

SUSCEPTIBILIDADE MAGNÉTICA EM BILHARES

Murilo Louzeiro Tiago ✓

orientador: Prof. Dr. Marcus A. M.
de Aguiar

Universidade Estadual de Campinas

Este exemplar corresponde à redação final da tese de
Mestrado defendida pelo aluno Murilo Louzeiro Tiago e
aprovada pela comissão julgadora.



4/8/98

Dissertação de Mestrado

**BILHARES QUÂNTICOS COMO
UM MODELO PARA UM GÁS
MESOSCÓPICO MAGNETIZADO**

Murilo Louzeiro Tiago

orientador: Prof. Dr. Marcus A. M.
de Aguiar

DFESCM - Instituto de Física "Gleb Wataghin"

Universidade Estadual de Campinas

Tese apresentada ao IFGW para a obtenção do Grau de Mestre em Física
em 3 de agosto de 1998

Instituto de Física "Gleb Wataghin"

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

Secretaria de Pós-Graduação

CAIXA POSTAL 6165

CEP 13083-970 – Campinas-SP - Brasil

Tel: (019) 788-5305

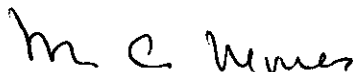
Fax: (019) 289-2424

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA TESE DE MESTRADO DE MURILO LOUZEIRO TIAGO APRESENTADA E APROVADA AO INSTITUTO DE FÍSICA "GLEB WATAGHIN", DA UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS, EM 03/08/98.

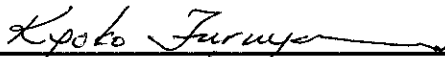
COMISSÃO JULGADORA:



Prof. Dr. Marcus Aloiizio Martinez de Aguiar (Orientador do Candidato) - IFGW/UNICAMP



Profa. Dra. Maria Carolina Nemes – IF/UFMG



Profa. Dra. Kyoko Furuya – IFGW/UNICAMP

Agradecimentos

Gostaria de agradecer ao Marcus de Aguiar, professor, orientador e amigo, por sua presença compreensiva e iluminadora, e por sempre me permitir caminhar pelos meus próprios pés. Também agradeço à Prof. Kyoko Furuya, à Maisa e ao Túlio pelas discussões e pelas contribuições que deram a esse trabalho. Agradeço aos demais professores desse instituto pela dedicação incessante e apaixonada, que me serve como exemplo. Agradeço aos funcionários, pelo trabalho atencioso e gentil. Agradeço à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) pelo apoio financeiro que possibilitou a realização desse trabalho.

Agradeço aos meus colegas do grupo de Caos, especialmente ao Luís, pela companhia e amizade compartilhadas ao longo desses anos de trabalho. Agradeço aos colegas de graduação, com quem tenho convivido desde 1992 e com os quais aprendi muito e, se não aprendi mais, foi por limitação própria. Agradeço ao Rogério, pelas discussões sobre as incertezas do futuro, e sobre o próprio futuro!

Agradeço a meus irmãos e familiares, pelo apoio que me deram durante todo esse tempo e por compreenderem minhas longas ausências. E, finalmente, agradeço a meus pais, Maria Elsa e José Tiago, pelo amor com que me criaram, pela auto-confiança que souberam despertar em mim, e por sempre terem me estimulado a seguir meu caminho com perseverança e dedicação.

Sumário

Introdução	10
1 Funções de Green	14
1.1 Propriedades da função de Green	15
1.2 Como obter a função de Green	18
2 O método de integração de fronteira	22
2.1 O que são bilhares	22
2.2 Transformando uma equação diferencial em integral	24
2.3 Dois casos simples: o bilhar circular e o bilhar anel concêntrico	27
2.4 O problema específico: o bilhar elíptico	29
2.5 Resultados numéricos: os níveis de energia do bilhar elíptico .	35
3 Um Gás de elétrons em campo magnético	38
3.1 Termodinâmica de um gás de elétrons: ensemble grand-canônico	38
3.2 Susceptibilidade de Landau	40
3.3 Correções de fronteira na susceptibilidade de Landau	41
3.4 Gás de elétrons: ensemble canônico	46
4 Susceptibilidade Média: o Modelo Semiclássico	49
4.1 Densidade oscilatória de níveis	50
4.2 Densidade oscilatória de níveis para o bilhar circular	52
4.3 Densidade oscilatória para o bilhar elíptico	56
4.3.1 Órbitas periódicas das famílias r	58
4.3.2 Órbitas periódicas das famílias o	60
4.4 Propriedades termodinâmicas	63

5	Resultados numéricos <i>versus</i> previsão analítica	67
5.1	Susceptibilidade para um bilhar circular isolado	68
5.2	Médias em ensemble de bilhares e o teste experimental	72
5.3	O bilhar elíptico	78
Conclusões		82
A	Função de Green para bilhares com campo magnético	84
A.1	Função de Green para campo magnético finito	84
A.2	Limite de campo magnético nulo na função de Green	87
A.3	Função de Green para campo magnético perturbativo	88
B	Expansão assintótica da Função Espectral	90

Lista de Figuras

2.1	Primeiros níveis de energia do bilhar elíptico, simetria par . . .	34
2.2	Autofunções de energia do bilhar elíptico	35
2.3	Primeiros níveis de energia do bilhar circular, simetria par . . .	36
3.1	Susceptibilidade grand-canônica: a correção de perímetro . . .	46
4.1	Famílias de órbitas do bilhar circular	54
4.2	Sistema de coordenadas elípticas cilíndricas	57
4.3	Razão entre frequências para o bilhar elíptico	59
4.4	Famílias de órbitas rotacionais do bilhar elíptico	61
4.5	Famílias de órbitas vibracionais do bilhar elíptico	62
4.6	Função de temperatura, $R_T(L)$	66
5.1	Susceptibilidade de um bilhar circular isolado	69
5.2	Comparação entre as curvas de susceptibilidade quântica e semiclássica para o bilhar circular, temperatura alta	70
5.3	Comparação entre as curvas de susceptibilidade quântica e semiclássica para o bilhar circular, temperatura baixa	71
5.4	Convergência na curva de susceptibilidade semiclássica, bilhar circular	72
5.5	Susceptibilidade média para um ensemble com dispersão em número de partículas	76
5.6	Susceptibilidade média para um ensemble de bilhares com dis- persão em tamanho	77
5.7	Susceptibilidade para um bilhar elíptico isolado	78
5.8	Comparação entre as curvas de susceptibilidade semiclássica e quântica para um bilhar elíptico, temperatura alta	80

5.9	Comparação entre as curvas de susceptibilidade semiclássica e quântica para um bilhar elíptico, temperatura baixa	81
-----	---	----

Resumo

Ultimamente, o interesse por sistemas mesoscópicos tem crescido bastante, tanto pela existência de teorias refinadas, capazes de modelar tais sistemas, quanto pelos recentes avanços experimentais que tornaram possível o teste laboratorial das principais previsões teóricas. Inicialmente, a motivação para se desenvolver a teoria de órbitas periódicas foi entender como os efeitos de ergodicidade e comportamento classicamente caótico se manifestam a nível quântico. Nesse sentido, uma classe importante de sistemas estudados foi a de bilhares quânticos, aplicados posteriormente na modelagem de sistemas mesoscópicos. Essa dissertação tem duas partes principais: na primeira, expomos o modelo de bilhares e como resolver a equação de autovalores de energia; na segunda, modelamos um gás mesoscópico magnetizado por um bilhar quântico. Nessa ocasião, explicitamos a relação entre as propriedades termodinâmicas do gás e as propriedades semiclássicas do bilhar. Também são discutidas as principais características da resposta do gás à aplicação de um campo magnético externo, bem como a relação entre estas e a informação experimental disponível.

Summary

During the last years, mesoscopic systems have been attracting much interest in Theoretical Physics, due to the implementation of important theories in this field such as the semiclassical theory of periodic, classical, orbits. The recent progresses in experimental techniques, in semiconductor materials, showed that the manipulation of real systems with as few trapped electrons as some hundreds or thousands is feasible. But the theory of periodic orbits was proposed originally to explain how the effects of ergodicity and classical chaos are detected in the quantum world, if they can be detected. To this aim, quantum billiards were a class of important systems of study, because they are simple and their classical dynamics may or may not show chaos, depending on their properties. This dissertation will discuss initially the system of study: a quantum billiard in an external magnetic field, and the numerical-analytic methods useful to calculate their eigenfunctions and eigenenergies, mainly using Green's Function techniques. The model of a magnetized electron gas enclosed in such a billiard will be discussed in the second part, where we will relate the main features of its magnetic susceptibility and the classical information: periodic orbits. Some important properties of the magnetic susceptibility, theoretical and experimental, will be explained at the end.

Introdução

Durante muito tempo, a Física de muitas partículas permaneceu restrita a dois domínios distantes entre si: o domínio de sistemas com poucas partículas e o domínio de sistemas com muitas partículas. Do primeiro domínio, existem exemplos clássicos como a Mecânica Celeste e o problema restrito de três corpos de Poincaré, que chamou a atenção para a imensa riqueza de fenômenos que existe em sistemas não-integráveis. O segundo domínio é bem representado pelos modelos iniciais de matéria condensada, em que o número de partículas envolvidas é algo tão grande quanto 10^{23} . Entre esses dois domínios, a Física de sistemas mesoscópicos tem atraído interesse crescente. Novos e inesperados fenômenos, intrínsecos a essa classe de sistemas, têm aparecido, como a descoberta do efeito Hall quantizado [1]. Paralelamente, foram desenvolvidas teorias que levam em conta o pequeno número de partículas envolvidas, tipicamente de algumas centenas a milhares delas.

Os recentes progressos em caologia quântica e na chamada Física Semiclássica têm permitido o aparecimento de modelos capazes de descrever propriedades de sistemas mesoscópicos. O desenvolvimento de técnicas de quantização semiclassical com os trabalhos de Gutzwiller [2], Berry e Tabor [3] e outros, permitiram o estudo das propriedades de sistemas em que o número de partículas confinadas não é suficientemente grande para justificar as aproximações usuais de matéria condensada, que ignoram efeitos de superfície sobre as propriedades de volume, *bulk properties*.

Um dos modelos teóricos mais utilizados para o estudo de Caos Clássico e Quântico é o de Bilhares, onde uma partícula move-se livremente dentro de uma região plana delimitada por paredes rígidas, onde o potencial vai a infinito. A dinâmica clássica desses sistemas é bastante simples: dentro do bilhar o movimento é ao longo de retas, com reflexões especulares na

fronteira, de forma que a natureza do problema clássico, caótico ou regular, depende exclusivamente da forma da fronteira. Se aplicamos à partícula um campo magnético constante na direção perpendicular ao plano do bilhar, a diferença que aparece é que as linhas retas são substituídas por arcos de círculo [4]. Do ponto de vista clássico pouco muda se o campo aplicado for fraco. No entanto, para campos mais altos, passam a existir órbitas que não mais colidem com a fronteira, além de uma série complicada de bifurcações que se desencadeia. O problema quântico, de cálculo de autovalores, também pode ser reduzido à uma integral na fronteira do bilhar usando-se a fórmula de Green.

Avanços recentes nas técnicas experimentais de litografia em heteroestruturas permitiram a fabricação de estruturas bidimensionais confinantes, com dimensões da ordem de um micron ou menores [5]. Experimentalmente, é possível reduzir ao mínimo os efeitos de interação elétron-elétron e elétron-rede, de forma que o regime seja realmente de elétrons balísticos em um sistema "limpo", livre de impurezas. Além disso, a espessura da estrutura pode ser feita bem pequena, transformando o sistema em um gás quase bidimensional e mesoscópico. Isso permitiu o teste laboratorial das teorias existentes envolvendo bilhares e estimulou o surgimento de novas teorias capazes de explicar o resultado dos experimentos realizados.

O experimento de Lévy *et al.* consistiu na montagem de dois conjuntos de quadrados de Ga-As. Cada quadrado continha um número pequeno de elétrons confinados (aproximadamente 2×10^4 na amostra S1 e 6×10^4 na amostra S2). Com heteroestruturas suficientemente limpas de impurezas, o livre caminho médio e o comprimento de coerência dos elétrons foi estimado da ordem de dezenas de microns, bem maior que o lado do quadrado. Isso permite considerar essencialmente balístico o movimento dos elétrons. As dispersões no tamanho (lado do quadrado) foram bastante grandes, estimadas em cerca de 30% para a amostra S1 e 10% para a amostra S2, com a densidade eletrônica conhecida com razoável precisão.

Originalmente, esse experimento teria se destinado a medir a susceptibilidade orbital, de Landau, mas a observação experimental mostrou um resultado diferente: a susceptibilidade medida a campo magnético nulo mostrou-se paramagnética e maior que a de Landau por um fator da ordem de $k_f L \cong 100$ (k_f : número de onda de Fermi, L : lado do quadrado). Aumentando gradativamente o campo externo, esse valor decresceu em uma escala de variação de campo correspondente a um quantum de fluxo magnético

através de cada quadrado. Essa resposta magnética também se mostrou dependente da temperatura, embora a susceptibilidade tenha diminuído pouco para um acréscimo em $k_B T$ da ordem de várias vezes o espaçamento médio entre níveis.

Embora já houvesse estudos envolvendo a susceptibilidade em um sistema isolado [6], nada semelhante havia envolvendo ensembles de sistemas. A resposta magnética elevada em campo nulo era um fenômeno inesperado, mas podia ser explicado teoricamente, por Termodinâmica de primeiros princípios. Trabalhos posteriores [7, 8] esclareceram pontos cruciais do experimento.

Nesse contexto, o nosso trabalho contribui com a proposta de um método para a resolução de bilhares quânticos. Veremos que esse método tem se mostrado útil para se calcular o espectro de autoenergias de uma partícula presa em um bilhar [9]. De fato, existem muitos métodos numéricos eficientes para bilhares sem campo magnético [10, 11, 3, 12], mas nem todos funcionam tão bem em um bilhar magnetizado. Métodos baseados em funções de Green já existem há bastante tempo. De fato, funções de Green apareceram exatamente como um auxílio na solução dos problemas de potencial eletrostático. A importância delas como ferramenta matemática reside na extrema simplicidade com que resolvem problemas de equações diferenciais parciais com condições de contorno conhecidas [13, 14, 15]. A importância de se resolver bilhares quânticos é que podemos então testar diretamente a validade das teorias semiclássicas.

O teste numérico desse método foi feito em um bilhar de fronteira elíptica. Essa escolha não foi casual: o bilhar de fronteira elíptica é integrável na ausência de campo magnético (ou seja, o número de constantes de movimento é igual ao número de graus de liberdade, dois). A introdução de um campo magnético externo quebra a integrabilidade original. Em comparação, um bilhar de fronteira circular é integrável em campo nulo e permanece assim mesmo para qualquer valor de campo magnético.

O mesmo tipo de bilhar será usado em seguida para estudar as propriedades magnéticas de um gás de partículas não interagentes aprisionadas no bilhar. Em outras palavras, o sistema de estudo será um gás bidimensional de elétrons não-interagentes. Estaremos interessados principalmente em verificar como se comporta a susceptibilidade magnética do gás quando são alterados parâmetros como temperatura, intensidade do campo externo e número de partículas dentro do bilhar.

