-\frac{1}{4}} \cos \left(\frac{2}{3} (-x)^{\frac{3}{2}} - \frac{\pi}{4} \right). \quad (5.37)$$

Então, nessa região a função de Wigner toma a forma

$$W(\mathbf{x}) \longrightarrow \frac{\sqrt{2} N^2 \cos(A(\mathbf{x})/\hbar - \pi/4)}{\sqrt{\pi \hbar} |\{I^+, I^-\}|^{\frac{1}{2}}}, \quad \text{quando } A(\mathbf{x}) \gg \hbar, \quad (5.38)$$

e assim recuperamos assintoticamente a expressão da aproximação de fase estacionária para a função de Wigner (5.16).

Para pontos \mathbf{x} fora do toro, quer dizer pontos além da cásutica, as soluções de (5.9) são complexas, portanto lidamos com cordas estacionárias complexas. Então $A(\mathbf{x})$ é imaginário puro com fase $\frac{3}{2}\pi$ e o argumento da função de

Airy em (5.36) é positiva, obtêndo-se um comportamento evanescente para a função de Wigner [6].

5.3.2 Regime de corda longa

Quando \mathbf{x} está perto do centro de um diâmetro do toro, mas do tipo dobra, podemos fazer uma aproximação similar. Como nosso toro é uma curva convexa simples, a ação S tem dois ramos, denotados por S_+ e S_- . Se inserimos a função de onda semiclássica (4.18) na eq. (3.53) obtemos quatro termos do tipo (5.24), a saber

$$W(\mathbf{x}) = W_+ + W_- + 2\Re W_{\pm}, \quad (5.39)$$

onde W_+ (ou W_-) está associado ao ramo superior S_+ (ou inferior S_-) e W_{\pm} e W_{\mp} aos termos cruzados do tipo (5.24) para $i \neq j$. A igualdade (5.39) é devida a que $W_{\pm} = W_{\mp}^*$. Independente da escolha do eixo q , para pontos no interior do toro não podemos evitar que surja o termo W_{\pm} em (5.39), mas podemos, mediante uma rotação no espaço de fases, escolhê-lo de maneira que as três cordas sejam pontos estacionários cruzados[†], tal como mostra a figura 5.5. Assim a função de Wigner se reduz aos termos cruzados.

Para analisar o caso da dobra, a corda não interagente na singularidade é tratada isoladamente; razão pela qual a aproximação de fase estacionária é mais apropriada para essa corda, a qual denotaremos por $\xi_3 = (\mathcal{E}_{p_3}, \mathcal{E}_{q_3})$, pois ela está longe da catástrofe. A fase semiclássica no ponto \mathcal{E}_{q_3} , é a área simplética entre a corda ξ_3 e o toro, que denotamos por $A_3(\mathbf{x})$ na figura 5.5.

[†]Por ponto estacionário cruzado nos referimos àqueles cujos extremos da corda pertencem a ramos diferentes da ação S .

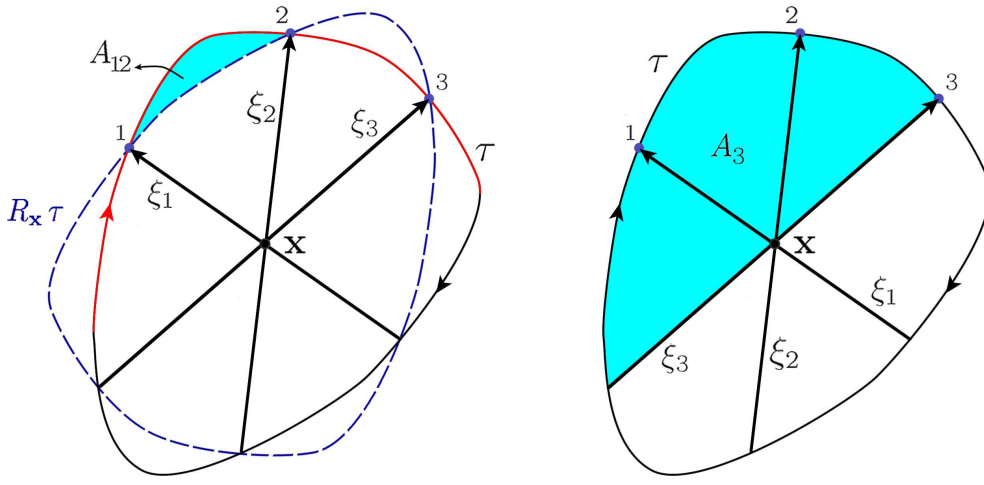


Figura 5.5: Cordas estacionárias no toro. A diferença de fase entre a contribuições da corda ξ_1 e ξ_2 é determinada pela área simplética A_{12} . A contribuição correspondente à corda isolada, ξ_3 , é determinada por A_3 .

Denotando $q_3^\pm = q \pm \mathcal{E}_{q_3}/2$, a contribuição da corda ξ_3 à função de Wigner é

$$W_3 = N^2 \Re e \frac{e^{iA_3/\hbar}}{2\pi\hbar} \left| \frac{\partial I}{\partial p}(q_3^+) \frac{\partial I}{\partial p}(q_3^-) \right|^{-\frac{1}{2}} \times \int_{-\infty}^{\infty} d\xi_q \exp \left(\frac{i}{\hbar} (\xi_q - \mathcal{E}_{q_3})^2 f''(\mathcal{E}_{q_3}) \right). \quad (5.40)$$

Lembrando (5.13) e (5.15), esta integral pode ser avaliada diretamente, obtendo-se

$$W_3 = \frac{4N^2}{\sqrt{\hbar}} |\{I(\mathbf{x} + \xi_3/2), I(\mathbf{x} - \xi_3/2)\}|^{-\frac{1}{2}} \cos \left(\frac{A_3}{\hbar} - \frac{\pi}{4} \right). \quad (5.41)$$

A contribuição dos outros dois pontos estacionários, os quais estão associadas às cordas ξ_1 e ξ_2 , é obtida avaliando a função de Wigner mediante uma aproximação uniforme para uma catástrofe tipo dobra. Aproximando o expoente com a forma normal (5.25) e sendo \mathcal{E}_{q_1} e \mathcal{E}_{q_2} as componentes em q das cordas estacionárias, exigimos que $\xi_q(\zeta^{\frac{1}{2}}) = \mathcal{E}_{q_1}$ e $\xi_q(-\zeta^{\frac{1}{2}}) = \mathcal{E}_{q_2}$, obtendo

as constantes que caracterizam a transformação, C e ζ , das equações:

$$\begin{aligned} F(\mathcal{E}_{q_1}; \mathbf{x}) &= \frac{A_1(\mathbf{x})}{\hbar} = C(\mathbf{x}) + \frac{2}{3}\zeta^{\frac{3}{2}}, \\ F(\mathcal{E}_{q_2}; \mathbf{x}) &= \frac{A_2(\mathbf{x})}{\hbar} = C(\mathbf{x}) - \frac{2}{3}\zeta^{\frac{3}{2}}. \end{aligned}$$

Aqui A_1 e A_2 são as áreas simpléticas limitadas pelo toro e as cordas ξ_1 e ξ_2 , respectivamente, como é mostrado no apêndice A. Denotando por A_{12} à diferença dessas duas áreas, temos que

$$C(\mathbf{x}) = \frac{A_1(\mathbf{x}) + A_2(\mathbf{x})}{2\hbar}, \quad \zeta^{\frac{3}{2}}(\mathbf{x}) = \frac{3}{4} \frac{A_1(\mathbf{x}) - A_2(\mathbf{x})}{\hbar} = \frac{3}{4} \frac{A_{12}(\mathbf{x})}{\hbar}. \quad (5.42)$$

Denotando por W_{12} a integral associada às cordas ξ_1 e ξ_2 , temos que

$$\begin{aligned} W_{12}(\mathbf{x}) &= \Re e \frac{N^2}{i\hbar} \exp \left[i \frac{A_1 + A_2}{2\hbar} \right] \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} dz g(z; \mathbf{x}) \exp \left(i \left[\frac{z^3}{3} - z \left(\frac{3}{4} \frac{A_{12}(\mathbf{x})}{\hbar} \right)^{\frac{2}{3}} \right] \right), \end{aligned} \quad (5.43)$$

onde

$$g(z; \mathbf{x}) = \left| \frac{\partial I}{\partial p}(q(z) + \xi_q/2) \frac{\partial I}{\partial p}(q(z) - \xi_q/2) \right|^{-\frac{1}{2}} \frac{d\xi_q}{dz}. \quad (5.44)$$

Expandimos esta função em torno dos pontos estacionários de acordo com a equação (2.40). Definindo a ação transladada por cada corda estacionária ξ_j como $I_j^\pm \equiv I(\mathbf{x} \pm \xi_j/2)$, temos que

$$g(\zeta^{\frac{1}{2}}, \mathbf{x}) = 2\sqrt{2\hbar\zeta^{\frac{1}{2}}} |\{I_1^+, I_1^-\}|^{-\frac{1}{2}}, \quad (5.45)$$

$$g(-\zeta^{\frac{1}{2}}, \mathbf{x}) = 2\sqrt{2\hbar\zeta^{\frac{1}{2}}} |\{I_2^+, I_2^-\}|^{-\frac{1}{2}}. \quad (5.46)$$

Assim

$$\begin{aligned} a(\mathbf{x}) &= \sqrt{2\hbar\zeta^{\frac{1}{2}}} \left(|\{I_1^+, I_1^-\}|^{-\frac{1}{2}} + |\{I_2^+, I_2^-\}|^{-\frac{1}{2}} \right), \\ b(\mathbf{x}) &= \sqrt{2\hbar\zeta^{-\frac{1}{2}}} \left(|\{I_1^+, I_1^-\}|^{-\frac{1}{2}} - |\{I_2^+, I_2^-\}|^{-\frac{1}{2}} \right). \end{aligned}$$

Para compactar a notação é conveniente definir as seguintes quantidades $\Sigma I^{12} \equiv |\{I_1^+, I_1^-\}|^{-\frac{1}{2}} + |\{I_2^+, I_2^-\}|^{-\frac{1}{2}}$ e $\Delta I^{12} \equiv |\{I_1^+, I_1^-\}|^{-\frac{1}{2}} - |\{I_2^+, I_2^-\}|^{-\frac{1}{2}}$; assim temos que

$$a(\mathbf{x}) = \sqrt{2\hbar} \left(\frac{3 A_{12}(\mathbf{x})}{4 \hbar} \right)^{\frac{1}{6}} \Sigma I_{12}, \quad b(\mathbf{x}) = \sqrt{2\hbar} \left(\frac{3 A_{12}(\mathbf{x})}{4 \hbar} \right)^{-\frac{1}{6}} \Delta I_{12}, \quad (5.47)$$

portanto

$$W_{12}(\mathbf{x}) = \Re e \frac{N^2}{2\pi i \hbar} \exp \left[i \frac{A_1 + A_2}{2\hbar} \right] \int_{-\infty}^{\infty} dz [a(\mathbf{x}) + b(\mathbf{x})z] \times \exp \left(i \left[\frac{z^3}{3} - z \left(\frac{3 A_{12}(\mathbf{x})}{4 \hbar} \right)^{\frac{2}{3}} \right] \right). \quad (5.48)$$