Nessa última etapa do trabalho, procuraremos conectar os nossos resultados com as previsões teóricas [8] e os resultados experimentais existentes [5]. O tratamento de órbitas periódicas, bastante útil quando se procura informação semiclássica do problema, será usado nessa etapa.

Esta dissertação está dividida em cinco capítulos. Inicialmente, faremos uma breve exposição das principais propriedades de funções de Green. Essa exposição não pretende estabelecer novas idéias e nem servir como um compêndio completo sobre o assunto, mas introduzirá alguns elementos básicos que serão retomados nos capítulos seguintes. No capítulo 2, introduziremos o método de integração de fronteira, com algumas aplicações em bilhares de geometria simples. Uma aplicação não-trivial desse método é no bilhar elíptico em campo magnético. No capítulo 3, exporemos um resumo da termodinâmica envolvida no gás bidimensional, com alguns comentários sobre o modelo de Landau. O capítulo 4 é dedicado à análise semiclássica do sistema de estudo, estabelecendo a ligação entre a susceptibilidade magnética do gás e as órbitas periódicas do problema clássico associado. A densidade oscilatória de níveis, semiclássica, servirá como ponte entre esses dois elementos. O capítulo 5 é dedicado aos resultados numéricos do gás de elétrons, confrontados com a informação experimental disponível. Ao final, exporemos algumas conclusões e comentários. Para tornar menos cansativa a leitura dessa dissertação, alguns detalhes matemáticos foram separados em apêndices.

Capítulo 1

Funções de Green

Nesse capítulo, discutiremos as propriedades e possíveis métodos de se obter a função de Green, G . Esse material é apresentado de forma bastante introdutória, sem pretensão de acrescentar novidades em um tema já tão esmiuçado. Nosso interesse é citar alguns aspectos da teoria, que serão importantes nos capítulos 2 e 3. Para os que se interessarem por discussões mais profundas, sugerimos fontes especializadas [13, 14].

A introdução de uma função de Green aparece naturalmente quando, dado o operador Hamiltoniano de uma partícula, desejamos obter informações sobre autovalores e autofunções de energia do sistema. Dados um estado inicial $|\mathbf{r}'\rangle$ e um estado final $|\mathbf{r}\rangle$, definimos o *propagador*, ou função de propagação, como

$$K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) = \begin{cases} \langle \mathbf{r} | e^{-\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} | \mathbf{r}' \rangle & t > 0 \\ 0 & t < 0. \end{cases} \quad (1.1)$$

A *função de Green* é definida agora como a transformada de Fourier de K :

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; t) e^{\frac{iEt}{\hbar}} dt. \quad (1.2)$$

Como o nosso interesse são sistemas quânticos com análogo clássico (em especial bilhares), não vamos incluir termos dependentes de spin no Hamiltoniano. Caso houvesse tais termos, o propagador e a função de Green deveriam depender de índices discretos de spin, além dos índices de posição \mathbf{r} e \mathbf{r}' .

Em termos de autoenergias E_n e autofunções correspondentes, obtém-se uma expressão alternativa:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varphi_n(\mathbf{r}) \varphi_n^*(\mathbf{r}')}{E - E_n + i\eta} \quad (1.3)$$

onde o parâmetro η é introduzido para forçar a convergência da integral (1.2) no limite superior. Como esse parâmetro tem implicações mais profundas, voltaremos a discuti-lo posteriormente. A equação (1.3) também pode ser uma definição alternativa para G , pois é análoga à (1.2). Uma terceira definição, mais usual, é a partir do par de equações diferenciais:

$$\begin{cases} [E - \hat{H}(\mathbf{r})] G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ [E - \hat{H}^*(\mathbf{r}')] G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \end{cases} \quad (1.4)$$

onde $\hat{H}^*(\mathbf{r})$ é o complexo conjugado do operador Hamiltoniano. Em sistemas com simetria de inversão temporal, não há diferença entre \hat{H} e \hat{H}^* . As condições de contorno para essas equações são as mesmas das autofunções. Para potenciais suaves, G deve ser limitada quando $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow \infty$. Para potenciais do tipo barreira-infinita (bilhares e sistemas finitos), G deve ser nula para pontos \mathbf{r} ou \mathbf{r}' inacessíveis à partícula. As eq. (1.4) evidenciam uma característica fundamental dessa função: ela atua como uma função "inversa" ao operador $(E - \hat{H})$, se interpretarmos essas equações como o produto de dois operadores resultando no operador identidade. De fato, a eq. (1.3) pode ser escrita na forma simbólica:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \langle \mathbf{r} | \frac{1}{E - \hat{H}} | \mathbf{r}' \rangle ,$$

o que sugere a definição de um operador $\hat{G} = \frac{1}{E - \hat{H}}$, cuja representação em posição é a própria função de Green. Essa interpretação é bastante útil em problemas de espalhamento [16], mas exige algumas sutilezas operacionais.

1.1 Propriedades da função de Green

Algumas propriedades especiais podem ser extraídas das definições anteriores:

Causalidade (o problema de $\eta \rightarrow 0^+$)

Partindo da eq. (1.3), podemos calcular a anti-transformada de Fourier de G ,

$$\frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) e^{\frac{-iET}{\hbar}} dE.$$

Note que a existência do η é essencial para dar sentido à anti-transformada. Não fosse ele, o integrando seria singular na região de integração. Escolhendo um caminho apropriado no plano complexo, o resultado dessa integração é: para $T < 0$, a anti-transformada é nula; e para $T > 0$, ela é idêntica ao propagador $\langle \mathbf{r} | e^{\frac{-i\hat{H}T}{\hbar}} | \mathbf{r}' \rangle$. A conclusão é que essa função de Green pode ser usada igualmente para *definir* o propagador através de sua anti-transformada. O princípio de causalidade já está embutido em G .

Vamos prosseguir definindo a função G_- :

$$G_-(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \lim_{\eta \rightarrow 0^-} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varphi_n(\mathbf{r}) \varphi_n^*(\mathbf{r}')}{E - E_n - i\eta},$$

que difere de G apenas pelo sinal de η . A anti-transformada de G_- é calculada de forma análoga, mas o resultado é oposto: para $T > 0$, a anti-transformada é nula e, para $T < 0$, ela é igual a $\langle \mathbf{r} | e^{\frac{-i\hat{H}T}{\hbar}} | \mathbf{r}' \rangle$. Nesse caso, o propagador associado a G_- é um *propagador de tempo negativo*, pois relaciona o estado do sistema em um instante $t = 0$ com o estado do sistema num instante anterior. Na literatura, G e G_- costumam ser chamadas respectivamente de *funções de Green avançada e retardada* [17].

Em alguns problemas de Mecânica Quântica, como por exemplo espalhamento quântico, a função de Green retardada é útil. Nessa dissertação, nos referiremos quase sempre a G como função de Green. Uma terceira função de Green ainda pode ser definida:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varphi_n(\mathbf{r}) \varphi_n^*(\mathbf{r}')}{E - E_n}.$$

Embora essa função satisfaça as mesmas equações diferenciais que as anteriores, ela não tem informação de causalidade, e não admite anti-transformada (a menos que, por exemplo, a integral seja entendida como o valor principal no sentido de Cauchy). Ocasionalmente, é preciso levar em consideração a causalidade, e então é importante distinguir essas funções de Green.

Pólos e Resíduos

Ainda partindo da eq. (1.3), vemos que a função de Green apresenta pólos simples um pouco abaixo dos autovalores E_n . O resíduo em cada pólo dá informação parcial sobre os autoestados $\varphi_n(\mathbf{r})$ ¹. Se o interesse for apenas obter autovalores e autofunções de energia, podemos recorrer tanto a G quanto a G_- . A posição dos pólos, acima ou abaixo do eixo real, é essencialmente dispensável.

Simetria de inversão temporal

O problema de simetria por inversão temporal (ou melhor: simetria por inversão de movimento) em Mecânica Quântica foi analisado pela primeira vez por E. G. Wigner na década de 1930. Um resultado bastante importante de sua teoria é que sistemas com simetria de inversão temporal têm Hamiltoniano real. Além disso, autofunções correspondentes a níveis de energia não-degenerados sempre podem ser escolhidas com fase nula. A manifestação dessa simetria na função de Green pode ser buscada nas suas equações diferenciais (1.4). Se $\hat{H}(\mathbf{r})$ for real, então as equações em \mathbf{r} e \mathbf{r}' são idênticas. Existe simetria pela troca entre o ponto inicial e o ponto final. Um exemplo trivial é o de uma partícula se movendo livremente no plano. Nesse caso, o Hamiltoniano é $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2}$ e a função de Green é:

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \frac{-i}{2\hbar^2} H_0^{(1)}(k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \quad (1.5)$$

onde $k = \sqrt{2E}/\hbar$ e $H_0^{(1)}(x)$ é a função de Hankel de primeiro tipo.

Sem simetria de inversão temporal, os índices \mathbf{r} e \mathbf{r}' não podem ser permutados. A propriedade de permutação é um pouco mais restritiva que antes:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = G^*(\mathbf{r}', \mathbf{r}; E). \quad (1.6)$$

Um exemplo simples é o de Hamiltoniano de campo magnético (partícula de carga q se movendo no plano sob ação de um campo magnético \mathbf{B} uniforme e perpendicular ao plano):

¹Se o nível n for não-degenerado e se houver simetria por inversão temporal, então o resíduo calculado em $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ pode determinar completamente os autoestados

$$\hat{H}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \left[-i\hbar\nabla - \frac{\mathbf{B} \times \mathbf{r}}{2} \right]^2. \quad (1.7)$$

Para manter inalterada a dinâmica da partícula, sabemos que inversão temporal deve ser seguida de inversão no sentido do campo magnético ou inversão no sinal da carga. Ambas as operações envolvem mudança de sinal no segundo termo do operador (1.7). É o que basta para retornar ao Hamiltoniano original. Veremos que, de fato, a função de Green correspondente a esse Hamiltoniano obedece à propriedade de permutação (1.6).

1.2 Como obter a função de Green

Em geral, obter a função de Green para um dado Hamiltoniano não é tarefa fácil, exceto para alguns casos triviais. Em geral, algum tipo de aproximação é feito para obtê-la. O método de Gutzwiller para obter a função de Green no limite semiclássico tornou-se famoso pela utilidade e elegância [2]. O ponto de partida desse método é a formulação de Feynman de integrais de trajetória [18]. No limite semiclássico, em que \hbar é menor que as ações típicas do sistema, as trajetórias que mais contribuem para o propagador são realmente as trajetórias clássicas que partem de \mathbf{r}' e chegam em \mathbf{r} no intervalo t (aqui, trajetórias clássicas são trajetórias que minimizam a ação). Para a função de Green, as trajetórias clássicas importantes são aquelas com energia fixa E . A força desse método é relacionar quantidades essencialmente quânticas, como o propagador e a função de Green, com parâmetros de trajetórias clássicas (ação, índice de Maslov etc.). Uma dificuldade do método é que, a princípio, todas as trajetórias clássicas devem ser levadas em consideração. Isso nem sempre é possível, embora a contribuição de algumas famílias específicas de órbitas seja dominante em certos casos.

Para um cálculo essencialmente quântico, existem dois caminhos principais para se obter G : através do propagador, eq. (1.2), ou através das equações diferenciais (1.4). O exemplo mais simples, já citado, de função de Green é a de partícula livre no plano (1.5). Essa função pode ser obtida tanto pelo propagador [18] quanto resolvendo diretamente as equações diferenciais. Um outro caso simples é o do oscilador harmônico bidimensional, com Hamiltoniano $\hat{H}_{osc} = \frac{-\hbar^2}{2} \nabla^2 + \frac{\omega^2}{2} (x^2 + y^2)$. Novamente, o propagador

é conhecido e a função de Green pode ser obtida por integração no plano complexo [19].

Um terceiro caso, um pouco mais elaborado, é o de um Hamiltoniano de dois graus de liberdade com campo magnético uniforme e perpendicular ao plano(1.7). Esse Hamiltoniano pode ser reescrito nessa forma:

$$\hat{H} = \frac{-\hbar^2}{2} \nabla^2 + \frac{i\hbar}{2} \mathbf{B} \cdot \mathbf{r} \times \nabla + \frac{B^2}{8} (x^2 + y^2),$$

bem semelhante ao de oscilador harmônico bidimensional com exceção do segundo termo, que representa acoplamento entre campo magnético \mathbf{B} e o momento angular $\mathbf{L} = -i\hbar \mathbf{r} \times \nabla$. O propagador para esse Hamiltoniano pode servir como ponto de partida para a função de Green [19], que denotaremos por G_B para diferenciá-la da G_0 anterior. Por outro lado, a mesma função pode ser obtida por solução direta da equação diferencial. O procedimento padrão para obter essa solução é:

1. Para aproveitar a simetria do potencial vetor, o sistema de coordenadas ideal é o de coordenadas polares $\mathbf{r} = (r, \theta)$, $\mathbf{r}' = (r', \theta')$. As funções δ e G_B são expandidas em série de Fourier, $\delta = \sum_l \frac{1}{r} \delta(r - r') e^{il(\theta - \theta')}$, $G_B = \sum_l G_l(r, r') e^{il(\theta - \theta')}$. Essa expansão resolve a parte angular e obtém-se um conjunto de equações ordinárias desacopladas para $G_l(r, r')$.
2. A parte radial é resolvida da forma usual por Teoria de Sturm-Liouville [14]. As condições de contorno são: $G_l(r, r')$ finita e contínua em $r = r'$ e $r = 0$, derivada descontínua em $r = r'$ (devido à função δ) e $G_l(r, r') = 0$ para $r \rightarrow \infty$.

Nesse caso específico, a solução da equação radial se relaciona com uma classe de funções especiais chamadas *funções hipergeométricas confluentes* ou *funções de Kummer*, $\Phi(a, c; x)$ e $\Psi(a, c; x)$. Existe uma literatura bastante concisa sobre as propriedades de tais funções especiais, e elas parecem ter atraído o interesse de muitos matemáticos durante algumas décadas atrás [20, 21]. Em termos dessas funções, podemos obter a expressão:

$$G_B(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = - \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma(\alpha_l)}{2\pi \hbar^2 \Gamma(|l| + 1)} \Psi \left(\alpha_l, |l| + 1; \frac{\omega r_{>}^2}{\hbar} \right) \cdot \Phi \left(\alpha_l, |l| + 1; \frac{\omega r_{<}^2}{\hbar} \right) \left(\frac{\omega r r'}{\hbar} \right)^{|l|} e^{-\frac{\omega(r^2 + r'^2)}{2\hbar} + il(\theta - \theta')}, \quad (1.8)$$

onde definimos:

$$\omega = |B|/2$$

$$\alpha_l = -\frac{E + i\eta}{2\hbar\omega} + \frac{|l| - l\text{sign}(B) + 1}{2}.$$

As variáveis $r_>$ e $r_<$ são definidas da forma usual: $r_>$ é o máximo entre $\{r, r'\}$ e $r_<$ é o mínimo entre $\{r, r'\}$.