Tomando a parte real e definindo $\Sigma A(\mathbf{x}) \equiv A_1(\mathbf{x}) + A_2(\mathbf{x})$, obtemos

$$W_{12}(\mathbf{x}) = \frac{\sqrt{2\pi} N^2 \left[\frac{3}{4} A_{12}(\mathbf{x}) \right]^{\frac{1}{6}} \Sigma I_{12}}{\hbar^{\frac{2}{3}}} \sin \left(\frac{\Sigma A(\mathbf{x})}{2\hbar} \right) \text{Ai} \left(- \left[\frac{3 A_{12}(\mathbf{x})}{4 \hbar} \right]^{\frac{2}{3}} \right) - \frac{\sqrt{2} N^2 \Delta I_{12}}{\hbar^{\frac{1}{3}} \left[\frac{3}{4} A_{12}(\mathbf{x}) \right]^{\frac{1}{6}}} \cos \left(\frac{\Sigma A(\mathbf{x})}{2\hbar} \right) \text{Ai}' \left(- \left[\frac{3 A_{12}(\mathbf{x})}{4 \hbar} \right]^{\frac{2}{3}} \right). \quad (5.49)$$

Finalmente, combinando (5.41) e (5.49), a função de Wigner para pontos perto da dobra no regime de cordas longas é

$$W(\mathbf{x}) = \frac{4N^2}{\sqrt{\hbar}} |\{I_3^+, I_3^-\}|^{-\frac{1}{2}} \cos \left(\frac{A_3}{\hbar} - \frac{\pi}{4} \right) + \frac{\sqrt{2} N^2 \left[\frac{3}{4} A_{12}(\mathbf{x}) \right]^{\frac{1}{6}} \Sigma I_{12}}{\hbar^{\frac{2}{3}}} \sin \left(\frac{\Sigma A(\mathbf{x})}{2\hbar} \right) \text{Ai} \left(- \left[\frac{3 A_{12}(\mathbf{x})}{4 \hbar} \right]^{\frac{2}{3}} \right) - \frac{\sqrt{2} N^2 \Delta I_{12}}{\hbar^{\frac{1}{3}} \left[\frac{3}{4} A_{12}(\mathbf{x}) \right]^{\frac{1}{6}}} \cos \left(\frac{\Sigma A(\mathbf{x})}{2\hbar} \right) \text{Ai}' \left(- \left[\frac{3 A_{12}(\mathbf{x})}{4 \hbar} \right]^{\frac{2}{3}} \right). \quad (5.50)$$

Lembremos que A_{12} corresponde à área simplética entre os pontos 1 e 2 (figura 5.5), limitada pelo toro τ e o toro refletido $R_{\mathbf{x}}\tau$. Esta área resulta ser a diferença de fase entre estas duas variedades, o que está de acordo com a teoria de Littlejohn [35].

A função de Airy, $\text{Ai}(-\zeta)$, oscila incrementando a amplitude a medida que seu argumento aumenta e logo decai exponencialmente para valores positivos de $-\zeta$. Esses valores positivos de $-\zeta$ aparecem das soluções complexas da condição de fase estacionária 5.9 [6], da mesma maneira que para pontos \mathbf{x} fora do toro. A máxima amplitude, que acontece justo antes da origem, indica a singularidade da amplitude semiclássica na cáustica. Nesta região, o segundo termo, que depende de $\text{Ai}'(-\zeta)$ pode ser desprezado, mas ele é necessário para obter o comportamento correto na região oscilatória, onde a descrição semiclássica mais simples é válida. Este termo aparece devido à ausência da simetria de reflexão, uma propriedade da função de Wigner para cordas curtas (5.36). Outra diferença com (5.36) é a fase oscilatória proporcional a $\Sigma\mathcal{A}$ ao longo da cáustica, a qual é importante na hora de separar as contribuições de cada corda estacionária no regime oscilatório. De fato, se consideramos o caso no qual as áreas A_i são comparativamente maiores do que a constante de Planck, podemos aproximar a função de Airy e a sua derivada pelas suas formas assintóticas para argumentos negativos muito grandes [34]. As quais são (5.37) e

$$\text{Ai}'(-x) \rightarrow \frac{x^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{\pi}} \sin\left(\frac{2}{3}x^{\frac{3}{2}} - \frac{\pi}{4}\right), \quad (5.51)$$

respectivamente. Assim obtemos a forma correta para o regime oscilatório:

$$W(\mathbf{x}) = \frac{4N^2}{\sqrt{h}} \left[\frac{\cos\left(\frac{A_1}{h} + \frac{\pi}{4}\right)}{|\{I_1^+, I_1^-\}|^{\frac{1}{2}}} + \frac{\cos\left(\frac{A_2}{h} - \frac{\pi}{4}\right)}{|\{I_2^+, I_2^-\}|^{\frac{1}{2}}} + \frac{\cos\left(\frac{A_3}{h} - \frac{\pi}{4}\right)}{|\{I_3^+, I_3^-\}|^{\frac{1}{2}}} \right] \quad (5.52)$$

Este resultado corresponde à soma das contribuições individuais para cada corda estacionária, onde consideramos que cada uma é cruzada.

Quando o ponto \mathbf{x} atravessa a catástrofe, as cordas ξ_1 e ξ_2 desaparecem, o que faz com que só sobreviva a contribuição da corda não interagente ξ_3 , recuperando-se assim a aproximação de fase estacionária para uma corda só. Porém a constante de normalização deve ser reavaliada, como discutiremos na seção 6.5.

Para finalizar, vemos que a expressão (5.52) parece ter uma falta de simetria; dado que o termo da corda ξ_1 possui uma defasagem de $\pi/2$ respeito aos outros dois. Por outra parte, a avaliação da função de Wigner por fase estacionária, supõe o uso de cordas não cruzadas. A escolha dos eixos em nosso cálculos é tal enquanto A_1 resulta ser a área complementar à fase da expressão de fase estacionária (ver (5.16)), associada a ξ_1 .

5.4 Regime transicional da função de Wigner

A aproximação uniforme (5.50) não está definida explicitamente para pontos que estão muito perto da cáustica, porque $A_{12} \rightarrow 0$ a medida que a cáustica é alcançada, enquanto que $\Sigma I^{12} \rightarrow \infty$. Nesta região, a curva clássica que sustenta o estado pode ser aproximado por parábolas nas vizinhanças dos extremos do diâmetro ξ_D , o qual representa o limite onde atinge-se a singularidade. Esta aproximação iguala a amplitude associada a cada ponto estacionário, quer dizer $\Sigma I^{12} = 2\{I^+, I^-\}$ e $\Delta I^{12} \rightarrow 0$. Assim, o termo que contém a derivada da função de Airy em (5.50) cancela-se perto da cáustica.

Para se obter uma expressão explícita para a função de Wigner transicional, começamos lembrando que a variável de ação, $I(\mathbf{x})$, pode ser interpretada como um Hamiltoniano, tal que a curva clássica é uma trajetória gerada pelo seu fluxo; assim, o toro resulta ser a curva de nível $I(\mathbf{x}) = \mathcal{I}$. Considerando um ponto \mathbf{x} perto do toro, tal que ele é o centro de uma corda η , a qual conecta dois pontos sobre a curva, \mathbf{x}_a and \mathbf{x}_b , em primeira aproximação podemos supôr que

$$\mathbf{x}_b \simeq \mathbf{x}_a + \tau \dot{\mathbf{x}}_a, \quad (5.53)$$

para \mathbf{x} muito perto do toro, sendo $\dot{\mathbf{x}}$ a velocidade clássica gerada pelo Hamiltoniano $I(\mathbf{x})$. Então a variável de ação $I(\mathbf{x})$ pode ser expandida como

$$\mathcal{I} - I(\mathbf{x}) \simeq \frac{1}{8} \tau^2 \dot{\mathbf{x}} \mathcal{J}_{\mathbf{x}} \dot{\mathbf{x}}, \quad (5.54)$$

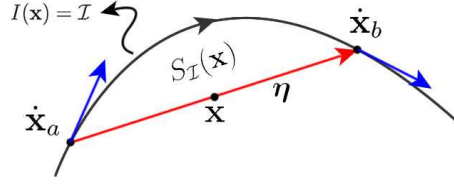


Figura 5.6: A área $S_{\mathcal{I}}$ para pontos que estão muito perto da curva de nível, $I(\mathbf{x}) = \mathcal{I}$. Os extremos da corda η evoluem de acordo ao fluxo Hamiltoniano gerado por $I(\mathbf{x})$. Em primeira aproximação, esta evolução é assumida linear.

(ver (B.11) ou a ref. [29]) onde

$$\mathfrak{J}_{\mathbf{x}} = \frac{\partial^2 I(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}^2} \quad (5.55)$$

é a matriz Hessiana de I avaliada no ponto \mathbf{x} . Esse Hamiltoniano quadrático gera o movimento linear suposto em (5.53). Por outro lado, a área entre a dita corda η e o toro, como mostra a figura 5.6, resulta ser [29],

$$S_{\mathcal{I}}(\mathbf{x}) \simeq \frac{1}{12} \tau^3 \dot{\mathbf{x}} \mathfrak{J}_{\mathbf{x}} \dot{\mathbf{x}}. \quad (5.56)$$

como está calculado no apêndice B.

Definimos $\bar{\xi}$ como a média entre as cordas estacionárias ξ_1 e ξ_2 e o par de pontos $\mathbf{y}^{\pm} = \mathbf{x} \pm \bar{\xi}/2$, como mostra a figura 5.7. Com isto, podemos notar que a área A_{12} na figura 5.5 pode ser obtida como

$$A_{12}(\mathbf{x}) = S_{\mathcal{I}}(\mathbf{y}^+) + S_{\mathcal{I}}(\mathbf{y}^-) = \frac{1}{12} (\tau_+^3 \dot{\mathbf{y}}^+ \mathfrak{J}_{\mathbf{y}^+} \dot{\mathbf{y}}^+ - \tau_-^3 \dot{\mathbf{y}}^- \mathfrak{J}_{\mathbf{y}^-} \dot{\mathbf{y}}^-), \quad (5.57)$$

onde τ_{\pm} é o tempo de separação entre os pontos $\mathbf{x}_1 \equiv \mathbf{x} \pm \xi_1$ e $\mathbf{x}_2 \equiv \mathbf{x} \pm \xi_2$, de acordo com a evolução gerada pelo Hamiltoniano $I(\mathbf{x})$.