Essa solução mascara o papel da simetria de translação no problema. Apesar de não haver nenhum ponto dinamicamente privilegiado no plano, pois o campo magnético é totalmente uniforme, a introdução de um potencial vetor quebra essa simetria no Hamiltoniano. O resultado é que a função de Green livre não depende apenas da posição relativa $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$. No apêndice A, apresentamos um método alternativo de solução, onde fica mais explícita a dependência nos vetores \mathbf{r} e \mathbf{r}' . Nele, encontramos a seguinte expressão:

$$G_B(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = e^{\frac{i}{2\hbar}\mathbf{B}\cdot\mathbf{r}'\times\mathbf{r}} g(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|; E), \quad (1.9)$$

com

$$g(R; E) = -\frac{1}{2\pi\hbar^2} \Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{E + i\eta}{2\hbar\omega}\right) e^{-\frac{\omega}{2\hbar}R^2} \Psi\left(\frac{1}{2} - \frac{E + i\eta}{2\hbar\omega}, 1; \frac{\omega}{\hbar}R^2\right). \quad (1.10)$$

Nessa forma, estão explicitadas as seguintes características:

1. A simetria por permutação de índices de posição (1.6) está evidente na fase $\frac{i}{2\hbar}\mathbf{B}\cdot\mathbf{r}'\times\mathbf{r}$. Essa fase também é a única que guarda informação sobre o sentido do campo magnético (g não muda se B for trocado por $-B$).
2. O infinitésimo η garante causalidade na função. De fato, η pode ser feito nulo para uma grande maioria de casos (em cálculos numéricos, sempre admitimos $\eta = 0$), e vamos preservá-lo apenas quando ele for importante. A função de Green retardada também é dada por (1.9), a menos do sinal de η : negativo em lugar de positivo.
3. Devido ao comportamento singular da função Ψ na origem [20], a função de Green diverge logaritmicamente para $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}'$:

$$G_B(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) \approx \frac{1}{\pi \hbar^2} \ln\left(\frac{\sqrt{2E}}{\hbar} r\right).$$

Esse comportamento também existe na função (1.5) e é um efeito do termo não-homogêneo na equação diferencial.

4. Se o campo magnético for desligado, essa função se reduz à (1.5), o que assegura a consistência entre ambas as funções. Para mostrar isso, usamos as propriedades de limite assintótico das funções hipergeométricas quando $\frac{E+i\eta}{2\hbar\omega} \rightarrow \infty e^{+i0}$ (valor absoluto infinitamente grande, fase positiva e muito pequena). É curioso que o sinal de η desempenhe papel importante nesse limite. O cálculo do limite está indicado no apêndice A.
5. A equivalência entre as expressões (1.8) e (1.9) pode ser verificada no caso especial de $\mathbf{r}' = 0$. Na primeira equação, a soma é reduzida ao termo $l = 0$, o único em que $\Phi(a, c; z = 0)$ não é nulo:

$$-\frac{1}{2\pi \hbar^2} \Gamma(\alpha_0) e^{-\frac{\omega}{2\hbar} r^2} \Psi(\alpha_0, 1; \frac{\omega}{\hbar} r^2)$$

que é idêntica à (1.9), com fase nula. A equivalência entre essas equações também fornece uma regra de adição especial entre funções hipergeométricas.

6. Essa função de Green tem pólos sobre o plano de energia, localizados em todos os pontos onde o argumento da função Γ torna-se inteiro não-positivo. Isso significa que uma partícula no plano sujeita apenas à ação do campo magnético tem espectro de energias discreto. As energias permitidas para essa partícula são dadas pela regra:

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

Por motivos históricos, chama-se os níveis E_n de *níveis de Landau* [22]. Os níveis de Landau têm a propriedade de serem igualmente espaçados em energia, como os níveis de um oscilador unidimensional, e degenerados (i.e., cada nível E_n admite infinitos autoestados).

Capítulo 2

O método de integração de fronteira

No capítulo anterior, temos discutido a função de Green como um objeto capaz de armazenar a informação de autovalores e autofunções de energia do sistema. Aqui, vamos ver como obter autofunções e autovalores para o caso específico de bilhares. Na seção 2.1, apresentaremos o sistema de estudo. A seguir, duas seções são dedicadas para a fundamentação do método, junto com alguns exemplos. Propomos também um método alternativo que, embora se baseie também em integrações de fronteira, é bem mais simples e intuitivo e não usa diretamente funções de Green. Esse "método melhorado" está exposto na seção 2.4. Nas seções 2.4 e 2.5, aplicaremos esse segundo método para o caso de nosso interesse: o bilhar elíptico.

2.1 O que são bilhares

Um dos grandes desafios na área de caos clássico e quântico tem sido procurar vestígios de dinâmica clássica caótica a nível quântico. Nessa linha, bilhares são usados como sistemas-modelo para estudar paralelamente as dinâmicas clássica e quântica porque são sistemas que podem apresentar tanto integrabilidade quanto não-integrabilidade. A comparação entre a solução quântica de bilhares integráveis e caóticos é factível então. Além disso, esses sistemas têm apenas dois graus de liberdade, que é o menor número de graus de liberdade onde já é possível ter movimento caótico.

Do ponto de vista clássico, modelos básicos de bilhares são bastante simples: uma partícula move-se livremente dentro de uma região plana delimitada por paredes rígidas, onde o potencial vai a infinito. Dentro do bilhar, o movimento é ao longo de retas, com reflexões especulares na fronteira, de forma que a natureza do problema, caótico ou regular, depende exclusivamente da forma da fronteira. Designaremos essa fronteira por \mathcal{B} . Sob influência dos recentes avanços teóricos e experimentais em sistemas mesoscópicos [5, 8], uma classe de bilhares tornou-se bastante importante: os bilhares em campo magnético. A implementação desses sistemas é feita adicionando-se um campo magnético uniforme e ortogonal ao plano do bilhar. A grande diferença do ponto de vista clássico é que as trajetórias passam a ser arcos de circunferência, com raio inversamente proporcional à intensidade do campo. Agora, o efeito combinado do campo e da fronteira modificam a descrição clássica. Nesses bilhares, o problema quântico ainda é resolver a equação de autovalores $\hat{H}\varphi = E_n\varphi$, com condição de contorno de parede rígida,

$$\varphi(\mathbf{r})|_{\mathbf{r}\in\mathcal{B}} = 0 . \quad (2.1)$$

Como vimos, a função de Green pode resolver esse problema mas, em geral, o cálculo dessa função não é trivial devido à forma das condições de contorno,

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)|_{\{\mathbf{r}\in\mathcal{B} \text{ ou } \mathbf{r}'\in\mathcal{B}\}} = 0 .$$

Por outro lado, as equações diferenciais de G (1.4) podem ser resolvidas para condições de contorno mais simples. Na ausência de fronteira, já conhecemos a função de Green: ela é dada pela eq. (1.5) sem campo, ou pelas eq. (1.8, 1.9), com campo magnético de intensidade B . Podemos relacionar φ com alguma função de Green usando o fato de elas satisfazerem equações diferenciais semelhantes. A função de Green que escolhemos para trabalhar é a mais simples de todas: a função de Green livre. Todavia, o método é geral, e permite a escolha de qualquer função que satisfaça as equações de Green.

2.2 Transformando uma equação diferencial em integral

Os autovalores e autofunções podem ser obtidos via integração na fronteira do produto φG . Vamos obter esse resultado no caso especial de uma partícula em campo magnético descrito por um potencial vetor $\mathbf{A}(\mathbf{r})$. A equação de autovalores para $\varphi(\mathbf{r}')$ é:

$$\frac{-\hbar^2}{2}\nabla'^2\varphi + i\hbar\mathbf{A} \cdot \nabla'\varphi + \frac{i\hbar}{2}(\nabla' \cdot \mathbf{A})\varphi + \frac{\mathbf{A}^2}{2}\varphi = E\varphi, \quad (2.2)$$

onde assume-se que E seja uma energia permitida para a partícula. A equação diferencial de $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$ em \mathbf{r}' é:

$$\frac{-\hbar^2}{2}\nabla'^2G - i\hbar\mathbf{A} \cdot \nabla'G - \frac{i\hbar}{2}(\nabla' \cdot \mathbf{A})G + \frac{\mathbf{A}^2}{2}G = EG - \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (2.3)$$

Vamos multiplicar os termos de (2.2) à esquerda por G e os termos de (2.3) à esquerda por φ . Subtraindo membro a membro as equações que surgem, o que sobra após os cancelamentos é:

$$\frac{\hbar^2}{2} [\varphi\nabla'^2G - G\nabla'^2\varphi] + i\hbar [G\mathbf{A} \cdot \nabla'\varphi + \varphi\mathbf{A} \cdot \nabla'G + \varphi G(\nabla' \cdot \mathbf{A})] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\varphi$$

que pode ser reescrita como:

$$\frac{\hbar^2}{2}\nabla' \cdot [\varphi\nabla'G - G\nabla'\varphi] + i\hbar\nabla' \cdot [G\varphi\mathbf{A}] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\varphi(\mathbf{r}'),$$

usando a identidade de Green e alguma manipulação de derivadas espaciais. Se escolhermos agora um ponto fixo \mathbf{r}' dentro do bilhar e integrarmos os dois membros da equação em todo o interior do bilhar, a integral à direita torna-se idêntica a $\varphi(\mathbf{r}')$. À esquerda, podemos usar uma versão bidimensional do teorema de divergência,

$$\int_{int\mathcal{B}} \nabla \cdot (*) dS = \int_{\mathcal{B}} (*) \cdot \mathbf{n} dl,$$

onde \mathbf{n} é o versor normal à curva \mathcal{B} , direcionado para fora do bilhar. O resultado é:

$$\frac{\hbar^2}{2} \int_{\mathcal{B}} \varphi \frac{\partial}{\partial n'} G dl' - \frac{\hbar^2}{2} \int_{\mathcal{B}} G \frac{\partial}{\partial n'} \varphi dl' + i\hbar \int_{\mathcal{B}} G \varphi (\mathbf{A} \cdot \mathbf{n}) dl' = \varphi(\mathbf{r}) .$$

A condição de contorno das autofunções força que a primeira e a terceira integrais sejam nulas, o que resulta na relação:

$$\varphi(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2} \int_{\mathcal{B}} G \frac{\partial}{\partial n'} \varphi dl' . \quad (2.4)$$

Se o interesse é obter apenas autoenergias, podemos simplificar ainda mais essa equação. Para isso, escolhemos \mathbf{r} infinitamente próximo da fronteira, mas *dentro* do bilhar. Nesse limite, o lado esquerdo se anula e a condição de quantização de bilhares se expressa como:

$$\int_{\mathcal{B}} G \frac{\partial}{\partial n'} \varphi dl' = 0 , \quad (2.5)$$

que deve ser satisfeita para todo ponto \mathbf{r} na fronteira (\mathbf{r} aparece como argumento na função de Green). Aqui, chamamos atenção para a necessidade de uma escolha apropriada para G : essa função não pode ter pólos nos níveis de energia do bilhar em estudo, caso contrário a eq. (2.5) não tem sentido. De fato, a função de Green livre não tem pólos no eixo real de energia [9].

É importante citar também que o mesmo procedimento pode ser repetido para problemas mais gerais. Se o Hamiltoniano for da forma:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} [\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{A}]^2 + \hat{V}$$

onde o potencial \hat{V} é independente de momento linear, então as mesmas integrais de fronteira são obedecidas pelas autofunções. Evidentemente, a função de Green usada deve satisfazer a equação diferencial com esse Hamiltoniano.

Para efetivamente encontrar os autovalores de energia, podemos parametrizar a fronteira por uma coordenada s , de período 2π . e calcular a integral de fronteira. A função desconhecida $\frac{\partial}{\partial n} \varphi$ e a função G são expandidas em série de Fourier ao longo da fronteira:

$$\begin{cases} G(\mathbf{r}(s), \mathbf{r}'(s'); E) = \sum_{l,l'} G_{ll'} e^{ils} e^{-il's'} \\ \frac{\partial}{\partial n'} \varphi(\mathbf{r}'(s')) = \sum_k f_k e^{iks'} \end{cases}$$

e a (2.5) se transforma em:

$$\sum_{ll'} G_{ll'} f_l e^{ils} = 0 ,$$

que só é verdadeira para todo valor de s se a matriz de coeficientes $G_{ll'}$ tiver determinante nulo,

$$\det \{G_{ll'}\} = 0 . \quad (2.6)$$

Esse determinante pode ser visto como uma função de energia, cujos zeros coincidem com as autoenergias do bilhar (a energia aparece através da função de Green). Para obter a autofunção correspondente a um certo autovalor E , retrocedemos até a integral (2.4). Nela, a expansão de Fourier de $\frac{\partial}{\partial n'} \varphi$ já pode ser calculada resolvendo o sistema de equações lineares $\sum_{ll'} G_{ll'} f_l = 0$.

À primeira vista, pode parecer que as integrais de fronteira nas equações (2.4) e (2.5) são tão complicadas quanto a equação de autovalores original. Porém, essas integrais efetivamente reduzem o problema de autovalores em duas dimensões para um problema de equação integral em uma dimensão. Computacionalmente, essa redução pode ser significativa.

Na derivação apresentada, supomos *a priori* que o bilhar é compacto e com fronteira suave. Isso significa que não existem "buracos" dentro do bilhar, e a derivada normal sobre a fronteira está sempre bem definida. Um caso importante de bilhar que não obedece essas condições é o bilhar de Sinai: um círculo inscrito em um quadrado, de forma que a região permitida para a partícula está limitada por essas duas figuras. Ele não é compacto devido à presença do círculo interno, e nem de fronteira suave, pois a normal não está bem definida nos cantos do quadrado.

Para bilhares não compactos, a generalização é imediata: a integral na fronteira passa a ser feita sobre todas as curvas que limitam o bilhar, com a derivada normal sempre apontando para fora do bilhar. Exemplificaremos como são feitas essas integrais no caso do bilhar anel concêntrico. Para fronteira não-suave, é preciso tratar convenientemente os pontos singulares da fronteira, onde a normal não está bem definida. Existem resultados analíticos que permitem a inclusão de singularidades na integral de fronteira [10].

As integrais de fronteira apareceram pela primeira vez na teoria de equações de Helmholtz [15, 13]. A sua generalização para outras classes de

equações diferenciais é, como mostramos, bastante simples. Uma importante aplicação das equações de fronteira, desta vez para problemas abertos, é em magneto-condutância em bilhares abertos. Nesse caso, a condição de contorno nas autofunções é ligeiramente modificada: existem duas "aberturas" na fronteira \mathcal{B} , onde as autofunções se comportam como ondas planas, incidente-refletida numa abertura e transmitida na outra. Devido à presença das aberturas, aparecem alguns termos adicionais nas integrais de fronteira, mas ainda é possível obter coeficientes de transmissão. Esse tipo de modelo tem sido bastante investigado, com interessantes resultados teóricos [23, 19].

2.3 Dois casos simples: o bilhar circular e o bilhar anel concêntrico

Vamos exemplificar o método de integração de fronteira para o caso simples do bilhar circular. Nesse bilhar, a fronteira é um círculo de raio R . Para simplificar a notação, desejamos usar unidades naturais, $\hbar = 1$. A função de Green conveniente é a da eq. (1.8), e o ângulo θ serve muito bem como parâmetro da fronteira. Começamos por extrair os coeficientes $G_{ll'}$:

$$G_{ll'} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int \int_{\mathcal{B}} G(\mathbf{r}(\theta), \mathbf{r}(\theta'); E) e^{-il\theta} e^{il'\theta'} d\theta d\theta'$$

que são idênticos a:

$$G_{ll'} = -\frac{1}{2\pi\hbar^2} \frac{\Gamma(\alpha_l)}{\Gamma(|l|+1)} \Psi\left(\alpha_l, |l|+1; \frac{\omega R^2}{\hbar}\right) \Phi\left(\alpha_l, |l|+1; \frac{\omega R^2}{\hbar}\right) e^{-\frac{\omega}{2\hbar} R^2} \left(\sqrt{\frac{\omega}{\hbar}} R\right)^{|l|} \delta_{ll'}$$

Como a matriz $\{G_{ll'}\}$ é diagonal, os zeros do seu determinante são obtidos analiticamente: sempre que algum G_{ll} for nulo (ou seja, sempre que Φ ou Ψ for nula), o determinante é nulo, e a única constante f não nula é f_l . A expressão das autofunções é:

$$\varphi(\mathbf{r}) = (\text{const.}) \Phi\left(\alpha_l, |l|+1; \frac{\omega r^2}{\hbar}\right) e^{-\frac{\omega r^2}{2\hbar}} \left(\sqrt{\frac{\omega}{\hbar}} r\right)^{|l|} e^{il\theta} \quad (2.7)$$

e as energias são obtidas impondo que $\Phi(\alpha_l, |l|+1; \omega R^2/\hbar) = 0$

Podemos distinguir daqui exatamente a solução natural do bilhar circular: a expressão acima é exatamente a que se obtém por separação de

variáveis na equação de autovalores primordial (funções Ψ devem ser ignoradas pois elas são singulares em $r = 0$). Em $r = R$, a função Φ se anula, e portanto essa solução também satisfaz a condição de contorno. No esquema do método de fronteira, os zeros das funções Ψ são soluções inconvenientes pois resultam em autofunções identicamente nulas. A presença dessas soluções falsas nos ensina mais sobre o método: embora todas as autoenergias satisfaçam a condição determinantal (2.6), nem todas as raízes do determinante são garantidamente autoenergias. De fato, algumas soluções da equação integral (2.5) podem corresponder a autofunções nulas.

O bilhar anel concêntrico não é tão trivial como o bilhar circular, pois a fronteira é composta de dois círculos disjuntos, S_1 de raio $R < 1$, e S_2 de raio unitário. A integração deve ser feita nas duas curvas. Seguindo o procedimento do exemplo anterior, a forma ideal de G_B é (1.8). Expandimos as autofunções em série de Fourier no ângulo θ :

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial n'} \varphi(R, \theta') = -\sum_l A_l e^{il\theta'} \\ \frac{\partial}{\partial n'} \varphi(1, \theta') = \sum_l B_l e^{il\theta'} \end{cases}$$

Inicialmente, impomos que a integral se anula quando \mathbf{r} está sobre a fronteira interna, $\mathbf{r} = (R, \theta)$:

$$0 = \left| \int_{\partial S_1} \frac{\partial}{\partial n'} \varphi G dl' \right|_{\mathbf{r} \in \partial S_1} + \left| \int_{\partial S_2} \frac{\partial}{\partial n'} \varphi G dl' \right|_{\mathbf{r} \in \partial S_1}$$

que resulta em:

$$0 = -\frac{1}{\hbar^2} \sum_l \frac{\Gamma(\alpha_l)}{\Gamma(|l|+1)} \left\{ -A_l \Psi\left(\alpha_l, |l| + 1, \frac{\omega R^2}{\hbar}\right) + B_l \Psi\left(\alpha_l, |l| + 1, \frac{\omega}{\hbar}\right) \right\} \cdot \Phi\left(\alpha_l, |l| + 1, \frac{\omega R^2}{\hbar}\right) e^{il\theta}.$$

Essa equação implica que a expressão entre colchetes é nula para todo l . Para $\mathbf{r} = (1, \theta)$, na fronteira exterior, obtemos de forma similar:

$$A_l \Phi\left(\alpha_l, |l| + 1, \frac{\omega R^2}{\hbar}\right) - B_l \Phi\left(\alpha_l, |l| + 1, \frac{\omega}{\hbar}\right) = 0.$$

Resolvendo o par de equações homogêneas para A_l e B_l , encontramos a condição de quantização:

$$\Phi\left(\alpha_l, |l| + 1, \frac{\omega}{\hbar}\right) - \frac{\Phi\left(\alpha_l, |l| + 1, \frac{\omega R^2}{\hbar}\right)}{\Psi\left(\alpha_l, |l| + 1, \frac{\omega R^2}{\hbar}\right)} \Psi\left(\alpha_l, |l| + 1, \frac{\omega}{\hbar}\right) = 0. \quad (2.8)$$

Mais uma vez, essa solução é consistente com a solução direta do problema de autovalores. Resolvemos a equação de Schrödinger com o Ansatz:

$$\varphi(r, \theta) = \sum_l \left[(\text{const.}) \Phi(\alpha_l, |l| + 1, \frac{\omega r^2}{\hbar}) + (\text{const.}) \Psi(\alpha_l, |l| + 1, \frac{\omega r^2}{\hbar}) \right] e^{-\frac{\omega r^2}{2\hbar}} \left(\sqrt{\frac{\omega}{\hbar}} r \right)^{|l|} e^{il\theta}$$

e as condições de contorno são $\varphi(R, \theta) = 0, \varphi(1, \theta) = 0$. Essas autofunções estão naturalmente associadas às do círculo: no limite $R \rightarrow 0$, as autoenergias dadas por (2.8) automaticamente se reduzem às de (2.7). Como as funções Ψ são singulares na origem, a única forma de garantir a eq. (2.8) é impondo $\Phi = 0$ em $r = 1$. Isso é razoável já que os dois bilhares coincidem com a escolha $R = 0$.

2.4 O problema específico: o bilhar elíptico

Na seção anterior, vimos que o método de fronteira é bem sucedido para resolver dois bilhares de fronteiras simples. Um fato interessante é que o resultado obtido, para ambos os bilhares, poderia ser encontrado partindo de uma expansão *a priori* em uma certa base de autofunções. Tendo isso em mente, podemos propor que, para um bilhar compacto de fronteira $R(\theta)$ (supomos que a fronteira possa ser bem escrita em coordenadas polares), qualquer autofunção de energia possa ser escrita na forma:

$$\varphi(r, \theta) = \sum_l C_l A_l e^{-\frac{\omega r^2}{2\hbar}} \left(\sqrt{\frac{\omega}{\hbar}} r \right)^{|l|} \Phi(\alpha_l, |l| + 1, \frac{\omega r^2}{\hbar}) e^{il\theta},$$

onde admitimos que o conjunto de autofunções livres acima forma uma base do espaço. As constantes C_l são simples incógnitas, coeficientes da expansão. As constantes A_l são parâmetros ajustáveis, que podem ser interpretadas como constantes de normalização para a base proposta. Como o bilhar é compacto, funções hipergeométricas Ψ devem ser ignoradas pois elas são singulares na origem. A partir dessa expansão, impomos agora que integrais do tipo

$$\int_{\mathcal{B}} \varphi(r, \theta) e^{-il'\theta} d\theta$$

sejam nulas para todo valor de l' , pois φ é nula na fronteira. Essa imposição resulta em um sistema, homogêneo, de equações lineares nas constantes C_l . A solução natural para esse sistema é:

$$\det\{F_{ll'}\} = 0 \quad , \quad (2.9)$$

onde

$$F_{ll'} = A_l \int_{0\{R=R(\theta)\}}^{2\pi} \left(\sqrt{\frac{\omega}{\hbar}} R \right)^{|l|} e^{-\frac{\omega R^2}{2\hbar}} \Phi \left(\alpha_l, |l| + 1; \frac{\omega R^2}{\hbar} \right) e^{i(l-l')\theta} d\theta \quad . \quad (2.10)$$

A eq. (2.9) pode ser obtida também a partir de um esquema semelhante ao da seção 2.2. Para ver como isso acontece, criamos a seguinte função:

$$\mathcal{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = - \sum_{l=-\infty}^{\infty} A_l \Phi \left(\alpha_l, |l| + 1; \frac{\omega r^2}{\hbar} \right) \cdot \Phi \left(\alpha_l, |l| + 1; \frac{\omega r'^2}{\hbar} \right) \left(\frac{\omega r r'}{\hbar} \right)^{|l|} e^{-\frac{\omega(r^2+r'^2)}{2\hbar} + i l(\theta-\theta')} \quad .$$

Por construção, e usando a equação diferencial das funções hipergeométricas, é possível ver que essa função satisfaz as equações de Green (1.4), sem o termo de delta. A ausência desse termo proíbe o uso da eq. integral (2.4). Por outro lado, a outra equação integral, (2.5), continua sendo válida não só na fronteira como também para qualquer ponto \mathbf{r} dentro do bilhar. Partindo dessa última, podemos obter a matriz de coeficientes $\{\mathcal{G}_{ll'}\}$. Esses coeficientes são dados por integrais de Fourier,

$$\mathcal{G}_{ll'} = \frac{1}{(2\pi)^2} \int \int_{\mathcal{B}} \mathcal{G}(\mathbf{r}(\theta), \mathbf{r}'(\theta'); E) e^{-il\theta} e^{il'\theta'} d\theta d\theta' \quad .$$

Impondo que o determinante dessa matriz tenha raízes nos autovalores corretos, obtemos a condição de quantização (2.9), c.q.d.

Um caso não trivial de aplicação da eq. (2.9) é em um bilhar com fronteira elíptica. Como o nome indica, a fronteira do bilhar elíptico é uma elipse de excentricidade ϵ . Por comodidade, escolhemos a área dentro da

elipse igual à unidade. A função $R(\theta)$, que representa a fronteira em coordenadas polares, é

$$R(\theta) = \frac{1}{\pi \sqrt{1 - \epsilon^2} \cos^2 \theta + \frac{\pi \sin^2 \theta}{\sqrt{1 - \epsilon^2}}} .$$

Nas aplicações numéricas, trabalharemos sempre com excentricidade $\epsilon = 0.8$ embora seja possível, *a priori*, usar o método integral para qualquer excentricidade. O bilhar está mostrado na fig. 4.2, com os dois focos. Com essa escolha, a razão entre os semi-eixos menor e maior é 0.6.

A fronteira elíptica tem propriedades de simetria que simplificam ainda mais a integral. De fato, a existência de algum eixo de simetria no plano do bilhar torna a integral real. Como a fronteira elíptica apresenta dois eixos de simetria perpendiculares, os níveis de energia podem ser divididos em duas classes de simetria:

1. níveis de simetria par, para os quais ocorre $\det\{f_{ll'}\} = 0$ onde l e l' são ambos pares; e
2. níveis de simetria ímpar, para os quais $\det\{f_{ll'}\} = 0$ com l e l' ímpares. $f_{ll'}$ é a integral de Fourier no bilhar assimetrizado,

$$f_{ll'} = A_l \int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_{\{R=R(\theta)\}} \left(\sqrt{\frac{\omega}{\hbar}} R \right)^{|l|} e^{-\frac{\omega R^2}{2\hbar}} \Phi \left(\alpha_l, |l| + 1; \frac{\omega R^2}{\hbar} \right) e^{i(l-l')\theta} d\theta .$$

Para cada uma dessas classes de simetria, as autofunções apresentam propriedades de simetria associadas: quando o sistema de referência é girado de um ângulo π em torno do centro, as autofunções de simetria par são invariantes enquanto as de simetria ímpar ganham uma fase $e^{i\pi}$. Apesar de nenhuma autofunção ser invariante por reflexão em algum dos dois eixos, é possível escolhê-las de forma que todas as autofunções de níveis não-degenerados sejam reais ao longo de um desses eixos.

Por enquanto, não determinamos quais são as constantes de normalização livres, A_l . Numericamente, é interessante manter sob controle a ordem de grandeza das integrais $f_{ll'}$. Matrizes com algumas entradas muito grandes em comparação com outras podem se tornar mal-condicionadas. Quando isso acontece, métodos diretos de cálculo do determinante frequentemente acumulam imprecisão numérica [24]. Uma escolha conveniente das constantes A_l

é capaz de evitar esse problema. A título de exemplo, cito escolhas possíveis para essa constante:

- energia baixa (até o nível 200, aproximadamente):

$$A_l = 1 ,$$

- energia alta:

$$\begin{cases} A_l = \frac{1}{l!} \left[\frac{(2E+2\hbar\omega l)!}{(2E+2\hbar\omega l-l)!} \right]^{1/2} \frac{1}{(4\hbar\omega)^{l/2}} & l > 0 \\ A_l = \frac{1}{(-l)!} \left[\frac{E}{2\hbar\omega} \right]^{-l/2} & l < 0 . \end{cases}$$

Existem outros métodos de cálculo de autovalores em bilhares. Alguns são bastante simples, como a diagonalização numérica do Hamiltoniano [25]. Outros são mais sofisticados, como por exemplo os que usam funções de Green [26], aliados ou não a técnicas de expansões em altas energias [11, 27], essas últimas inspiradas em um método introduzido por Heller [12]. Esses métodos podem ser diretamente adaptados ao problema de bilhar com campo magnético, e é possível fazer uma comparação entre a eficiência destes.

O método de Berry & Wilkinson [26] se baseia em uma equação integral semelhante à (2.4), onde o *kernel* da integral é $\frac{\partial}{\partial n} G_B(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$ em lugar de simplesmente G_B :

$$\frac{\partial}{\partial n} \varphi(\mathbf{r}) = -\hbar^2 \int_{\mathcal{B} - \{\mathbf{r}\}} \left(\frac{\partial}{\partial n} G_B \right) \left(\frac{\partial}{\partial n'} \varphi \right) d\mathbf{r}' , \quad (2.11)$$

onde o sinal $\mathcal{B} - \{\mathbf{r}\}$ simboliza que a integral deve ser feita sobre toda a fronteira exceto numa pequena vizinhança em torno de \mathbf{r} , onde a função de Green diverge. Essa equação pode ser obtida a partir da (2.4) calculando a derivada normal de φ sobre a fronteira. Por $\frac{\partial}{\partial n'} \varphi$ entende-se o limite dessa derivada calculada em um ponto interno ao bilhar e infinitamente próximo da fronteira. A implementação numérica da eq. (2.11) é trivial: a fronteira pode ser discretizada em N pontos \mathbf{r}_i , o que transforma a equação original em um conjunto de equações lineares nas incógnitas $P_i (= \frac{\partial}{\partial n} \psi(\mathbf{r}_i))$:

$$P_i = -\hbar^2 \sum_{j=1}^N \left[\frac{\partial}{\partial n_i} G_B(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \Delta l_j \right] P_j$$

cuja solução é possível se for satisfeita a condição:

$$\det \left\{ \delta_{ij} + \hbar^2 \frac{\partial}{\partial n_i} G_B(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \Delta l_j \right\} = 0 .$$

Berry & Wilkinson [26] usaram essa equação para calcular os primeiros níveis de energia de um bilhar com fronteira triangular e sem campo magnético (nesse caso, G_B é substituída por G_0). Porém, ela não se mostrou muito eficiente para o bilhar elíptico com campo magnético, mesmo sendo possível calcular com boa precisão a função de Green correspondente, apresentada no capítulo anterior. Uma possível razão para isso é que o *kernel* da equação, $\frac{\partial}{\partial n} G_B$, é pouco estável com relação à discretização de uma fronteira curva, o que não acontecia com o *kernel* original.