Os colchetes de Poisson das variáveis de ação nas amplitudes (5.50) podem ser escritos mediante os produtos simpléticos

$$\dot{\mathbf{x}}_1^+ \wedge \dot{\mathbf{x}}_1^- = \{I_1^+, I_1^-\} \simeq \{I_2^+, I_2^-\} = -\dot{\mathbf{x}}_2^- \wedge \dot{\mathbf{x}}_2^+. \quad (5.58)$$

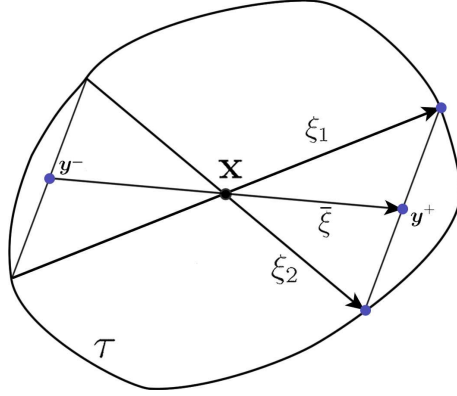


Figura 5.7: Ilustração da corda $\bar{\xi}$ e dos pontos y^\pm sobre o toro, para um ponto x e suas cordas estacionárias ξ_1 e ξ_2 .

Logo, definindo as ‘acelerações’ [29, 33], $\ddot{\mathbf{x}}_1$ and $\ddot{\mathbf{x}}_2$, como

$$\ddot{\mathbf{x}}_j = \left(\dot{\mathbf{x}}_j \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right) \dot{\mathbf{x}} = \mathbf{J} \mathcal{I}_x \dot{\mathbf{x}}, \quad (5.59)$$

tal que $\dot{\mathbf{x}}_2^\pm \simeq \dot{\mathbf{x}}_1^\pm + \tau_\pm \ddot{\mathbf{x}}_1^\pm$, obtemos

$$\{I_1^+, I_1^-\} = \frac{1}{2} [\tau_+ \dot{\mathbf{y}}^- \mathcal{I}_{\mathbf{y}^+} \dot{\mathbf{y}}^+ + \tau_- \dot{\mathbf{y}}^+ \mathcal{I}_{\mathbf{y}^-} \dot{\mathbf{y}}^-]. \quad (5.60)$$

Os tempos τ_+ e τ_- podem ser avaliados usando (5.54). Assim (5.57) fica

$$\frac{3}{4} A_{12}(\mathbf{x}) = \sqrt{2} \left[\frac{[\mathcal{I} - I(\mathbf{y}^+)]^{\frac{3}{2}}}{[\dot{\mathbf{y}}^+ \mathcal{I}_{\mathbf{y}^+} \dot{\mathbf{y}}^+]^{\frac{1}{2}}} - \frac{[\mathcal{I} - I(\mathbf{y}^-)]^{\frac{3}{2}}}{[\dot{\mathbf{y}}^- \mathcal{I}_{\mathbf{y}^-} \dot{\mathbf{y}}^-]^{\frac{1}{2}}} \right]. \quad (5.61)$$

Portanto, temos todos os ingredientes necessários para avaliar a função de Wigner transicional

$$W(\mathbf{x}) = \frac{4 \sin \left[\frac{\Sigma A}{2\hbar} \right] [\tau_+^3 \dot{\mathbf{y}}^+ \mathcal{I}_{\mathbf{y}^+} \dot{\mathbf{y}}^+ - \tau_-^3 \dot{\mathbf{y}}^- \mathcal{I}_{\mathbf{y}^-} \dot{\mathbf{y}}^-]^{\frac{1}{6}}}{\pi^{\frac{1}{3}} h^{\frac{2}{3}} [\tau_- \dot{\mathbf{y}}^+ \mathcal{I}_{\mathbf{y}^-} \dot{\mathbf{y}}^- - \tau_+ \dot{\mathbf{y}}^- \mathcal{I}_{\mathbf{y}^+} \dot{\mathbf{y}}^+]^{\frac{1}{2}}} \times \text{Ai} \left(-2^{\frac{1}{3}} \left[\frac{[\mathcal{I} - I(\mathbf{y}^+)]^{\frac{3}{2}}}{[\dot{\mathbf{y}}^+ \mathcal{I}_{\mathbf{y}^+} \dot{\mathbf{y}}^+]^{\frac{1}{2}}} - \frac{[\mathcal{I} - I(\mathbf{y}^-)]^{\frac{3}{2}}}{[\dot{\mathbf{y}}^- \mathcal{I}_{\mathbf{y}^-} \dot{\mathbf{y}}^-]^{\frac{1}{2}}} \right]^{\frac{2}{3}} \right). \quad (5.62)$$

Aqui omitimos o termo W_3 , ver (5.41), o qual não tem problemas de convergência na cáustica, pois é o termo da corda isolada ξ_3 .

Como pode ser visto, esta forma transicional da função de Wigner não está bem definida no caso particular de uma curva com simetria de reflexão com respeito ao ponto \mathbf{x} , pois o conjunto singular, formado por cúspides e dobras, colapsa ao ponto \mathbf{x} , obtendo-se assim uma catástrofe de ordem superior, para a qual o presente tratamento perde validade.

Capítulo 6

Função de Cordas semiclássica

A primeira aproximação para a função de Cordas semiclássica é devida a Ozorio de Almeida, Vallejos e Saraceno [8], procurando explicar o comportamento da função de correlação entre um estado associado a uma variedade clássica e a translação do mesmo. Eles usaram a aproximação de fase estacionária para tal fim; portanto as regiões onde a função de Cordas apresenta cústicas estão além do desenvolvimento tratado em [8]. Neste capítulo faremos um resumo daquele trabalho e calcularemos uma aproximação uniforme para a função de Cordas.

6.1 Cordas pequenas e o limite clássico

Primeiramente avaliamos o símbolo de Weyl do operador de translação \hat{T}_ξ ,

$$T_\xi(\mathbf{x}) = 2^{L\text{tr}\hat{R}_\mathbf{x}}\hat{T}_\xi = e^{-ix\wedge\xi/\hbar} \left(2^{L\text{tr}\hat{R}_{\mathbf{x}-\xi/2}} \right) = e^{-ix\wedge\xi/\hbar}. \quad (6.1)$$

Este símbolo tem um comportamento *suave*, quando a amplitude da corda $|\xi|$ é da mesma ordem que a constante de Planck. Por outro lado, lembramos que a função de Cordas é proporcional ao valor esperado do operador translação e que o valor médio de um operador pode-se escrever como uma convolução

do seu símbolo de Weyl com a função de Wigner (ver equação (3.56)), então

$$\chi(\xi) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^L} \langle \hat{T}_{-\xi} \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^L} \int d\mathbf{x} T_{-\xi}(\mathbf{x}) W(\mathbf{x}). \quad (6.2)$$

Assim, o limite clássico da função de Cordas pode ser encontrado inserindo (5.5) na integral anterior, obtendo-se [8]

$$\chi(\xi) \simeq \frac{1}{(2\pi\hbar)^L} \int d\mathbf{x} e^{-\xi \wedge \mathbf{x} / \hbar} \delta(I(\mathbf{x}) - \mathcal{I}). \quad (6.3)$$

Como só os pontos sobre o toro, definido como a superfície de nível $I(\mathbf{x}) = \mathcal{I}$, contribuem para esta integral, podemos fazer uma mudança de variáveis de $\mathbf{x} \rightarrow \theta$, onde θ são as variáveis de ângulo, conjugadas às ações I . Então a integral (6.3) fica [8]

$$\chi(\xi) \simeq \frac{1}{(2\pi\hbar)^L} \int \frac{d\theta}{(2\pi)^L} e^{-\xi \wedge \mathbf{x}(\theta) / \hbar}, \quad (6.4)$$

onde o fator $(2\pi)^L$ é o jacobiano da mudança de variáveis. Temos que ter em conta que a escolha inadequada da origem ocasiona que o argumento da função exponencial seja grande, desse modo a aproximação $|\mathbf{x}(\theta)| \simeq \hbar$ não será válida. Portanto, é melhor tomar a origem de maneira que o módulo de \mathbf{x} , em média, seja minimizada.

6.2 Fase estacionária para a função de Cordas

Da mesma forma que para a função de Wigner, partimos da função de onda WKB, equação (4.18), para um ramo S_j da ação. Com isto, a integral que define a função de Cordas para um grau de liberdade será

$$\chi(\xi) = \frac{N^2}{h} \int_{-\infty}^{\infty} dq G(q; \xi) e^{iF(q; \xi)}, \quad (6.5)$$

onde

$$G(q; \xi) = \left| \frac{\partial I}{\partial p_j}(q + \xi_q/2) \frac{\partial I}{\partial p_j}(q - \xi_q/2) \right|^{\frac{1}{2}} \quad (6.6)$$

e

$$F(q; \xi) = \frac{1}{\hbar} \left[\int_{q-\xi_q/2}^{q+\xi_q/2} p_j(q) dq - \xi_p q \right]. \quad (6.7)$$

A condição de fase estacionária é determinada pela relação

$$p_j(Q + \xi/2) - p_j(Q - \xi/2) = \xi_p. \quad (6.8)$$

Geometricamente, os pontos estacionários correspondem aos centros $\mathbf{x}_i = (p_i, q_i)$, onde a corda ξ “encaixa” no toro (Ver Fig 6.1), o que chamaremos

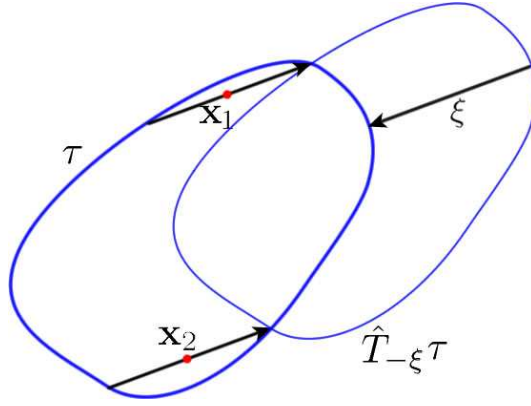


Figura 6.1: **Realizações da corda ξ sobre o toro. Os centros \mathbf{x}_i correspondem aos pontos estacionários.**

de *realização da corda ξ no toro τ* . Como nosso toro é uma curva convexa simples e fechada, temos duas realizações da corda.

A fase da função de Cordas depende da origem, mas esta é uma fase global especificada trivialmente pela relação de translação de função de Cordas (3.61). Seja $\mathbf{x}_j = (q_j, p_j)$ um ponto estacionário associado ao ramo S_j e por simplicidade, transladamos a origem ao ponto $(0, q_j)$, de maneira que a fase resulta ser

$$\hbar F(q_j; \xi) = \mathcal{A}_{\mathbf{x}_j}(\xi) + \mathbf{x}_j \wedge \xi, \quad (6.9)$$

onde $\mathcal{A}_{\mathbf{x}_j}(\xi)$ é a área entre o toro e a realização da corda ξ com centro em \mathbf{x}_j . São várias as interpretações geométricas desta fase, as quais estão ilustradas na figura 6.2.

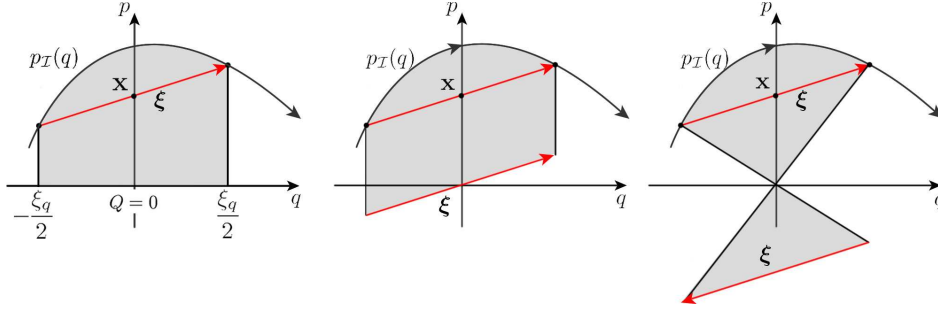


Figura 6.2: Diferentes interpretações geométricas para a fase semiclássica da função de Cordas na aproximação de fase estacionária, considerando um ramo da ação. A fase estacionária é determinada pela área sombreada nos três casos [8].

Portanto, a integral (6.5) pode ser avaliada diretamente, tendo em conta (5.13) e (5.15), obtendo

$$\chi_j(\xi) = \frac{N^2}{|\{I^+, I^-\}|^{\frac{1}{2}}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\mathcal{A}_{\mathbf{x}_0}(\xi) + \mathbf{x}_0 \wedge \xi - \sigma_j \frac{\pi}{4} \right) \right], \quad (6.10)$$

onde σ_j é o sinal da matriz

$$\frac{\partial^2}{\partial Q^2} [S_j(q^+) - S_j(q^-)], \quad (6.11)$$

e $I^\pm = I(\mathbf{x}_0 \pm \xi/2)$ são os extremos da realização de corda ξ sobre o toro. Assim, a aproximação mais simples para a função de Cordas semiclássica toma a forma

$$\begin{aligned} \chi(\xi) &= N^2 \sum_j \alpha_j(\xi) \exp \left[\frac{i}{\hbar} \left(\mathcal{A}_{\mathbf{x}_j}(\xi) + \mathbf{x}_j \wedge \xi + \frac{\pi}{4} \sigma_j(\xi)/\hbar \right) \right] \\ &= \sum_j \chi_j(\xi), \end{aligned} \quad (6.12)$$

onde j numera todos os ramos de S onde têm-se pontos estacionários e

$$\alpha_j(\xi) = |\{I_j^+, I_j^-\}|^{-\frac{1}{2}}. \quad (6.13)$$

Esta é função de Cordas para o regime oscilatório.

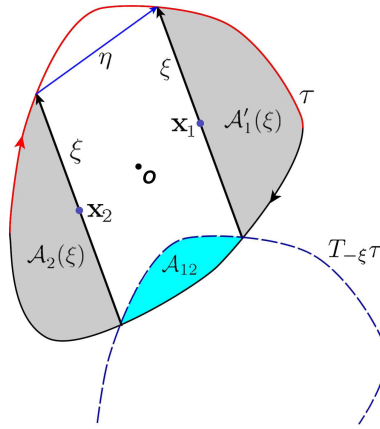


Figura 6.3: A diferença entre as áreas de cada realização, \mathcal{A}_{12} , coincide com a área entre a curva clássica e a sua translação. Esta área tende a zero quando ξ se torna um diâmetro e a corda conjugada $\eta = \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2 \rightarrow 0$. A escolha natural da origem do espaço de fases é o ponto médio entre os pontos \mathbf{x}_1 and \mathbf{x}_2 .

6.3 Aproximação uniforme da função de Cordas

A forma semiclássica da função de Cordas obtida em (6.12) perde validade em regiões próximas às cústicas. Quando temos uma curva fechada simples, são duas as realizações da corda, tal como mostra a figura 6.1. Se mudarmos a corda ξ continuamente até conseguir que as duas realizações coalesçam em uma corda maximal, denotada por ξ_D , a amplitude α em (6.13) diverge. ξ_D corresponde a um *diâmetro* da curva. Neste caso, aqueles diâmetros formam uma cústica tipo dobra e não temos singularidades de outro tipo, obtendo uma geometria mais simples do que a cústica da função de Wigner.

Podemos simplificar o cálculo tomando como origem o ponto médio entre os centros das duas realizações da corda ξ , como é mostrado na figura 6.3. O par de pontos estacionários q_1 e q_2 do integrando de (6.5) são soluções da

equação:

$$p_+(q + \xi_q/2) - p_-(q - \xi_q/2) = \xi_p, \quad (6.14)$$

e são identificados como as coordenadas de posição de \mathbf{x}_1 e \mathbf{x}_2 na figura 6.3. De acordo com o resultado do apêndice A e usando a regra de quantização de Bohr-Sommerfeld (4.20), obtemos as fases

$$S_+(q_1 + \xi_q/2) - S_-(q_1 - \xi_q/2) - \xi_p q_1 = \mathcal{A}_1(\xi) + \mathbf{x}_1 \wedge \xi, \quad (6.15)$$

$$S_+(q_2 + \xi_q/2) - S_-(q_2 - \xi_q/2) - \xi_p q_2 = \mathcal{A}_2(\xi) + \mathbf{x}_2 \wedge \xi. \quad (6.16)$$

Procedemos a aplicar (6.5) na forma normal de *catástrofe de difração tipo dobra* [32]:

$$\chi(\xi) = \frac{N^2}{2\pi i \hbar} \exp\left(\frac{i\Sigma\mathcal{A}}{2\hbar}\right) \int_{-\infty}^{\infty} du g(u; \xi) e^{i\left[\frac{u^3}{3} - \zeta u\right]}, \quad (6.17)$$

onde definimos

$$\Sigma\mathcal{A} = \mathcal{A}_1 + \mathcal{A}_2, \quad \frac{2}{3}\zeta(\xi)^{\frac{3}{2}} = \frac{\mathcal{A}_{12}}{2\hbar} = \frac{\mathcal{A}_1 - \mathcal{A}_2 + \eta \wedge \xi}{2\hbar}. \quad (6.18)$$

A diferença de fase, \mathcal{A}_{12} , é o principal ingrediente na presente aplicação do método de aproximação uniforme [26, 32]. A definição geométrica de \mathcal{A}_{12} é a área que resulta da interseção da curva clássica e a sua translação por ξ , como mostra a figura 6.3. Na cáustica, a corda $\xi = \xi_D$ é maximal e sua *corda conjugada* fica [8]: $\eta \equiv \mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2 \rightarrow 0$.

A integral (6.17) define uma função de Airy [34], $\text{Ai}(\zeta)$, se $g(u; \xi) = 1$, mas aqui estamos fazendo uma transformação entre as variáveis $q \mapsto u$, respectivamente em (6.5) e (6.17), onde

$$g(u; \xi) = \left| \frac{\partial I}{\partial p}(q(u) + \xi_q/2) \frac{\partial I}{\partial p}(q(u) - \xi_q/2) \right|^{-\frac{1}{2}} \frac{dq}{du}. \quad (6.19)$$

Aproximamos agora $g(u; \xi)$ por uma função linear que coincide com ela nos pontos estacionários, $\pm\zeta^{\frac{1}{2}}$ de (6.17). Isto mapeia $q(\zeta^{\frac{1}{2}}) = \mathbf{x}_{1q} \equiv q_1$ e

$q(-\zeta^{\frac{1}{2}}) = \mathbf{x}_{2q} \equiv q_2$. O jacobiano da transformação $q \leftrightarrow u$ nos pontos estacionários é

$$\frac{dq}{du}(\zeta^{\frac{1}{2}}) = \left| \frac{2\hbar\zeta^{\frac{1}{2}}}{\frac{\partial p}{\partial q}(q_1 + \xi_q/2) - \frac{\partial p}{\partial q}(q_1 - \xi_q/2)} \right|^{\frac{1}{2}}, \quad (6.20)$$

$$\frac{dq}{du}(-\zeta^{\frac{1}{2}}) = \left| \frac{2\hbar\zeta^{\frac{1}{2}}}{\frac{\partial p}{\partial q}(q_2 + \xi_q/2) - \frac{\partial p}{\partial q}(q_2 - \xi_q/2)} \right|^{\frac{1}{2}}, \quad (6.21)$$

de modo que

$$g(\zeta^{\frac{1}{2}}; \xi) = \left| \frac{2\hbar\zeta^{\frac{1}{2}}}{\{I_1^+, I_1^-\}} \right|^{\frac{1}{2}}, \quad g(-\zeta^{\frac{1}{2}}; \xi) = \left| \frac{2\hbar\zeta^{\frac{1}{2}}}{\{I_2^+, I_2^-\}} \right|^{\frac{1}{2}}. \quad (6.22)$$

Igualmente definimos as quantidades referentes à ação transportada

$$\Delta I^{12} \equiv |\{I_1^+, I_1^-\}|^{-\frac{1}{2}} - |\{I_2^+, I_2^-\}|^{-\frac{1}{2}} \quad \text{e} \quad \Sigma I^{12} \equiv |\{I_1^+, I_1^-\}|^{-\frac{1}{2}} + |\{I_2^+, I_2^-\}|^{-\frac{1}{2}}, \quad (6.23)$$

de modo que a função g é aproximada mediante

$$g(u; \xi) \simeq \sqrt{\frac{\hbar}{2}} \left(\zeta^{\frac{1}{4}} \Sigma I^{12} + \frac{u}{\zeta^{\frac{1}{4}}} \Delta I^{12} \right). \quad (6.24)$$