O segundo método testado foi uma adaptação da "expansão em ondas parciais" [12]. Nele, voltamos a usar as equações integrais (2.4) e (2.5), com a função de Green livre derivada no capítulo anterior. Como é usual, discretizamos a fronteira, definimos um vetor $P_i = \frac{\partial}{\partial n} \psi(\mathbf{r}_i)$ e montamos um sistema de equações lineares nas incógnitas P_i a partir da equação homogênea. Uma outra equação sai da equação não-homogênea (2.4) com \mathbf{r} em um ponto qualquer dentro do bilhar. O valor de $\psi(\mathbf{r})$ nesse ponto pode ser escolhido arbitrariamente como 1. Para facilitar o uso de propriedades de simetria, é conveniente escolher esse ponto sobre um eixo de simetria do bilhar, como os eixos principais no caso do bilhar elíptico.

A diferença com o método anterior é que, agora, mantemos o sistema com menos equações que incógnitas, o que equivale dizer: devemos calcular a integral acima em menos pontos \mathbf{r} que o número de pontos discretizados da fronteira. Dessa forma, o sistema linear não-homogêneo terá alguma solução possível, embora normalmente tenha várias delas. Uma solução conveniente pode ser obtida pelo algoritmo SVD, *Singular Value Decomposition* (maiores detalhes, ver [24], seção 2.6). Com a solução para P_i , podemos usar novamente a eq. (2.5) para calcular $|\psi|^2$ em novos pontos da fronteira, diferentes daqueles em que ψ foi arbitrada nula. Em geral, a soma de $|\psi|^2$, chamada "tensão", nesses novos pontos não é nula. O procedimento então é calcular a tensão como função da energia e verificar quando ela se torna pequena, o que deve ocorrer sobre os autovalores de energia.

Esse método é mais flexível pois a liberdade na escolha de pontos é maior, embora ele envolva manipulação numérica mais extensa que o método

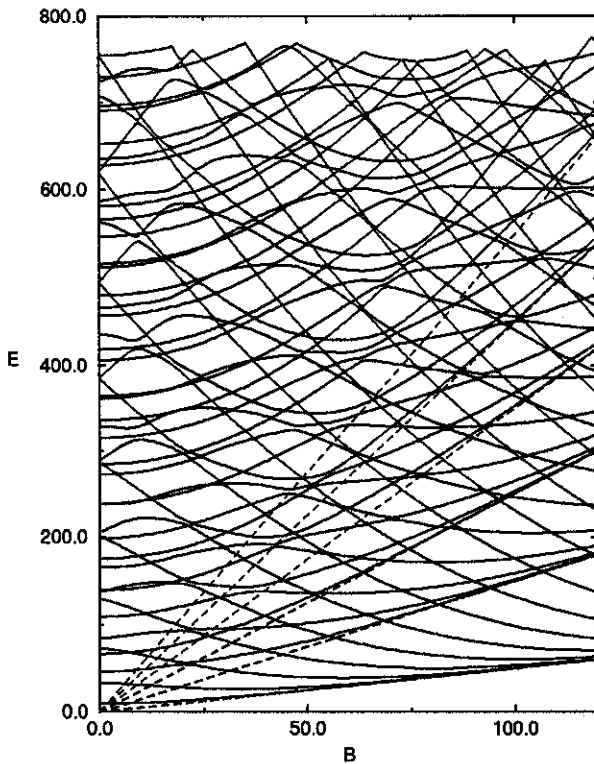


Figura 2.1: 55 primeiros níveis de simetria par do bilhar elíptico, $\epsilon = 0.8$ e área \mathcal{A} unitária; as linhas tracejadas representam os seis primeiros níveis de Landau. Adotamos unidades naturais, $\hbar = m = e = 1$

original. É preciso por exemplo garantir que, após obtida a solução P_i , a função de onda correspondente seja normalizada. Isso se faz calculando a norma numérica de ψ dentro do bilhar e multiplicando o vetor P_i por uma constante para ajustar essa norma a 1. Além disso, também devemos garantir que, em um autovalor numérico, a tensão seja realmente pequena para qualquer escolha de pontos na fronteira.

Em geral, esse método não se mostrou tão rápido quanto o método de fronteira anterior, embora seus resultados sejam comparáveis. A grande força da expansão em ondas parciais é realmente o cálculo de autovalores no limite de altíssima energia, enquanto o nosso interesse nunca foi ir tão longe no espectro.

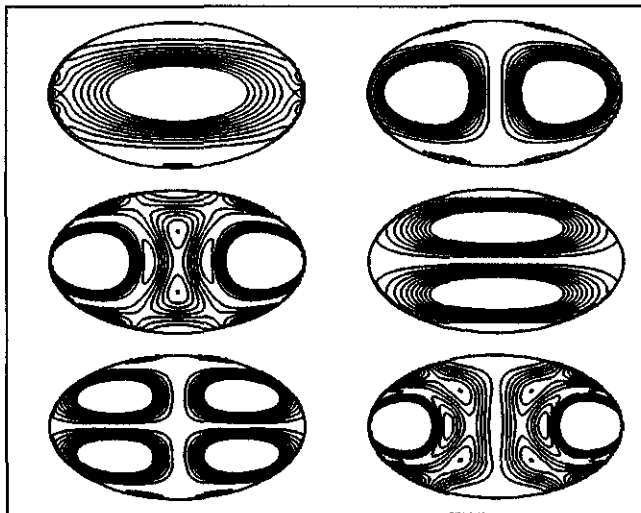


Figura 2.2: Curvas de nível das 6 primeiras autofunções de energia do bilhar elíptico, calculadas em valor absoluto. O campo magnético é correspondente a meio quantum de fluxo magnético através do bilhar. À esquerda, aparecem as autofunções de simetria par e, à direita, as de simetria ímpar

2.5 Resultados numéricos: os níveis de energia do bilhar elíptico

Usando a condição de quantização $\det\{f_{ll}\}$, pudemos calcular os 800 primeiros níveis de energia (somando as duas classes de simetria), com precisão numérica de pelo menos 8 dígitos significativos, para um bilhar de excentricidade $\epsilon = 0.8$. A figura 2.1 mostra a energia dos 55 primeiros níveis de paridade par, como função do campo magnético. Mostramos também os níveis de energia de bilhar circular com área unitária, a título de comparação (fig. 2.3). Esses níveis foram calculados a partir dos zeros de funções hipergeométricas (seção 2.3).

Também foram calculadas algumas autofunções de energia do bilhar elíptico. O objetivo era também testar se o método numérico é eficiente também para calcular autofunções. Na figura 2.2, estão graficadas as auto-

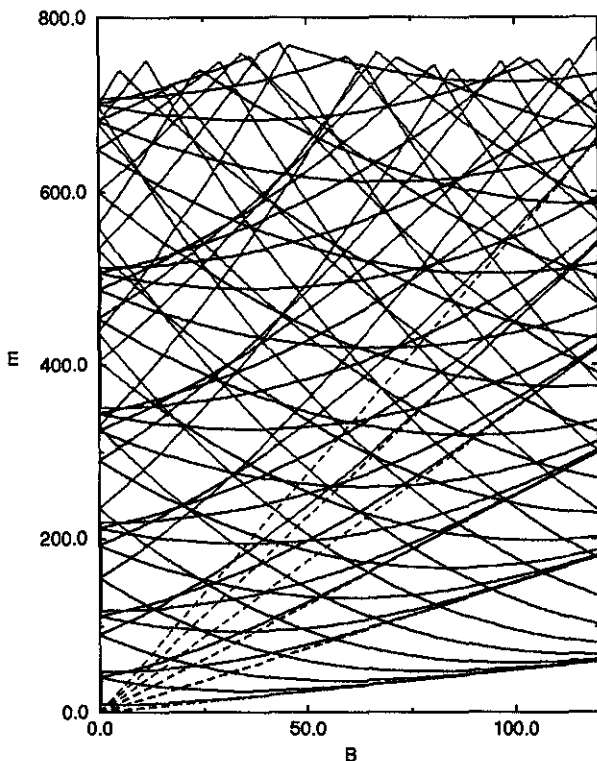


Figura 2.3: 55 primeiros níveis de simetria par do bilhar circular, com área \mathcal{A} unitária; as linhas tracejadas têm o mesmo significado que na figura 2.1

funções (valor absoluto) correspondentes ao estado fundamental e ao primeiro estado excitado do bilhar elíptico.

Uma característica importante dos níveis do bilhar circular é a ocorrência de degenerescências acidentais ("cruzamentos" entre as linhas de dois níveis em um valor específico de campo magnético). No bilhar elíptico, em comparação, estas são substituídas por "quase degenerescências", quando dois níveis se aproximam bastante mas não chegam a se cruzar realmente. Esse efeito é conhecido como "repulsão de níveis" (*avoided crossings*), e é uma característica marcante de sistemas com dinâmica clássica caótica [6, 26]. De fato, a presença do campo magnético destrói a integrabilidade do bilhar elíptico, enquanto o bilhar circular permanece integrável em presença do campo.

Por outro lado, o regime de campo alto, $E \ll \hbar B$, é caracterizado por

um suave agrupamento de níveis em pacotes igualmente espaçados, presentes tanto no espectro do círculo quanto no da elipse. Esses pacotes são associados aos níveis de Landau, discutidos na pág. 21. É interessante que, nesse regime de campo alto, os espectros de ambos os sistemas sejam semelhantes, embora eles se distingüam fundamentalmente quanto à integrabilidade. Nesse regime, a dinâmica quântica é dominada pelo campo magnético, que tende a tornar regulares todos os sistemas, e a fronteira deixa de desempenhar um papel decisivo no espectro de autovalores.

Capítulo 3

Um Gás de elétrons em campo magnético

Nos últimos anos, o interesse por sistemas mesoscópicos tem crescido consideravelmente, tanto pela possibilidade de realizar experimentos com esses sistemas quanto pela existência de teorias capazes de explicar alguns de seus efeitos. Como foi citado na introdução, microestruturas balísticas são satisfatoriamente modeladas por bilhares quânticos, populados por férmions não-interagentes, e todo o ferramental conhecido de bilhares torna-se útil. É possível construir modelos de gases quânticos confinados usando as estatísticas de Gibbs.

Esse capítulo é dedicado á análise termodinâmica do gás bidimensional. Na seção 3.1, exporemos brevemente a teoria termodinâmica do gás de acordo com uma estatística grand-canônica. Pode-se mostrar que, por essa descrição, a susceptibilidade média do gás é igual à susceptibilidade de Landau. Esse será o tema das seções 3.2 e 3.3. Na seção 3.4, descreveremos as propriedades do gás numa estatística canônica.

3.1 Termodinâmica de um gás de elétrons: ensemble grand-canônico

Para tratar corretamente a termodinâmica de um gás de elétrons, é necessário estabelecer o conjunto de variáveis termodinâmicas. Existem dois conjuntos principais de variáveis a serem escolhidos, que geram descrições

diferentes: a descrição por um *ensemble grand-canônico* e a descrição por um *ensemble canônico*.

Na primeira, o estado do gás é caracterizado pelas seguintes variáveis: potencial químico μ , temperatura T , campo externo B e área \mathcal{A} . O potencial grand-canônico Ω armazena toda a informação termodinâmica do sistema, e é definido por:

$$\Omega(T, \mu, B, \mathcal{A}) = -g_s \frac{1}{\beta} \int_0^\infty \rho(E) \ln [1 + e^{\beta(\mu-E)}] dE . \quad (3.1)$$

onde $\beta = 1/k_B T$ (k_B é a constante de Boltzmann). Nessa equação introduzimos a função *densidade de níveis*, $\rho(E) = \sum_n \delta(E - E_n)$. Em cada um dos níveis quânticos de energia, essa função tem um pico do tipo delta de Dirac. Integrada de $E = 0$ a $E = E'$, ela fornece o número de níveis com energia menor que E' . O fator g_s é igual a 2 e corrige a degenerescência de spin (não levamos em conta o acoplamento spin-campo magnético). As outras quantidades termodinâmicas são obtidas a partir de Ω , como por exemplo o número médio de partículas no gás,

$$N = -\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = g_s \sum_n \frac{1}{1 + e^{(E_n - \mu)\beta}} , \quad (3.2)$$

a densidade média de partículas,

$$D_{gce} = \frac{\partial N}{\partial \mu} = -\frac{\partial^2 \Omega}{\partial \mu^2} ,$$

a magnetização,

$$M_{gce} = -\frac{\partial \Omega}{\partial B} = -g_s \sum_n \frac{1}{1 + e^{(E_n - \mu)\beta}} \frac{\partial E_n}{\partial B} , \quad (3.3)$$

e a susceptibilidade por unidade de área,

$$\chi_{gce} = \frac{1}{\mathcal{A}} \frac{\partial M_{gce}}{\partial B} = -\frac{1}{\mathcal{A}} \frac{\partial^2 \Omega}{\partial B^2} .$$

Um resultado importante dessa descrição é que as quantidades físicas a temperatura finita podem ser obtidas a partir das correspondentes em temperatura nula por uma integral de convolução:

$$\Omega(T, \mu, B, \mathcal{A}) = - \int_0^\infty \Omega(T = 0, E, B, \mathcal{A}) f'(E - \mu) dE, \quad (3.4)$$

$$N(T, \mu, B, \mathcal{A}) = - \int_0^\infty N(T = 0, E, B, \mathcal{A}) f'(E - \mu) dE, \quad (3.5)$$

$$\chi(T, \mu, B, \mathcal{A}) = - \int_0^\infty \chi(T = 0, E, B, \mathcal{A}) f'(E - \mu) dE, \quad (3.6)$$

e assim por diante, onde $f'(x) = \frac{d}{dx} f(x)$ e $f(x)$ é a distribuição de Fermi:

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{\beta x}}. \quad (3.7)$$

Freqüentemente, nos referiremos a $\Omega(T = 0, E, B, \mathcal{A})$ simplesmente como Ω_0 , o índice 0 se referindo a temperatura nula. As expressões de convolução são úteis quando tratamos de um gás quase-degenerado, no qual a temperatura é tão pequena que os níveis de energia mais baixos estão quase completamente populados, com poucos elétrons sendo promovidos para níveis de energia acima do nível de Fermi. Nesse regime, a função $f'(E - \mu)$ é grande somente quando $(E - \mu)$ é da ordem de $k_B T$.

Existe um outro limite termodinâmico em que as expressões simplificam bastante: o limite de altas temperaturas, no qual a distribuição de Fermi pode ser substituída por uma distribuição do tipo Maxwell-Boltzmann, $e^{-\beta E}$. Esse limite é interessante do ponto de vista analítico, mas não será tratado nessa dissertação. Boas referências para o gás de elétrons magnetizado nesse limite podem ser [28, 29].