Esta, além de ser linear em u , tem os valores corretos nos pontos estacionários. Assim, a integral que define a função de Cordas fica

$$\chi(\xi) = \frac{N^2}{2i\pi\sqrt{2\hbar}} e^{i\Sigma\mathcal{A}/2\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} du \left(\zeta^{\frac{1}{4}} \Sigma I^{12} + \frac{u}{\zeta^{\frac{1}{4}}} \Delta I^{12} \right) e^{i\left[\frac{u^3}{3} - \zeta u\right]} \quad (6.25)$$

$$= \frac{N^2}{i} \frac{e^{i\Sigma\mathcal{A}/2\hbar}}{\sqrt{2\hbar}} \left(\zeta^{\frac{1}{4}} \Sigma I^{12} \text{Ai}(-\zeta) - \frac{i}{\zeta^{\frac{1}{4}}} \Delta I^{12} \text{Ai}'(-\zeta) \right), \quad (6.26)$$

onde Ai' é a derivada da função de Airy. Finalmente, inserimos o valor da variável intermediária, ζ , em termos das áreas (6.18), obtendo a aproximação uniforme para a função de Cordas:

$$\chi(\xi) = N^2 \exp\left(i\frac{\Sigma\mathcal{A}}{2\hbar}\right) \left[\frac{[\frac{3}{4}\mathcal{A}_{12}]^{\frac{1}{6}} \Sigma I^{12}}{i\sqrt{2\hbar}^{\frac{2}{3}}} \text{Ai}\left(-\left[\frac{3\mathcal{A}_{12}}{4\hbar}\right]^{\frac{2}{3}}\right) - \frac{[\frac{3}{4}\mathcal{A}_{12}]^{-\frac{1}{6}} \Delta I^{12}}{\sqrt{2\hbar}^{\frac{1}{3}}} \text{Ai}'\left(-\left[\frac{3\mathcal{A}_{12}}{4\hbar}\right]^{\frac{2}{3}}\right) \right]. \quad (6.27)$$

Esta expressão tem uma forma similar ao caso da função de Wigner para cordas longas, pois esta oscila quando $\mathcal{A}_{12} \gg \hbar$ e podemos usar as formas assintóticas (5.37) e (5.51), obtendo

$$\chi(\xi) \rightarrow \frac{N^2}{i\sqrt{2\pi\hbar}} \left[\frac{\exp\left(i\left[\frac{\mathcal{A}_1}{\hbar} - \frac{\pi}{4}\right]\right)}{|\{I_1^+, I_1^-\}|^{\frac{1}{2}}} + \frac{\exp\left(i\left[\frac{\mathcal{A}_2}{\hbar} + \frac{\pi}{4}\right]\right)}{|\{I_2^+, I_2^-\}|^{\frac{1}{2}}} \right]. \quad (6.28)$$

Este resultado corresponde à soma das contribuições para cada realização da corda na aproximação semiclássica de fase estacionária, segundo (6.12).

A amplitude dessas oscilações aumentam progressivamente com $|\xi|$, até atingir um máximo antes que $\mathcal{A}_{12} \rightarrow 0$, onde acontece a cáustica. Para esta região o termo da derivada da função de Airy pode ser ignorado, como veremos na seguinte seção. Além da cáustica, a função decai exponencialmente.

6.4 Regime transicional para a função de Cordas

Dado que a aproximação uniforme da função de Cordas tem a mesma estrutura que a função de Wigner para cordas longas, em regiões vizinhas à cáustica, ela não está bem definida. De fato, temos que $\mathcal{A}_{12} \rightarrow 0$, enquanto a amplitude diverge. Uma aproximação quadrática da curva clássica fornece uma descrição adequada das vizinhanças da cáustica; assim o termo da derivada da função de Airy é cancelado naturalmente, porque igualam-se as amplitudes associadas a cada ponto estacionário.

Igualmente ao caso da função de Wigner transicional, consideramos $I(\mathbf{x})$ como um Hamiltoniano tal que o toro é uma trajetória gerada pelo seu fluxo. Notando que os centros das realizações da corda conjugada η são $\mathbf{X}^\pm \equiv \pm\xi/2$, a área simplética \mathcal{A}_{12} na figura 6.3 pode ser obtida como

$$\frac{3}{4}\mathcal{A}_{12}(\xi) = \sqrt{2} \left[\frac{[\mathcal{I} - I(\frac{\xi}{2})]^{\frac{3}{2}}}{[\dot{\mathbf{X}}^+ \mathcal{J}_{\frac{\xi}{2}} \dot{\mathbf{X}}^+]^{\frac{1}{2}}} + \frac{[\mathcal{I} - I(-\frac{\xi}{2})]^{\frac{3}{2}}}{[\dot{\mathbf{X}}^- \mathcal{J}_{-\frac{\xi}{2}} \dot{\mathbf{X}}^-]^{\frac{1}{2}}} \right], \quad (6.29)$$

onde τ_{\pm} é o ‘tempo de vôo’ entre os extremos de cada realização de η . Aqui usamos as relações (5.54) e (5.56). Por outro lado, os colchetes de Poisson da ação, presentes nas amplitudes (6.27), ficam

$$\{I_1^+, I_1^-\} = \frac{1}{2} \left[\tau_+ \dot{\mathbf{X}}^- \mathfrak{J}_{\frac{\xi}{2}} \dot{\mathbf{X}}^+ + \tau_- \dot{\mathbf{X}}^+ \mathfrak{J}_{-\frac{\xi}{2}} \dot{\mathbf{X}}^- \right] \simeq -\{I_2^+, I_2^-\}. \quad (6.30)$$

Inserindo as duas últimas equações em (6.27), temos finalmente que a função de Cordas transicional é

$$\begin{aligned} \chi(\xi) = & \frac{e^{i\Sigma\mathcal{A}/2\hbar - i\pi/2} [\tau_+^3 \dot{\mathbf{X}}^+ \mathfrak{J}_{\frac{\xi}{2}} \dot{\mathbf{X}}^+ + \tau_-^3 \dot{\mathbf{X}}^- \mathfrak{J}_{-\frac{\xi}{2}} \dot{\mathbf{X}}^-]^{\frac{1}{6}}}{\pi^{\frac{1}{3}} \hbar^{\frac{2}{3}} [\tau_+ \dot{\mathbf{X}}^- \mathfrak{J}_{\frac{\xi}{2}} \dot{\mathbf{X}}^+ + \tau_- \dot{\mathbf{X}}^+ \mathfrak{J}_{-\frac{\xi}{2}} \dot{\mathbf{X}}^-]^{\frac{1}{2}}} \\ & \times \text{Ai} \left(-2^{\frac{1}{3}} \left[\frac{[\mathcal{I} - I(\frac{\xi}{2})]^{\frac{3}{2}}}{[\dot{\mathbf{X}}^+ \mathfrak{J}_{\frac{\xi}{2}} \dot{\mathbf{X}}^+]^{\frac{1}{2}}} + \frac{[\mathcal{I} - I(-\frac{\xi}{2})]^{\frac{3}{2}}}{[\dot{\mathbf{X}}^- \mathfrak{J}_{-\frac{\xi}{2}} \dot{\mathbf{X}}^-]^{\frac{1}{2}}} \right]^{\frac{2}{3}} \right). \quad (6.31) \end{aligned}$$

Se a curva tiver simetria de reflexão com respeito à origem, as matrizes hessianas igualam-se ($\mathfrak{J}_{\frac{\xi}{2}} = \mathfrak{J}_{-\frac{\xi}{2}}$) e os vetores ‘velocidade’ ficam $\dot{\mathbf{X}}^+ = -\dot{\mathbf{X}}^-$. Novamente utilizamos a origem escolhida como o ponto médio dos pontos estacionários \mathbf{x}_1 e \mathbf{x}_2 ; assim, a função de Cordas transicional se reduz a

$$\chi(\xi) = \frac{e^{i\Sigma\mathcal{A}/2\hbar + i\pi}}{(2\pi)^{\frac{1}{3}} \hbar^{\frac{2}{3}}} [\dot{\mathbf{X}}^+ \mathfrak{J}_{\frac{\xi}{2}} \dot{\mathbf{X}}^+]^{-\frac{1}{3}} \text{Ai} \left(2 \frac{I(\frac{\xi}{2}) - \mathcal{I}}{[\dot{\mathbf{X}}^+ \mathfrak{J}_{\frac{\xi}{2}} \dot{\mathbf{X}}^+]^{\frac{1}{3}}} \right). \quad (6.32)$$

Para $\xi = \xi_D$, o argumento da função de Airy se anula, porque $I(\pm\xi_D/2) = \mathcal{I}$ e $\Sigma\mathcal{A}/2$ é a área associada a ξ_D . Vemos então que esta aproximação transicional continua finita e próxima da cáustica tem um máximo de amplitude local.

6.5 Regime de cordas longas para estados de Fock

Consideremos os estados excitados, $|n\rangle$, do oscilador harmônico unidimensional, cuja variedade clássica é uma circunferência centrada na origem,

e portanto temos simetria de reflexão. A condição de quantização (4.20) para esses círculos fornece a relação

$$2\pi I(\mathbf{x}) = \pi(p^2 + q^2) = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (6.33)$$

A função de Cordas exata é determinada por [8]

$$\chi_n(\xi) = \frac{e^{-\xi^2/4\hbar}}{2\pi\hbar} L_n \left(\frac{\xi^2}{2\hbar} \right),$$

onde L_n é o polinômio de Laguerre de ordem n . Para cordas pequenas ($\xi \ll \hbar$),

$$\chi_{\mathcal{I}}(\xi) \simeq \frac{1}{2\pi\hbar} J_0 \left(\frac{\sqrt{2\mathcal{I}}|\xi|}{\hbar} \right), \quad (6.34)$$

fornece uma boa aproximação [8]. J_0 é a função de Bessel de ordem zero. Então, usando a forma assintótica da função de Bessel para valores grandes do seu argumento [34], temos que

$$\chi_{\mathcal{I}}(\xi) \simeq \frac{(\sqrt{2\mathcal{I}}|\xi|)^{-\frac{1}{2}}}{\pi\sqrt{\hbar}} \cos \left(\frac{\sqrt{2\mathcal{I}}|\xi|}{\hbar} - \frac{3\pi}{4} \right). \quad (6.35)$$

Esse resultado pode ser comparado com o resultado fornecido pela aproximação uniforme da função de Cordas (6.28). Para isto calculamos os valores de áreas \mathcal{A}_{12} e amplitudes ΣI^{12} e ΔI^{12} avaliadas na corda ξ . Sem perda de

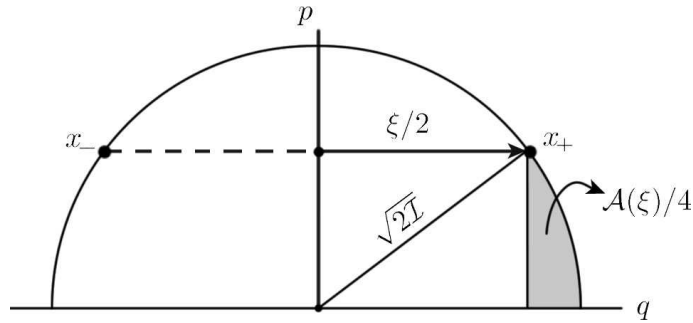


Figura 6.4: Cálculo da área $\mathcal{A}(\xi)$, para um estado de Fock. O toro corresponde a um círculo de raio $\sqrt{2\mathcal{I}}$.

generalidade, supomos que ξ é paralela ao eixo q . Assim, os centros das realizações de ξ tem coordenadas $q = 0$ e

$$p = \pm \sqrt{2\mathcal{I} - \left(\frac{\xi}{2}\right)^2}, \quad (6.36)$$

tal como ilustra a figura 6.4. A simetria permite calcular $\mathcal{A}_{12}(\xi)$, avaliando só uma integral sobre o primeiro quadrante, a saber

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{12}(\xi) &= 4 \int_{|\xi|/2}^{\sqrt{2\mathcal{I}}} dq \sqrt{2\mathcal{I} - q^2} \\ &= 2\pi\mathcal{I} - |\xi| \sqrt{2\mathcal{I} - \left(\frac{|\xi|}{2}\right)^2} - 4\mathcal{I} \arcsin\left(\frac{|\xi|/2}{\sqrt{2\mathcal{I}}}\right). \end{aligned} \quad (6.37)$$

Como o toro é simétrico com respeito a reflexões em q , temos que os colchetes de Poisson para cada realização são iguais, de forma que o termo da derivada da função de Airy se cancela. Da condição (6.33) temos que

$$I(p, q) = \frac{p^2}{2} + \frac{q^2}{2}. \quad (6.38)$$

Derivando com respeito a p e a q , obtemos

$$\frac{\partial I}{\partial p} \frac{\partial I}{\partial q} = pq = q \sqrt{2\mathcal{I} - q^2}. \quad (6.39)$$

Os extremos das realizações da corda correspondem aos pontos com coordenadas de posição $q = \pm|\xi|/2$ e de momento (6.36). Portanto a amplitude fica

$$\Sigma I^{12} = 2|\{I^+, I^-\}|^{\frac{1}{2}} = 2 \left[|\xi| \sqrt{2\mathcal{I} - \left(\frac{|\xi|}{2}\right)^2} \right]^{-\frac{1}{2}}. \quad (6.40)$$

Com isto encontramos que, para estados de Fock, a aproximação uniforme da função de Cordas perto da cáustica é

$$\chi_{\mathcal{I}}(\xi) = (-1)^n \frac{\sqrt{2}N^2 \left[\frac{3}{4}\mathcal{A}_{\mathcal{I}}(\xi)\right]^{\frac{1}{6}}}{\hbar^{\frac{2}{3}}|\xi|^{\frac{1}{2}}} \left[2\mathcal{I} - \frac{|\xi|^2}{4}\right]^{-\frac{1}{4}} \text{Ai}\left(-\left[\frac{3\mathcal{A}_{\mathcal{I}}}{4\hbar}\right]^{\frac{2}{3}}\right). \quad (6.41)$$

Agora usamos a forma assintótica da função de Airy para obter uma extrapolação no caso de cordas curtas

$$\chi_{\mathcal{I}}(\xi) = (-1)^n \frac{2N^2}{\sqrt{\hbar}} \left(\sqrt{2\mathcal{I}}|\xi| \right)^{-\frac{1}{2}} \cos \left(\frac{\mathcal{A}_{\mathcal{I}}}{2\hbar} - \frac{\pi}{4} \right). \quad (6.42)$$

Por outro lado, notando que à ordem mais baixa, o argumento $\sqrt{2\mathcal{I}}|\xi|$ da função de Bessel (6.34) é a metade da área complementar da interseção entre o círculo e a translação dele, temos pela regra de quantização que

$$\frac{\sqrt{2\mathcal{I}}|\xi|}{\hbar} - \frac{3\pi}{4} \simeq \left(\frac{\mathcal{A}_{\mathcal{I}}}{2\hbar} - \frac{\pi}{4} \right) + n\pi, \quad (6.43)$$

com n inteiro. Obtemos assim que o limite assintótico da função de Cordas para a cáustica de cordas longas reproduz a função de Cordas para estados de Fock para cordas curtas na região intermediária. Além disso, obtemos o valor da constante de normalização

$$N^2 = \frac{1}{2\pi}. \quad (6.44)$$

Esta corresponde a uma derivação alternativa desta constante à proposta por Berry [6]. Podemos inseri-la diretamente em (5.50) fora das cáusticas, onde desaparecem o par de cordas coalescentes e resulta na aproximação de fase estacionária mais simples para a função de Wigner (ver (5.16)).

6.6 Conexão Wigner-Cordas no regime de cordas longas

Tendo calculado as funções de Wigner e de Cordas para o regime de cordas longas, podemos tentar fazer uma conexão entre essas duas funções. Embora elas representem o operador densidade em espaços de fases recíprocos, existem casos onde as características delas são similares.

Primeiramente, não é possível fazer uma associação direta nas aproximações obtidas, entre a corda e o centro, pois temos várias cordas estacionárias associadas ao centro onde está avaliada a função de Wigner, tal

como o ilustra a figura 5.5, enquanto na função de Cordas, temos que a corda possui no mínimo dois centros associados, uma para cada realização da corda sobre o toro.

Por outro lado, têm-se uma conexão direta quando o toro for simétrico com relação a reflexões sobre um ponto no espaço de fases, dado que as funções de Wigner e de Cordas são proporcionais, a não ser por um fator de escala (ver (3.62)). Neste caso a função de Cordas é real. Essa similaridade pode ser vista geometricamente longe das cústicas em regiões onde a aproximação de fase estacionária é válida, pois a diferença de fase semiclássica entre as contribuições de cada ramo da ação na função é a mesma para ambas funções [8, 10]. Isto acontece porque a simetria faz com que deslocar o toro por um vetor ξ seja igual a refleti-lo com respeito ao centro \mathbf{x} da corda conjugada a ξ , como se ilustra na figura 6.5.

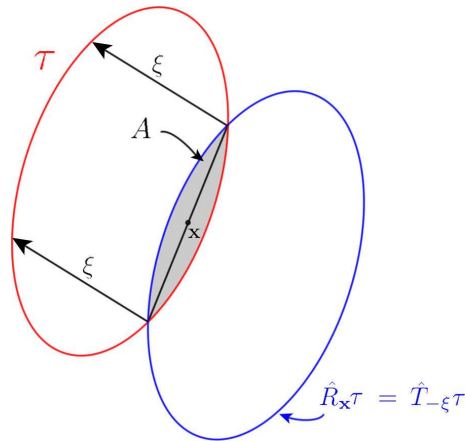


Figura 6.5: **Diferença de fase semiclássica para a função de Wigner e sua transformada de Fourier para o caso simétrico.** Neste caso refletir o toro com respeito ao ponto \mathbf{x} equivale a deslocá-lo por um vetor ξ .

Poderíamos pensar que este ponto de simetria é o resultado de fazer coalescer os pontos de cúspide do toro na catástrofe da função de Wigner, enquanto vamos deformando o toro original até que seja simétrico. Porém, esse ponto corresponde a uma catástrofe *não elementar* [31], dado que to-

pologicamente existem infinitas maneiras para romper a simetria de uma elipse [32]. Mais precisamente, existe um grupo contínuo de perturbações para quebrar a simetria do toro, podendo-se reproduzir quaisquer catástrofes estruturalmente estáveis; semelhante ao que acontece no espalhamento tipo glória (*glory scattering*), onde a simetria circular produz uma cáustica não elementar no centro daquele círculo [32].

Como vimos anteriormente, a função de Wigner na região central do toro tem três termos: a contribuição das duas cordas interagentes e uma da corda isolada, dado que esta função apresenta uma singularidade mais forte do que a função de Cordas. Por esta razão vamos excluir o termo da corda isolada para fazer uma comparação com a função de Cordas. Tomamos a parte real da função de Cordas (6.27), obtendo

$$\begin{aligned} \Re \chi(\xi) = N^2 \sin \left(\frac{\Sigma \mathcal{A}}{2\hbar} \right) \frac{[\frac{3}{4}\mathcal{A}_{12}]^{\frac{1}{6}} \Sigma I^{12}}{i\sqrt{2}\hbar^{\frac{2}{3}}} \text{Ai} \left(- \left[\frac{3\mathcal{A}_{12}}{4\hbar} \right]^{\frac{2}{3}} \right) \\ + \cos \left(\frac{\Sigma \mathcal{A}}{2\hbar} \right) \frac{[\frac{3}{4}\mathcal{A}_{12}]^{-\frac{1}{6}} \Delta I^{12}}{\sqrt{2}\hbar^{\frac{1}{3}}} \text{Ai}' \left(- \left[\frac{3\mathcal{A}_{12}}{4\hbar} \right]^{\frac{2}{3}} \right). \end{aligned} \quad (6.45)$$

Se a comparamos com a função de Wigner para cordas longas, (5.50), temos a mesma forma funcional. Embora os argumentos destas duas funções não sejam iguais, não são substancialmente diferentes. Explicitamente, as diferenças estão nas áreas simpléticas que existem entre os extremos das cordas estacionárias (Wigner) e os extremos das realizações da corda (Cordas), pois esses extremos coincidem quando avaliamos a função de Wigner (5.49) no centro do paralelogramo formado pela corda ξ e sua corda conjugada (ver figura 6.6).