3.2 Susceptibilidade de Landau

Historicamente, a teoria de Landau para um gás magnetizado foi bastante importante porque chamou a atenção de todos para um problema fundamental: a resposta magnética de um gás sob ação de um campo externo uniforme. Em 1930, Lev D. Landau [22] resolveu o problema através de um método essencialmente quântico, e que gerou muitas discussões principalmente por descrever um fenômeno sem análogo clássico.

Classicamente, o campo magnético só é capaz de alterar a trajetória dos elétrons no gás, sem modificar sua energia. Por isso, não se espera susceptibilidade magnética de origem clássica. Isso é o que diz o teorema de

Bohr-van Leeuwen [30]. Quanticamente, existem dois fenômenos competindo: interação spin-campo externo, que gera a susceptibilidade de spin, também chamada *susceptibilidade de Pauli* [28]; e quantização de órbitas periódicas, que resulta na susceptibilidade orbital. Esse último fenômeno foi estudado por Landau [22], que calculou a susceptibilidade de um gás de férmions e provou que, no limite termodinâmico, esta é bem menor que a de Pauli. Com justo merecimento, essa susceptibilidade foi batizada com o nome de seu descobridor.

Algumas particularidades do modelo de Landau tornaram difícil a sua aceitação inicial. Em primeiro lugar, a derivação inicial usava explicitamente o conhecimento dos níveis de energia quantizados e falhava completamente se alguém tentasse introduzir efeitos de confinamento do gás. Posteriormente, Sondheimer e Wilson [31] confirmaram o resultado de Landau em uma derivação que dispensava o conhecimento dos níveis de energia quantizados. Em sistemas finitos, um argumento simples de Peierls [32] mostrou que a magnetização das órbitas de superfície, abertas, anula exatamente a das órbitas ciclotrônicas do interior, resultando em susceptibilidade orbital nula, de acordo com o teorema de Bohr-van Leeuwen.

Do lado experimental, o fato de a susceptibilidade de Landau ser extremamente pequena certamente dificultou sua detecção.

3.3 Correções de fronteira na susceptibilidade de Landau

Recentemente, foi possível obter o resultado de Landau usando argumentos extremamente gerais, inclusive sendo possível obter correções de fronteira a esse resultado [8, 29]. Em [8], foi apresentado um cálculo semiclássico aplicável para potenciais confinantes que podem ser tanto suaves quanto abruptos, como bilhares. Esse cálculo leva em consideração o método semiclássico de Wigner, definindo transformadas de Wigner dos operadores quânticos relevantes. Uma deficiência desse cálculo é que ele não fornece explicitamente as correções de fronteira.

Robnik [29] desenvolveu um cálculo alternativo, capaz de fornecer tais correções de fronteira sobre o termo principal. O raciocínio desta vez foi bem diferente, a começar pelo ensemble usado: canônico, em lugar do

grand-canônico. Como o interesse era apenas caracterizar o valor médio de χ , desprezando correções oscilatórias, a escolha do ensemble termina sendo um detalhe menor. Além disso, o sistema explorado foi um gás aprisionado em um tronco cilíndrico de altura l_0 , gerado pela translação da base ao longo das linhas de campo. A base tem fronteira suave e é caracterizada pela área \mathcal{A} e perímetro \mathcal{L} . A susceptibilidade foi relacionada com a densidade de níveis da forma usual:

$$\chi = \frac{1}{l_0 \mathcal{A}} \left(\frac{g_s}{\beta} \right) \frac{\partial^2}{\partial B^2} \int \rho(E) \log [1 + e^{-\beta(E-\mu)}] dE ,$$

onde $\rho(E) = \sum_n \delta(E - E_n)$. No limite de altas energias, a densidade de níveis pode ser substituída por um valor médio, que depende da proximidade das funções delta, somado a correções oscilatórias. Interferências construtivas e destrutivas entre essas contribuições são capazes de compor novamente os picos sobre as energias E_n , exatamente como uma função delta pode ser formada somando-se todos os termos de sua expansão em série de Fourier. Essas contribuições normalmente são pequenas no limite semiclássico. O ponto chave aqui é obter o valor médio de ρ .

A proposta de Robnik foi relacionar ρ e a extensão analítica em tempo imaginário de K , o propagador, por uma transformada inversa de Laplace:

$$\rho(E) = \mathcal{L}_{E,\beta}^{-1} \left\{ \sum_n e^{-\beta E_n} \right\} = \mathcal{L}_{E,\beta}^{-1} \{ \text{Tr} [K(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; -i\hbar\beta)] \} ,$$

onde usamos a notação \mathcal{L} , para transformada de Laplace:

$$\mathcal{L}_{t,s} \{ f(t) \} = \int_0^\infty f(t) e^{-st} dt ,$$

e \mathcal{L}^{-1} a sua anti-transformada. O propagador K usado foi o propagador livre, i.e. sem fronteira, somado a uma correção devida à fronteira. O resultado final foi:

$$\chi = \chi_L \left[1 - \frac{3\pi\mathcal{L}}{8\mathcal{A}k_0} - \frac{\pi}{4k_0 l_0} \right] ,$$

onde $\chi_L = -\frac{e^2 k_0}{12\pi^2 c^2}$ é a susceptibilidade de Landau para esse sistema, e $k_0 = \frac{\sqrt{2E_f}}{\hbar}$ é o número de onda de Fermi.

Esse resultado foi comentado depois por John e Suttorp [33], que questionaram a validade de algumas hipóteses usadas para obter a correção de fronteira do propagador.

O problema das correções de fronteira é interessante e, para tentar esclarecer algumas dúvidas quanto à sua expressão, propomos uma derivação alternativa para a primeira correção de fronteira: que envolve o perímetro do bilhar. Nessa derivação, nos restringimos novamente a duas dimensões. Recuperaremos a notação de \mathcal{A} para área e \mathcal{L} (sem subíndices!) para o perímetro do bilhar. O ponto de partida é o potencial grand-canônico a temperatura nula, que denotaremos simplesmente por $\Omega_0(\mu)$, omitindo os demais índices. Esse potencial é uma função do espectro de níveis do sistema e, pela teoria de Stewardson e Waechter [34], pode ser relacionado com a função espectral. Definimos primeiramente essa função como

$$\Phi(s) = -\text{Tr} \{G_\Omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; -s) - G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; -s)\} , \quad (3.8)$$

onde G_Ω é a função de Green exata do bilhar (satisfaz as equações diferenciais (1.4) e as mesmas condições de contorno das autofunções) e G_0 é a função de Green livre e sem campo magnético externo (eq. 1.5):

$$G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \frac{-i}{2\hbar^2} H_0^{(1)}(k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) .$$

As funções Φ e Ω_0 se relacionam exatamente por transformadas de Laplace:

$$\Phi(s) = \mathcal{L}_{t,s} \left\{ -\frac{t^2}{\mathcal{g}_s} \mathcal{L}_{\mu,t} \{ \Omega(\mu) \} - \frac{1}{t} \frac{\mathcal{A}}{2\pi\hbar^2} \right\} . \quad (3.9)$$

A origem da função espectral está na *função espectral regularizada*, ou Resolvente de Berry-Howls [35], definido inicialmente como uma soma sobre níveis:

$$\Phi(s) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\sum_{n=1}^N \frac{1}{E_n + s} - \frac{\mathcal{A}}{2\pi\hbar^2} \log \left(\frac{E_n}{s} \right) \right] .$$

Essa função é importante porque sua aproximação assintótica para s grande pode ser relacionada com a de Ω_0 para μ grande. Mais explicitamente, se Φ obedece a uma expressão assintótica do tipo:

$$\Phi(s) \approx \sum_{i=1}^k c_i \Gamma(1 - r_i) s^{r_i-1} + o\left(s^{r_{k+1}-1}\right), \quad (3.10)$$

com constantes c_i e expoentes positivos r_i ordenados de forma que $r_1 > r_2 > r_3 \dots$ e $r_1 < 1$, então a expressão assintótica de Ω_0 , válida para μ muito grande, é:

$$\Omega_0(\mu) \approx -g_s \frac{\mathcal{A}}{4\pi \hbar^2} \mu^2 - g_s \sum_{i=1}^k \frac{c_i}{\Gamma(2 + r_i)} \mu^{1+r_i} + o\left(\mu^{r_{k+1}+1}\right). \quad (3.11)$$

Essa expansão assintótica não é nada mais que a expansão em alta energia de Ω_0 , descartadas correções oscilatórias se for truncada já nos primeiros termos. Para obter essa expansão, basta podermos calcular a função de Green G_Ω num limite de energia negativa e muito grande. Esse cálculo é trabalhoso e está indicado no apêndice B. Usando o resultado final desse apêndice, encontramos a seguinte expressão média para Ω_0 :

$$\Omega_0(\mu) \approx \Omega_\mu + \Omega_B,$$

onde:

$$\Omega_\mu = -g_s \frac{\mathcal{A}}{4\pi \hbar^2} \mu^2 + g_s \frac{\mathcal{L}}{3\sqrt{2}\pi \hbar} \mu^{3/2} + o\left(\mu^{<3/2}\right),$$

e

$$\Omega_B = g_s \frac{\omega^2 \mathcal{A}}{12\pi} - g_s \frac{3}{64\pi} \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar \omega^2}{\sqrt{\mu}} \mathcal{L} + o\left(\mu^{<-1/2}\right).$$

A dependência em campo magnético aparece apenas em Ω_B , através de ω . Dessas expressões, reconhecemos imediatamente a função número médio de partículas:

$$\bar{N}(\mu, T = 0) = -\frac{\partial}{\partial \mu} \Omega_0 \approx g_s \frac{\mathcal{A}}{2\pi \hbar^2} \mu - g_s \frac{\mathcal{L}}{2\sqrt{2}\pi \hbar} \sqrt{\mu}, \quad (3.12)$$

que contém o termo principal, de Weyl, e a primeira correção de perímetro. A correção de curvatura está incluída nos termos desprezados (ver apêndice B). Uma derivação dessa função incluindo termos de curvatura pode ser encontrada em [35]. Por sua vez, a susceptibilidade grand-canônica média é obtida como:

$$\bar{\chi}_{gce} = -\frac{1}{\mathcal{A}} \frac{\partial^2}{\partial B^2} \bar{\Omega} \approx -\chi_L \left[1 - \frac{9}{16} \frac{\hbar \mathcal{L}}{\sqrt{2\mu} \mathcal{A}} \right], \quad (3.13)$$

onde $\chi_L = \mathbf{g}_s/24\pi$ é a susceptibilidade de Landau para um gás bidimensional. Esses dois últimos resultados são praticamente os mesmos para temperatura nula e temperatura finita. As primeiras correções são de ordem $(k_B T/\mu)^2$.

É importante citar que tratamos a função espectral exclusivamente no regime assintótico. Isso significa que as equações (3.12) e (3.13) são, a rigor, expressões assintóticas respectivamente para o número médio de partículas e a susceptibilidade média. A validade dessas expressões está condicionada a valores de potencial químico tais que $\sqrt{2\mu}l/\hbar \gg 1$, onde l representa alguma dimensão característica do bilhar.

Como Berry e Howls salientaram [35], a expansão em série de potências da função espectral para um bilhar sem campo magnético é uma série cujos coeficientes, a partir de certa ordem, divergem fatorialmente. Esse fenômeno é natural pois a existência de uma expansão em série para a função espectral implicaria necessariamente em uma expansão correspondente para o potencial grand-canônico e portanto para a densidade de níveis. Como essa última função é exatamente uma sucessão de funções delta centradas em cada um dos níveis de energia, a expansão em série de potências desta não poderia convergir.

De fato, a função espectral é útil se estivermos interessados em obter valores médios, e em regime de alta energia, para as funções termodinâmicas. Correções oscilatórias aparecem como uma manifestação da estrutura de órbitas periódicas do problema clássico associado. Na figura 3.1, graficamos a susceptibilidade grand-canônica com uma média gaussiana em potencial químico:

$$\langle \chi \rangle_\mu(T, \mu, B) = \frac{\int d\mu' e^{-\frac{(\mu' - \mu)^2}{2\mu^2 \delta_\mu^2}} \chi(T, \mu', B)}{\int d\mu' e^{-\frac{(\mu' - \mu)^2}{2\mu^2 \delta_\mu^2}}}.$$

A concordância entre a média numérica e a susceptibilidade analítica $\bar{\chi}_{gce}$ é bastante boa, inclusive quando o potencial químico é pequeno, fora do regime assintótico.

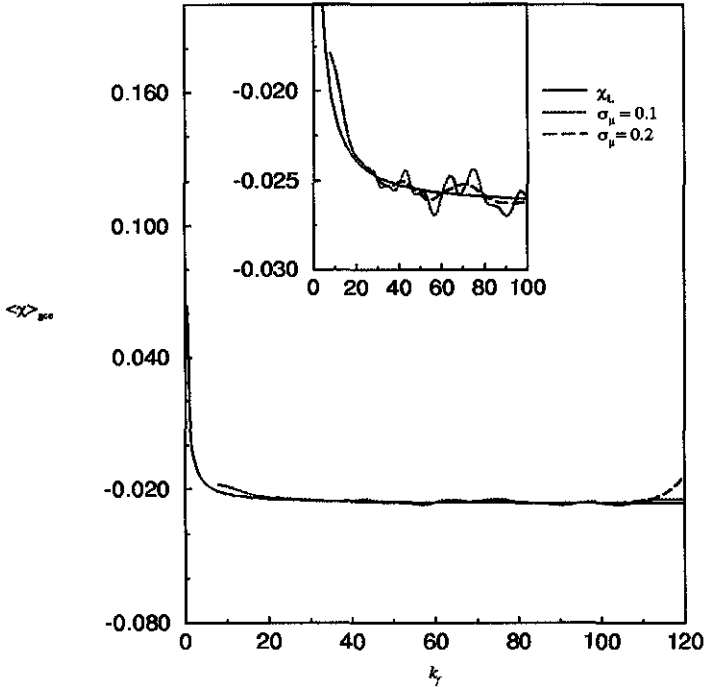


Figura 3.1: Susceptibilidade grand-canônica, com média em potencial químico ($\mu = \hbar^2 k_f^2/2$), para um ensemble de bilhares circulares. A curva cheia é a susceptibilidade média teórica, da eq. (3.13); a curva pontilhada (tracejada) é calculada com $\delta_\mu = 0.1$ (0.2). Os demais parâmetros são: $B = 37.7$ (6 quanta de fluxo magnético através de cada bilhar) e $k_B T = 5\Delta$. $\Delta = 2\pi\hbar^2/\mathcal{A}$ é o espaçamento médio de níveis. Na inserção ao alto, um detalhe das oscilações em k_f

3.4 Gás de elétrons: ensemble canônico

A descrição de um gás de elétrons em um ensemble canônico considera que o estado do gás é caracterizado pelos parâmetros termodinâmicos N, T, B, \mathcal{A} (N é o número de partículas). Em geral, essa descrição é mais realista que a anterior, pois o número de partículas é mais facilmente controlável que o potencial químico. Um gás canônico é facilmente construído: basta agrupar as partículas numa cavidade fechada, em contato térmico com o laboratório, mas proibindo a entrada ou fuga de partículas do gás. Em outras palavras, a parede do gás deve ser diatérmica e rígida. Por outro lado, um gás grand-canônico deve ser capaz de trocar calor e partículas com

o exterior. A parede do gás grand-canônico deve ser diatérmica e porosa, de forma que partículas possam atravessá-la até que se estabeleça equilíbrio entre o fluxo de matéria do gás para o exterior e o fluxo de matéria do exterior para dentro do gás.