As amplitudes nas aproximações semiclássicas (5.49) e (6.45) estão definidas em termos de colchetes de Poisson da função I , avaliada nos extremos das cordas estacionárias e das realizações da corda, respectivamente. Geometricamente esses colchetes de Poisson representam produtos simpléticos entre os vetores tangentes ao toro nos extremos das cordas. Esses extremos

correspondem aos vértices do paralelogramo inscrito no toro e formado por ξ e η , como ilustra a figura 6.6. No entanto, na função de Wigner, a amplitude depende desses colchetes avaliados nos vértices que estão ligados pelas diagonais do paralelogramo, enquanto na função de Cordas depende dos que estão ligados pelos lados. Explicitamente, os colchetes de Poisson nas amplitudes

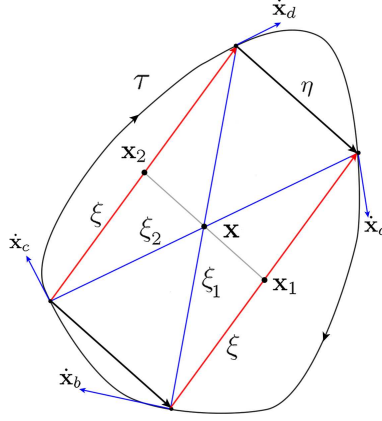


Figura 6.6: Cordas estacionárias da função de Wigner e realizações da corda ξ sobre o toro τ , quando avaliamos a função de Wigner no centro do paralelogramo formado pela corda ξ e sua conjugada η . As amplitudes na aproximação semiclássica estão definidas em termos de produtos dos vetores tangente nos vértices do paralelogramo.

para a função de Wigner e de Cordas, segundo a notação da figura 6.6, são

$$W \rightarrow \begin{cases} \{I_1^+, I_1^-\} = \dot{\mathbf{x}}_d \wedge \dot{\mathbf{x}}_b \\ \{I_2^+, I_2^-\} = \dot{\mathbf{x}}_a \wedge \dot{\mathbf{x}}_c \end{cases} \quad \chi \rightarrow \begin{cases} \{I_1^+, I_1^-\} = \dot{\mathbf{x}}_a \wedge \dot{\mathbf{x}}_b \\ \{I_2^+, I_2^-\} = \dot{\mathbf{x}}_d \wedge \dot{\mathbf{x}}_c. \end{cases} \quad (6.46)$$

Os vértices do paralelogramo podem ser expressados como funções da corda ξ e os centros das realizações dela sobre o toro, mediante

$$\mathbf{x}_a = \mathbf{x}_1 + \frac{\xi}{2}, \quad \mathbf{x}_b = \mathbf{x}_1 - \frac{\xi}{2}, \quad \mathbf{x}_c = \mathbf{x}_2 - \frac{\xi}{2}, \quad \mathbf{x}_d = \mathbf{x}_2 + \frac{\xi}{2}. \quad (6.47)$$

Para finalizar, o que podemos concluir é que alguma similaridade entre a função de Wigner e a função de Cordas está presente ainda no caso não simétrico, embora não seja uma relação direta.

Capítulo 7

Discussões e Perspectivas

Mostramos que o comportamento da função de Wigner e da função de Cordas perto da singularidade da corda maximal podem ser descritas em termos da função de Airy e sua derivada. Entretanto, embora esta última possa ser considerada desprezível para pontos que estão muito perto da cáustica, fornece uma importante contribuição no regime oscilatório das distribuições semiclássicas, também descritas com as aproximações obtidas pelo método de fase estacionária. Também podemos observar que as contribuições semiclássicas perto das cáusticas são maiores (da ordem de $\sim \hbar^{-\frac{2}{3}}$) do que nas outras regiões do espaço (da ordem de $\sim \hbar^{-\frac{1}{2}}$).

A cáustica associada aos diâmetros tem uma forma diferente no espaço de centros \mathbf{x} , onde a função de Wigner está definida, e no espaço de cordas, ξ . A primeira foi ilustrada na figura 5.4, a qual é composta por cúspides e dobras. Para o caso de cordas, visualizar a catástrofe não é evidente. Ela corresponde ao *locus* de todos os diâmetros, ξ_D , que são as cordas maximais da curva convexa. Esta cáustica é simétrica com respeito à origem das cordas e também é convexa. A hipótese de convexidade é necessária para que a catástrofe seja uma dobra, pois caso contrário, podem surgir singularidades de ordem maior. Porém, em nenhum caso, a simetria é quebrada.

O par de cáusticas em questão pode ser visto de um enfoque alterna-

tivo, como singularidades de projeção de uma superfície lagrangiana sobre o *espaço de fases duplo*, $\mathbf{X} = \mathbf{x}^- \times \mathbf{x}^+$. Esta superfície é construída como o produto cartesiano dos dois toros: o par de curvas quantizadas $I(\mathbf{x}^\pm) = \mathcal{I}$, no caso em que $L = 1$. Esta descrição alternativa no espaço de fases duplo em termos de centros $\mathbf{x} = (\mathbf{x}^+ + \mathbf{x}^-)/2$ e cordas $\xi = \xi^+ - \xi^-$ conduz a uma descrição completa [10]. Os pontos $\mathbf{X}_D = (\mathbf{x}(\xi_D), \xi_D)$ compõem a singularidade de projeção do toro duplo (o produto cartesiano) no espaço de fases duplo. Assim, o plano bidimensional tangente ao toro, está determinado completamente pelos vetores tangentes $(\mathbf{x}(\xi_D), 0)$ e $(0, \xi_D)$. Temos que levar em consideração que a variável canônica ao centro \mathbf{x} no espaço de fases duplo é $\mathbf{y} = \mathbf{J}\xi$ e não a corda ξ , como é mostrado em [10], mas este detalhe não muda substancialmente a presente discussão.

Agora resumimos o comportamento da função de Cordas para qualquer translação: *a)* um máximo na origem; *b)* um regime oscilatório, obtido como uma superposição de termos aproximáveis por fase estacionária para cada realização da corda; *c)* uma região perto da corda máxima, o diâmetro ξ_D , expresso em termos de funções de Airy e suas derivadas, onde a amplitude é novamente maximal e finalmente *d)* uma região evanescente, onde decai exponencialmente para cordas com comprimento maior do que os diâmetros, mas ainda descrito por funções de Airy.

Neste trabalho consideramos unicamente estados puros, para os quais a correlação no espaço de fases (1.1), isto é, a correlação entre o estado $\hat{\rho}$ e suas possíveis translações, está determinado pelo módulo quadrado da função de Cordas. Logo, usando a forma assintótica da aproximação uniforme da função de Cordas no regime semiclassico, podemos encontrar que a correlação no espaço de fases, na região oscilatória longe da cáustica, é aproximadamente

$$C_\xi = \frac{1}{\hbar} \left[\{I_1^+, I_1^-\}^{-1} + \{I_2^+, I_2^-\}^{-1} + 2\{I_1^+, I_1^-\}^{-\frac{1}{2}} \{I_2^+, I_2^-\}^{-\frac{1}{2}} \sin \left(\frac{\mathcal{A}_{12}}{\hbar} \right) \right], \quad (7.1)$$

ou seja, um par de termos clássicos associados a cada realização da corda e

um termo que representa a interferência entre eles. Esta fórmula corrige a fase da forma semiclássica da correlação no espaço de fases apresentada em [8], mas também permite a interpretação para a invariância da correlação com respeito à transformada de Fourier. O ponto importante é que o alcance máximo das correlações no espaço de fases (inclusive para as correlações da função de Wigner) na vizinhança de um diâmetro da curva quantizada é simplesmente $C_\xi = |\chi(\xi)|^2$ na forma dada por (6.32).

Fica em aberto o estudo da catástrofe de Cordas curtas para a função de Cordas, pois ela é uma catástrofe de ordem maior.

Apêndice A

Cordas cruzadas

A fase do integrando na expressão (5.24) para a função de Wigner, avaliada no ponto $\mathbf{x} = (p, q)$, é

$$\hbar F(Q; \mathbf{x}) = S_+(q + Q/2, I) - S_-(q - Q/2) - pQ, \quad (\text{A.1})$$

sendo $S_i = S_+$ e $S_j = S_-$. Sejam q_0 e q_1 os pontos de retorno sobre a curva fechada, $q_0 < q_1$. Escolhendo o eixo q de maneira a incluir q_0 , de acordo com a Figura A.1, a fase estacionária resulta

$$S_+(q + \xi_q/2) = \int_{q_0}^{q + \xi_q/2} p_+(Q) dQ = a_1, \quad (\text{A.2})$$

$$S_-(q - \xi_q/2) = \int_{q_0}^{q_1} p_+(Q) dQ + \int_{q_1}^{q - \xi_q/2} p_-(Q) dQ = a_1 + a_2 + a_4. \quad (\text{A.3})$$

A corda estacionária ξ foi assumida como *cruzada*, de modo que seus extremos pertencem a diferentes ramos da ação. Então, a fase será

$$\hbar F(\xi_q; \mathbf{x}) = a_1 - [a_1 + a_2 + a_4] - p\xi_q = -[a_2 + a_4] - p\xi_q = a - \oint pdq. \quad (\text{A.4})$$

Definindo $A(\mathbf{x})$ como a área entre a corda estacionária e a curva fechada, temos que

$$\hbar F(\xi_q; \mathbf{x}) = A(\mathbf{x}) - \oint pdq = A(\mathbf{x}) - 2\pi \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (\text{A.5})$$

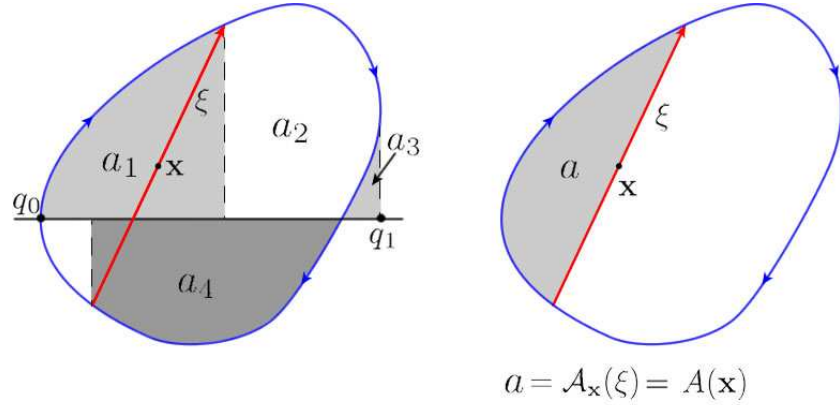


Figura A.1: Diferença de fase entre os pontos estacionários para a função de Wigner, avaliada no ponto $\mathbf{x} = (p, q)$, tal que os extremos da sua corda, $\xi = (\xi_p, \xi_q)$, ligam os dois ramos da função WKB. A área sombreada é $a = S_+(q + \xi_q/2) - S_-(q - \xi_q/2) - p\xi_q$,

pela quantização da curva sob a condição de Bohr-Sommerfeld (4.20).

Por outro lado, a fase no integrando em (6.5), que define a função de Cordas para a mesma geometria será

$$\hbar F_\chi(Q, \xi) = S_+(Q + \xi_q/2) - S_-(Q - \xi_q/2) - \xi_p Q. \quad (\text{A.6})$$

Os pontos estacionários são coordenadas de posição q , mas sua interpretação geométrica fornece uma coordenada de momento p (como é discutido no capítulo 6). Novamente, denotamos por $\mathbf{x} = (p, q)$, assim a fase estacionária F_χ depende de \mathbf{x} em vez de q . Escolhendo o eixo q da mesma forma que para a fase de Wigner, obtemos

$$\hbar F_\chi(\mathbf{x}, \xi) = S_+(q + \xi_q/2) - S_-(q - \xi_q/2) - p\xi_q + p\xi_q - \xi_p q, \quad (\text{A.7})$$

$$= S_+(q + \xi_q/2) - S_-(q - \xi_q/2) - p\xi_q + \mathbf{x} \wedge \xi. \quad (\text{A.8})$$

Definindo $\mathcal{A}_\mathbf{x}(\xi)$ como a área simplética entre a curva e a realização de ξ , centrada em \mathbf{x} , como na Figura A.1, temos que

$$\hbar F_\chi(\mathbf{x}, \xi) = \mathcal{A}_\mathbf{x}(\xi) + \mathbf{x} \wedge \xi - 2\pi \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (\text{A.9})$$

Para implementar as aproximações assintóticas, podemos ignorar o termo adicional $\oint pdq$, por causa da condição de quantização (4.20). Devemos reiterar que a condição de quantização do toro implica que as áreas $A(\mathbf{x})$ e $\mathcal{A}_{\mathbf{x}}(\xi)$, e suas respectivas áreas complementares $A'(\mathbf{x})$ e $\mathcal{A}'_{\mathbf{x}}(\xi)$, satisfazem

$$A(\mathbf{x}) + A'(\mathbf{x}) = \mathcal{A}_{\mathbf{x}}(\xi) + \mathcal{A}'_{\mathbf{x}}(\xi) = \oint pdq = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (\text{A.10})$$

Apêndice B

Função de centro para tempos curtos

Consideremos um sistema governado pelo fluxo Hamiltoniano gerado por $H(\mathbf{x})$. Supomos que o Hamiltoniano é localmente quadrático,

$$H(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\mathbf{x} \mathcal{H}_{\mathbf{x}} \mathbf{x} + \dots, \quad (\text{B.1})$$

onde

$$\mathcal{H}_{\mathbf{x}} = \frac{\partial^2 H(\mathbf{x})}{\partial \mathbf{x}^2} \quad (\text{B.2})$$

é a matriz hessiana no ponto \mathbf{x} . Sejam \mathbf{x}_+ e \mathbf{x}_- dois pontos sobre a trajetória definida por $H(\mathbf{x}) = E$. Se o tempo τ que separa esses pontos for curto, temos a evolução linear

$$\mathbf{x}_+ = \mathcal{M}_\tau \mathbf{x}_-, \quad (\text{B.3})$$

onde

$$\mathcal{M}_\tau = e^{\tau \mathbf{J} \mathcal{H}_{\mathbf{x}}} = 1 + \tau \mathbf{J} \mathcal{H}_{\mathbf{x}} + \frac{1}{2} \tau^2 (\mathbf{J} \mathcal{H}_{\mathbf{x}})^2 + \frac{1}{3} \tau^3 (\mathbf{J} \mathcal{H}_{\mathbf{x}})^3 + \dots \quad (\text{B.4})$$

Esta expressão vem da solução das equações de Hamilton

$$\dot{\mathbf{x}} = \mathbf{J} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{x}} \simeq \mathbf{J} \mathcal{H}_{\mathbf{x}} \mathbf{x}. \quad (\text{B.5})$$

A função geratriz de (B.3) pode ser encontrada mediante

$$-\mathbf{J} \frac{\partial S_\tau}{\partial \mathbf{x}} = -2\mathbf{J}\mathcal{A}_\tau \mathbf{x} = 2(1 + \mathcal{M}_\tau)^{-1}(1 - \mathcal{M}_\tau)\mathbf{x}, \quad (\text{B.6})$$

onde \mathcal{A}_τ é a matriz da parametrização de Cayley para a matriz \mathcal{M}_τ , a qual satisfaz até terceira ordem em τ :

$$\mathcal{M}_\tau = (1 - \mathbf{J}\mathcal{A}_\tau)(1 + \mathbf{J}\mathcal{A}_\tau)^{-1} \simeq 1 - 2\mathcal{A}_\tau + 2(\mathbf{J}\mathcal{A}_\tau)^2 - 2(\mathbf{J}\mathcal{A}_\tau)^3 + \dots \quad (\text{B.7})$$

Assim encontramos que

$$\mathcal{A}_\tau = -\frac{1}{2}\tau \mathbf{J}\mathcal{H}_\mathbf{x} + \frac{1}{24}\tau^3 (\mathbf{J}\mathcal{H}_\mathbf{x})^3 + \dots \quad (\text{B.8})$$

e portanto,

$$S_\tau(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}\tau \mathbf{x} \mathcal{H}_\mathbf{x} \mathbf{x} - \frac{1}{24}\tau^3 \mathbf{x} (\mathbf{J}\mathcal{H}_\mathbf{x})^3 \mathbf{x}. \quad (\text{B.9})$$

Usando (B.5), temos que

$$S_\tau(\mathbf{x}) = -\frac{1}{2}\tau H(\mathbf{x}) - \frac{1}{24}\tau^3 \dot{\mathbf{x}} \mathcal{H}_\mathbf{x} \dot{\mathbf{x}}. \quad (\text{B.10})$$

Para expressar S_τ em termos da energia associada à curva clássica, notamos que

$$E = H(\mathbf{x}_\pm) \simeq H(\mathbf{x} \pm t \dot{\mathbf{x}}/2) = H(\mathbf{x}) + \frac{1}{2} \left(\frac{t}{2} \right) \dot{\mathbf{x}} \mathcal{H}_\mathbf{x} \dot{\mathbf{x}} \quad (\text{B.11})$$

à ordem mais baixa no tempo. Daí se segue que

$$S_\tau(\mathbf{x}) = -tE(t) + \frac{1}{12}\tau^3 \dot{\mathbf{x}} \mathcal{H}_\mathbf{x} \dot{\mathbf{x}}, \quad (\text{B.12})$$

e finalmente

$$S_E(\mathbf{x}) = \frac{1}{12}\tau^3 \dot{\mathbf{x}} \mathcal{H}_\mathbf{x} \dot{\mathbf{x}}. \quad (\text{B.13})$$

Este resultado é usado nas aproximações transicionais para as funções de Wigner e de Cordas, considerando a ação $I(\mathbf{x})$ como o Hamiltoniano do sistema. A existência deste é garantido porque o sistema é integrável e existe a transformação canônica para variáveis de ângulo-ação.

Bibliografia

- [1] Arnold V I, *Mathematical Methods of Classical Mechanics* (New York: Springer) (1978)
- [2] Goldstein H, *Classical Mechanics* (MA: Addison-Wesley) (1980)
- [3] Messiah A, *Quantum Mechanics* (Amsterdam: North Holland) (1972)
- [4] Lee H W, *Physics Reports*, **259**, 47 - 211 (1995)
- [5] Wigner E P *Phys. Rev.* **40** 749 (1932)
- [6] Berry M V, *Phil. Trans. R. Soc. Lond.* **287**, 30 (1977)
- [7] Leonhardt U, *Measuring the Quantum State of Light* (Cambridge: Cambridge University Press) (1997)
- [8] Ozorio de Almeida A M , Vallejos R O and Saraceno M, *J. Phys. A: Math. Gen.*, **35**, 1473-1490 (2005)
- [9] Zambrano E e Ozorio de Almeida A M, *Nonlinearity*, **21**, 783 - 802 (2008)
- [10] Ozorio de Almeida A M, *Entanglement in phase space, eprint arXiv:quant-ph/0612029* (2006) (To be published in *Theoretical Foundations of Quantum Information*, edited by Buchleitner A and Viviescas C (Lecture Notes in Physics:Springer, Berlin))

-
- [11] Chountasis S and Vourdas A *Phys. Rev. A.* **50** 3, pp 1794 (1998)
- [12] Van Vleck J H, *Proc. Math. Acad. Sci. U.S.A* **14**, 178 - 188 (1928)
- [13] Maslov V P and Fedoriuk M V *Semiclassical Approximation in Quantum Mechanics*(Reidel, Dordrecht) (1981) (translated from original russian edition, 1965).
- [14] Ozorio de Almeida A M, *Hamiltonian Systems: Chaos and Quantization* (Cambridge: Cambridge University Press)
- [15] Gutzwiller M, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics* (Springer, New York) (1990)
- [16] Grönewold H J, *Physica*, **12**, 405 (1946)
- [17] Heading J, *An introduction to phase-integral methods* (New York: John Wiley and Sons Inc.) (1962)
- [18] Jeffreys H e Jeffreys B, *Methods of Mathematical Physics* (Cambridge, Mass) (1956)
- [19] Dingle R B, *Asymptotic Expansions: Their derivation and interpretation* (Academic Press: London) (1973)
- [20] Wentzel G, *Zeit. f. Phys.* **38**, 518 (1926), Kramers H A, *Zeit. f. Phys.* **39**, 828 - 840 (1926), Brillouin L, *J. Phys. Radium* **7**, 353 - 368 (1926)
- [21] Jeffreys H, *Proc. Lond. Math. Soc.* **23**, (2), 428 - 436 (1923)
- [22] Liouville J, *J. Math. Pures Appl.* **2**, 16 - 35 (1837)
- [23] Green G *Trans. Camb. Phil. Soc.* **6**, 457-462. (1837)
- [24] Rayleigh L, *Proc. Roy. Soc. A*, **86**, 207 - 226 (1912)

-
- [25] Bailey V A, *Sci. Report No. 67, Ionospheric Research Lab, Pennsylvania State University* (1954)
- [26] Chester C, Friedman B and Ursell F, *Proc. Camb. Phil. Soc. Math. Phys. Sci.* **53**, 599 (1957)
- [27] Connor N L, *Molecular Physics* Vol. 27, **4**, 853-866 (1974)
- [28] Haake F, *Quantum signatures of chaos* (Springer) (2001)
- [29] Ozorio de Almeida A M, *Phys. Rep.* **295** 265 (1998)
- [30] Royer A *Phys. Rev. A* **15** 449 (1977)
- [31] Thom R, *Structural Stability and morphogenesis* (Reading, Mass: Benjamin) (1975)
- [32] Berry M V, *Adv. in Phys.* **25** 1, 1-26 (1976)
- [33] Berry M V, *Proc. Soc. Roy.* **A423** 219 - 231 (1989)
- [34] Abramowitz M e Stegun I, *Handbook of Mathematical Functions* (New York: Dover) (1964)
- [35] Littlejohn R G in Casati G and Chirikov B (Eds.), *Quantum Chaos* (Cambridge: Cambridge University Press) p. 343 (1995)
- [36] Littlejohn R G, *J. Stat. Phys.*, **68**, 1, p. 7 - 50 (1992)
- [37] Reif F, *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*. (Singapore: McGraw-Hill Int. Ed.) (1985)
- [38] Arnold V I, Givental A B in Arnold V I Novikov S P (Eds.), *Dynamical systems IV, Encyclopedia of Mathematical Sciences IV* (Berlin: Springer) (1990)
- [39] Bertrand J e Bertrand P, *Foundations of Physics* **17** 4, 387 (1987)

“Estas vísperas son las de después”

J. Sabina