Apesar de experimentalmente simples, o tratamento teórico de um gás nesse ensemble não é tão trivial quanto num ensemble grand-canônico. O ponto de partida para calcular as propriedades termodinâmicas do gás é a função de partição canônica:

$$\mathcal{Z} = \sum_{\bar{n}} \exp \left[\frac{-E_{\bar{n}}}{k_B T} \right], \quad (3.14)$$

onde a soma é feita sobre todos os \bar{n} estados acessíveis ao sistema com N partículas, e $E_{\bar{n}}$ é a energia (total) do sistema em cada um desses estados. As grandezas termodinâmicas são obtidas a partir de derivadas de \mathcal{Z} , por exemplo (em algumas expressões a seguir, omitiremos o parâmetro termodinâmico \mathcal{A} quando for possível):

$$\text{energia total: } \bar{E}(T, N, B) = -\frac{\partial}{\partial \beta} (\ln \mathcal{Z})$$

$$\text{potencial químico: } \mu(T, N, B) = -k_B T \frac{\partial}{\partial P} (\ln \mathcal{Z})$$

$$\text{magnetização: } M_{ce}(T, N, B) = k_B T \frac{\partial}{\partial B} (\ln \mathcal{Z})$$

$$\text{susceptibilidade: } \chi_{ce}(T, N, B) = \frac{1}{\mathcal{A}} \frac{\partial}{\partial B} M_{ce} = \frac{k_B T}{\mathcal{A}} \frac{\partial^2}{(\partial B)^2} (\ln \mathcal{Z}).$$

Porém, a eq. (3.14) não pode ser usada para calcular \mathcal{Z} na maioria dos casos práticos, porque o número de estados acessíveis cresce rapidamente com N , embora a maioria dos estados (especialmente aqueles com alta energia) dê uma contribuição exponencialmente pequena para a soma. A título de exemplo, se $N = 10$ e se usamos os 60 primeiros níveis de energia do bilhar (ou seja, admitimos que o espectro de energia pode ser truncado em um espectro finito de $P = 60$ níveis, cada um duplamente degenerado), então o número de estados acessíveis ao sistema é:

$$\bar{N} = \frac{(120)!}{(120 - 10)!(10)!} \approx 10^{32}.$$

Se $P = 100$ e $N = 600$, esse número cresce para 10^{341} (!). Uma forma mais prática de se calcular a função de partição é a partir do algoritmo de recorrência [36]. Esse algoritmo permite que se calcule $\mathcal{Z}(N, P)$, a função de partição de um sistema com N partículas e P níveis, recursivamente a partir de $\mathcal{Z}(N - 1, P - 1)$ e $\mathcal{Z}(N, P - 1)$. Em cada passo, retira-se uma partícula e/ou um nível, até chegar em $\mathcal{Z}(N = 0, P)$, que é fixado igual a 1 para todo P (isso significa que a função de partição é definida como 1 se o sistema não contiver nenhuma partícula). A vantagem desse algoritmo é introduzir uma manipulação entre várias funções de partição, em lugar de efetuar diretamente a soma (3.14). Além disso, ele mostrou-se extremamente eficiente em sistemas mesoscópicos.

Um método alternativo de calcular as grandezas termodinâmicas é a partir de expressões válidas no ensemble grand-canônico, ajustando o potencial químico de forma que o número de partículas permaneça constante. Nesse caso, a magnetização ainda é dada pela expressão grand-canônica (3.3):

$$M(T, N, B) = -g_s \sum_n \frac{1}{1 + e^{(E_n - \mu)\beta}} \frac{\partial E_n}{\partial B},$$

mas onde μ não é constante, e sim uma função de N , dada implicitamente pela condição (3.2):

$$N = g_s \sum_n \frac{1}{1 + e^{(E_n - \mu)\beta}}.$$

Para temperaturas suficientemente pequenas, essa equação pode ser resolvida facilmente por algum método numérico. Com μ conhecido, calcula-se M e $\chi(T, N, B) = \frac{\partial}{\partial B} M$. Esse método é mais simples que o algoritmo recursivo e, no regime mesoscópico que estamos tratando, fornece basicamente os mesmos resultados [37]. Na verdade, não parece trivial que seja possível obter informação sobre quantidades grand-canônicas a partir de fórmulas válidas no ensemble canônico. No entanto, isso acontece nesse regime de gás quase-degenerado, em que a escala de energia térmica $k_B T$ é da ordem do espaçamento médio de níveis e a probabilidade de os primeiros níveis de energia estarem desocupados é desprezível.

Capítulo 4

Susceptibilidade Média: o Modelo Semiclássico

Uma das grandes vitórias da Caologia Quântica, ou Semiclássica, é sem dúvida a descoberta de que propriedades do espectro de um sistema quântico se relacionam com as órbitas periódicas do sistema clássico correspondente. Em especial, Gutzwiller [2] mostrou que a densidade de níveis, excluída a parte estacionária, pode ser escrita como uma soma sobre parâmetros de órbitas periódicas (OP). A Fórmula do Traço de Gutzwiller é válida quando estas são, em algum sentido, distantes entre si. Isso ocorre em sistemas completamente caóticos. Para sistemas regulares, as OP se agrupam em famílias, dentro das quais cada órbita pode ser associada a um parâmetro contínuo. Para esse caso, a Fórmula de Berry-Tabor [3] é mais conveniente.

Nesse capítulo, discutiremos como se obter a expressão semiclássica para a densidade oscilatória de níveis, exemplificando nos casos de estudo: o bilhar circular e o bilhar elíptico com campo magnético. Se a intensidade do campo for suficientemente baixa (i.e., que o raio de ciclotron muito grande em comparação com algum comprimento típico do bilhar), é justificado usar a fórmula de Berry-Tabor, admitindo que as OP do bilhar em campo baixo são bem aproximadas pelas correspondentes em campo nulo. Note que isso nem sempre é verdade. À medida que o campo magnético aumenta, fenômenos de bifurcação passam a ocorrer e a estrutura de órbitas periódicas muda completamente. Nas últimas seções, calcularemos a susceptibilidade semiclássica do bilhar.

4.1 Densidade oscilatória de níveis

Vamos ver aqui como obter a densidade oscilatória $\tilde{\rho}$. Partindo alternativamente da teoria de Einstein-Brillouin-Keller ou da representação de ρ em termos do propagador semiclássico, Berry e Tabor [3] puderam derivar uma expressão para a densidade oscilatória que envolve apenas somas sobre órbitas periódicas do sistema clássico, integrável, correspondente. O fato de existir uma ligação entre órbitas periódicas clássicas e o espectro quântico já estava presente nos trabalhos pioneiros de Balian e Bloch [38], no caso de partículas presas numa cavidade tridimensional, e Gutzwiller [2], para sistemas caóticos. A extensão para sistemas classicamente integráveis aparecendo um pouco depois.

De acordo com a teoria de Berry-Tabor, a densidade oscilatória de níveis é dada por uma soma sobre inteiros (M_1, M_2) da quantidade

$$\rho_M = \int_{\text{superfície de energia}} \frac{1}{|\nu(\mathbf{I}, \xi)|} e^{2i\pi M_1 I_1(\xi) + M_2 I_2(\xi)} d\xi .$$

onde ν é o vetor de frequências clássicas, $\nu_1 = dE/dI_1$, $\nu_2 = dE/dI_2$ e a integral é feita sobre toda a superfície de energia disponível, parametrizada por ξ . Para sistemas com dois graus de liberdade, essa superfície é uma linha. Para sistemas com $n > 2$ graus de liberdade, a extensão é imediata, com a superfície de energia tendo $n - 1$ dimensões. I_1, I_2 são as variáveis de ação do sistema.

A fórmula de Berry-Tabor foi aplicada depois em vários sistemas importantes, sempre com bons resultados. Uma aplicação interessante dessa fórmula foi feita por Terra *et al.* [39], que estudaram a susceptibilidade magnética exata de um oscilador harmônico bidimensional.

Devido à presença do fator $i(\text{Ação})/\hbar$, a integral sobre ξ pode ser feita por fase estacionária, para sistemas com dois graus de liberdade. Isso faz com que haja contribuição significativa apenas para aqueles valores de (I_1, I_2) tais que a ação, $M_1 I_1 + M_2 I_2$, assumam um valor extremo. Podemos interpretar ρ_M como a contribuição de uma órbita periódica clássica de ação $M_1 I_1 + M_2 I_2$ e energia E . Na nomenclatura original, órbitas desse tipo foram chamadas de órbitas pertencentes à família de *topologia* $\mathbf{M} = (M_1, M_2)$. Essas órbitas executam M_1 oscilações na coordenada angular ϕ_1 e M_2 oscilações na coordenada angular ϕ_2 antes de se fechar. Calculada a integral, obtemos:

$$\rho_M = \frac{1}{\pi \hbar^{3/2}} \frac{T_M}{|(M_2)^3 g_E|^{1/2}} \cos \left(\frac{S_M}{\hbar} - \eta_M \frac{\pi}{2} + \sigma \frac{\pi}{4} \right). \quad (4.1)$$

onde aparecem alguns poucos parâmetros, constantes para todas as órbitas da família (M_1, M_2) :

período: T_M

ação: S_M

índice de Maslov: η_M

curvatura: $g_E = \left(\frac{d^2 I_2}{dI_1^2} \right)_E$

sinal da curvatura : $\sigma = \text{sign}(g_E)$.

Por curvatura g_E entendemos a curvatura da linha dada implicitamente pela identidade $E = H(I_1, I_2)$.

Grinberg, Ullmo e Tomsovic [40] estenderam essa equação para sistemas quase-integráveis. Se a perturbação não-integrável na Hamiltoniana for suficientemente pequena, eles puderam mostrar que a eq. (4.1) é aproximadamente válida se for acrescentada na ação original, chamada $S_{0,M}$ uma correção perturbativa δS , com os demais parâmetros calculados na família não perturbada. Em geral, a correção δS varia de órbita para órbita dentro da mesma família. Nesse caso, é preciso introduzir um parâmetro angular θ_1 capaz de rotular todas as órbitas da família. Com isso, a contribuição oscilatória da família é:

$$\rho_{(M_1, M_2)} = \frac{1}{\pi \hbar^{3/2}} \frac{T_M}{|(M_2)^3 g_E|^{1/2}} \mathcal{R} \left\{ e^{i \left(\frac{S_{0,M}}{\hbar} - \eta_M \frac{\pi}{2} + \sigma \frac{\pi}{4} \right)} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i\delta S/\hbar} d\theta_1 \right\} .$$

No bilhar circular, a introdução de um campo magnético ortogonal não quebra a integrabilidade. Os toros ressonantes ainda existem para campo magnético finito, embora estejam um pouco distorcidos. Esse é um exemplo de sistema em que a expressão (4.1) é aplicável [41]. Por outro lado, os bilhares de fronteira quadrada e fronteira elíptica deixam de ser integráveis em campo externo. Porém, se o raio de ciclotron for pequeno em comparação com as dimensões do bilhar, então as órbitas reais podem ser bem aproximadas por órbitas do problema sem campo magnético. Nesse regime perturbativo,

a eq. acima é aplicável. Quando o campo magnético é grande, correspondente a um fluxo magnético através do bilhar de vários quanta, então essa aproximação pode se tornar grosseira.

A introdução do campo magnético também provoca um fenômeno importante, presente inclusive no bilhar circular: a quebra de simetria por inversão temporal. Pares de órbitas relacionadas entre si por inversão temporal se separam espacialmente. Isso se reflete claramente na correção δS . Uma boa aproximação para essa correção é obtida calculando a ação $\int \mathbf{p} d\mathbf{q}$ sobre uma órbita não perturbada mas substituindo \mathbf{p} por $\dot{\mathbf{r}} + \mathbf{A}$. Essa álgebra resulta em $\delta S = BA_M$, onde A_M é a área orientada limitada pela órbita: positiva se a órbita circunda essa área no sentido anti-horário e negativa no caso contrário. Para cada um dos pares de órbitas, a área de uma órbita será o negativo da área da outra. Somando as contribuições de pares de órbitas, a densidade oscilatória da família (M_1, M_2) é:

$$\rho_M = \frac{1}{\pi \hbar^{3/2}} \frac{T_M}{|(M_2)^3 g_E|^{1/2}} \cos\left(\frac{S_{0,M}}{\hbar} - \eta_M \frac{\pi}{2} + \sigma \frac{\pi}{4}\right) \frac{1}{\pi} \int_0^{2\pi} \cos\left(\frac{1}{\hbar} BA_M\right) d\theta_1. \quad (4.2)$$

onde ressurgem as órbitas do problema integrável, e o campo magnético aparece apenas na integração. Para famílias de órbitas com área nula (ou seja, em que cada órbita recai nela própria por uma operação de inversão temporal), a contribuição é metade da apresentada acima.

4.2 Densidade oscilatória de níveis para o bilhar circular

Vamos exemplificar o cálculo da densidade oscilatória para o caso do bilhar de fronteira circular do capítulo 2. Esse bilhar é bastante especial pois preserva integrabilidade mesmo na presença de campo magnético. Embora já exista uma teoria de órbitas periódicas para ele em campo magnético arbitrário [41], vamos nos restringir ao regime perturbativo, exposto na seção anterior. O ponto principal aqui é conhecer as famílias de órbitas periódicas do problema sem campo. Para isso, tomamos o caminho padrão: aproveitando a integrabilidade do problema, definimos coordenadas de ângulo-ação e obtemos as constantes de ação para cada família [8]. Para uma boa revisão

da teoria de Hamilton-Jacobi e variáveis de ângulo-ação, recomendamos o texto clássico de H. Goldstein [42].

O sistema de coordenadas mais apropriado é evidentemente coordenadas polares (r, θ) , no qual o Hamiltoniano clássico se escreve como

$$H = \frac{1}{2}p_r^2 + \frac{1}{2} \frac{p_\theta^2}{r^2} .$$

Como o momento angular p_θ é uma constante de movimento, podemos escrever os momentos em termos de algum par de constantes de movimento conhecidas. Uma escolha possível é a energia E e a constante $\alpha = \frac{p_\theta^2}{2ER^2}$ (R é o raio do bilhar). Em termos dessas constantes, encontramos $|p_r| = \sqrt{2ER}\sqrt{1-\alpha}$, $|p_\theta| = \sqrt{2E\alpha}R$. As variáveis de ação do problema são definidas em termos de integrais invariantes:

$$I_r = \frac{1}{2\pi} \oint_{\Gamma_r} p_r dr$$

$$I_\theta = \frac{1}{2\pi} \oint_{\Gamma_\theta} p_\theta d\theta ,$$

onde cada integral é calculada ao longo de um ciclo completo da coordenada de integração. Efetuando o cálculo, obtemos o seguinte resultado:

$$I_r = \frac{\sqrt{2ER}}{\pi} \left\{ \sqrt{1-\alpha} - \sqrt{\alpha} \arccos \sqrt{\alpha} \right\}$$

$$I_\theta = p_\theta .$$

Para valores quaisquer das constantes (E, α) , uma trajetória genérica não é periódica exceto quando a partícula percorre alguns ciclos completos (digamos M_r) em r ao mesmo tempo em que percorre M_θ ciclos completos em θ . Isso ocorre quando as frequências associadas às ações I_r e I_θ são comensuráveis:

$$\frac{\nu_\theta}{\nu_r} = \frac{M_\theta}{M_r} .$$

Cada uma dessas frequências pode ser obtida por diferenciação da energia, $\nu_r = (\partial E / \partial I_r)_{I_\theta}$ e $\nu_\theta = (\partial E / \partial I_\theta)_{I_r}$. Manipulando derivadas parciais, encontramos a seguinte expressão para a razão de frequências:

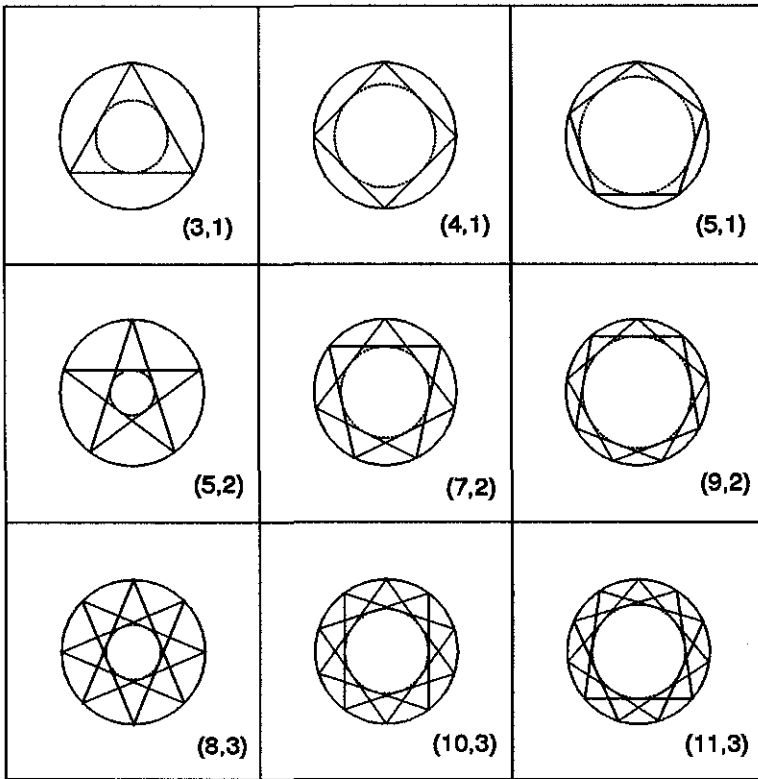


Figura 4.1: Algumas famílias de órbitas periódicas do bilhar circular. Cada família (M_r, M_θ) tem uma cáustica circular, de raio $R\sqrt{\alpha}$. A topologia (M_r, M_θ) está indicada

$$\frac{\nu_\theta}{\nu_r} = - \left(\frac{\partial I_r}{\partial I_\theta} \right)_E = \frac{\arccos \sqrt{\alpha} |p_\theta|}{\pi p_\theta}, \quad (4.3)$$

que deve ser um número racional. Dada a topologia (M_r, M_θ) , com $M_r > 2|M_\theta|$, podemos obter facilmente o valor de α correspondente impondo que a razão (4.3) seja igual ao racional M_θ/M_r . Famílias de órbitas existem apenas para alguns valores de α , aqueles que obedecem a condição de comensurabilidade, e elas podem ser rotuladas pelo par de inteiros (M_r, M_θ) . Algumas órbitas periódicas desse bilhar, as mais curtas, estão traçadas na figura 4.1. As propriedades importantes de cada família são as seguintes:

Índice de Maslov

Cada interseção entre a órbita e a parede do bilhar faz o índice de Maslov aumentar de duas unidades, e cada vez que a órbita passa por uma cáustica dentro do bilhar esse índice aumenta de uma unidade. Contabilizando todas as interseções, o índice de Maslov de cada família é dado por

$$\eta_M = 3M_r$$

Ação

A ação da órbita pode ser calculada em termos do comprimento da órbita:

$$S_{0,M} = \sqrt{2E}L_M = 2\sqrt{2E}RM_r \sin\left(\frac{\pi M_\theta}{M_r}\right)$$

Curvatura

A curvatura g_E é simplesmente uma derivada de segunda ordem, calculada a energia constante: $g_E = (\partial^2 I_r / \partial I_\theta^2)$. Para o bilhar circular, essa função é

$$G_E = \frac{1}{\sqrt{2ER}\pi} \frac{1}{\sin\left(\frac{\pi M_\theta}{M_r}\right)}$$

Área

Todas as órbitas de uma mesma família têm a mesma área orientada, dada por

$$A_M = \frac{R^2}{2} M_r \sin\left(\frac{2\pi M_\theta}{M_r}\right) .$$

Isso é uma manifestação da integrabilidade do problema. A integral de área na eq. (4.2) é

$$\int_0^{2\pi} \cos\left(\frac{1}{\hbar} B A_M\right) d\theta_1 = 2\pi \cos\left(\frac{B A_M}{\hbar}\right) .$$

Reunindo esses resultados na equação da densidade oscilatória, obtemos o resultado final:

$$\tilde{\rho}(E) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_{(M_r, M_\theta)} \frac{L_M^{3/2}}{\hbar^{3/2} M_r^2 (2E)^{1/4}} \cos \left[2M_r \frac{\sqrt{2E}}{\hbar} R \sin \left(\frac{\pi M_\theta}{M_r} \right) - \frac{3}{2} M_r \pi + \frac{\pi}{4} \right] \times \cos \left[\frac{BR^2}{2\hbar} M_r \sin \left(\frac{2\pi M_\theta}{M_r} \right) \right].$$

4.3 Densidade oscilatória para o bilhar elíptico

O caso do bilhar de fronteira elíptica é um pouco mais refinado que o anterior, mas ainda é possível obter famílias de órbitas de forma analítica. O problema de relacionar órbitas periódicas desse bilhar com o espectro quântico já havia sido sugerido por Keller e Rubinow [43]. Recentemente, houve grandes esforços no sentido de tornar a expressão de Berry & Tabor, eq. (4.1), aplicável para uma topologia especial como a da elipse [44].

Embora o bilhar elíptico possa ser visto como uma generalização do circular, existem algumas diferenças fundamentais entre eles. O sistema de coordenadas mais conveniente é o de coordenadas elípticas (C é uma constante) [45]:

$$\begin{aligned} x &= C \cosh(u) \cos(s) \\ y &= C \sinh(u) \sin(s). \end{aligned}$$

As curvas de nível desse sistema são: para u constante, elipses confocais de excentricidade $1/\cosh(u)$; para s constante, folhas hiperbólicas confocais de excentricidade $1/\cos(s)$. Na figura 4.2, estão traçadas algumas dessas curvas de nível. A linha cheia é a curva correspondente à fronteira do bilhar, de excentricidade 0.8. Todo o interior do bilhar é mapeado pelas coordenadas (u, s) com $0 < u < \text{Arccosh}(1/\epsilon)$ e $0 < s < 2\pi$.

Nessas coordenadas, a equação de Hamilton-Jacobi torna-se completamente separável. As constantes de movimento do bilhar são duas: a energia, E , e o produto interno dos momentos angulares medidos em relação a cada um dos dois focos, \mathcal{J} . Em lugar de \mathcal{J} , usaremos uma constante de movimento mais conveniente: $\kappa = \mathcal{J}/2C^2E$. Os valores possíveis de κ estão limitados

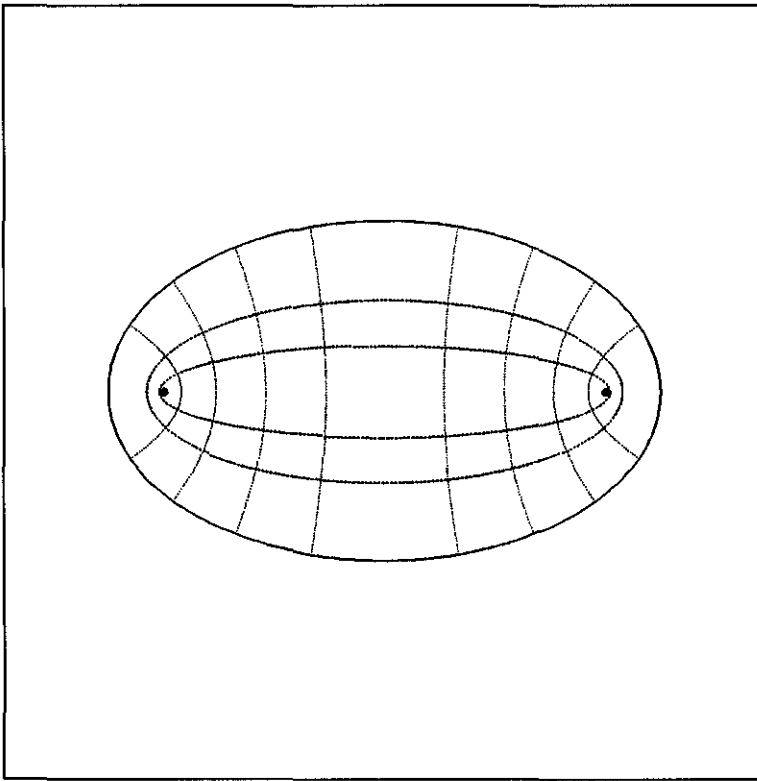


Figura 4.2: Curvas de nível do sistema de coordenadas elípticas. Todas as curvas elípticas e hiperbólicas têm o mesmo par de focos, localizados nas coordenadas $(x, y) = (C, 0)$ e $(-C, 0)$

entre -1 e $1/\epsilon^2 - 1$ (ϵ : excentricidade da fronteira). Uma propriedade que relaciona os bilhares circular e elíptico é a existência de cáusticas. De fato, os momentos associados a u e s são:

$$|p_u| = \sqrt{2EC} \sqrt{\sinh^2(u) - \kappa}$$

$$|p_s| = \sqrt{2EC} \sqrt{\sin^2(s) + \kappa}.$$

Podemos separar as trajetórias clássicas em três grupos, de acordo com o sinal de κ :

$\kappa > 0$ (famílias r) Nesse caso, os valores permitidos para u são tais que $|\sinh(u)| > \sqrt{\kappa}$. Isso restringe o espaço permitido para as trajetórias

clássicas à região entre a fronteira e uma elipse com focos coincidentes com os da fronteira e semi eixos menor e maior respectivamente $C\sqrt{\kappa}$ e $C\sqrt{1+\kappa}$. Essa curva limítrofe é a cáustica das trajetórias. Uma propriedade dessas trajetórias é que nenhuma delas pode cruzar a linha que une os focos.

$\kappa < 0$ (famílias *o*) Dessa vez, a limitação aparece nos valores de s , tais que $|\sin(s)| > \sqrt{-\kappa}$. A cáustica é composta por duas folhas hiperbólicas, com focos coincidentes com os da fronteira e definidas por $(x, y) = (C\sqrt{1+\kappa} \cosh(u), C\sqrt{-\kappa} \sinh(u))$. As trajetórias são compostas por segmentos de retas que sempre cruzam a linha entre os focos.

$\kappa = 0$ Nesse caso, não existem cáusticas. As trajetórias visitam várias vezes os focos, alternando-se entre um e outro. Existe apenas uma órbita periódica desse grupo: aquela passando pelo eixo que liga os focos.

Mais uma vez, definimos as variáveis de ação do sistema,

$$I_u = \frac{1}{2\pi} \oint_{\Gamma_u} p_u du$$

$$I_s = \frac{1}{2\pi} \oint_{\Gamma_s} p_s ds,$$

onde cada integral é calculada ao longo de um ciclo completo da coordenada de integração. Evidentemente, os ciclos dependem do grupo a que pertence cada órbita.

4.3.1 Órbitas periódicas das famílias *r*

Para famílias *r*, a integral em s deve ser calculada de 0 a 2π . Porém, a integral em u é calculada de $\bar{u} = \arcsin \sqrt{\kappa}$ onde está a cáustica, até $u_0 = \operatorname{arctanh} \sqrt{1 - \epsilon^2}$, onde está a fronteira, e de volta para \bar{u} fechando o ciclo. Usando a notação de integrais elípticas, $F(k, \theta)$ e $E(k, \theta)$ [46], as ações são:

$$I_u = \frac{\sqrt{2EC}}{\pi} \left\{ \cosh(u_0) \sqrt{1 - \frac{\kappa}{\sinh^2(u_0)}} - \kappa' E \left(\alpha, \frac{1}{\kappa'} \right) \right\}$$

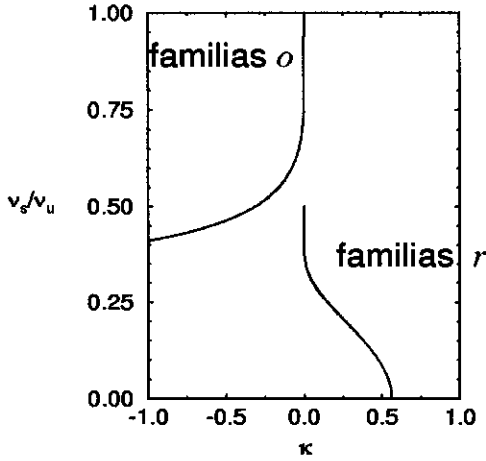


Figura 4.3: Razão de frequências, ν_s/ν_u , para as famílias r e o . Para as famílias r , o valor máximo da razão é $1/2$, e portanto só existem famílias para $M_s/M_u > 1/2$. Para as famílias o , o valor mínimo da razão é $\frac{2}{\pi} \arcsin(1-\epsilon^2)^{1/2}$

$$I_s = 2 \frac{\sqrt{2EC}}{\pi} \kappa' E \left(\frac{\pi}{2}, \frac{1}{\kappa'} \right),$$

onde

$$\alpha = \arccos \left[\frac{\sqrt{\kappa}}{\sinh(u_0)} \right],$$

$$\text{e } \kappa' = \sqrt{1 + \kappa}.$$

Os toros ressonantes, i.e. aqueles que correspondem a famílias de órbitas fechadas, são tais que a condição de comensurabilidade, $\nu_s/\nu_u = \text{racional}$, é satisfeita. As frequências de movimento são: $\nu_u = (\partial E / \partial J_u)_{J_s}$ e $\nu_s = (\partial E / \partial J_s)_{J_u}$. Manipulando derivadas parciais, encontramos a seguinte expressão para a razão de frequências:

$$\frac{\nu_s}{\nu_u} = - \left(\frac{\partial J_u}{\partial J_s} \right)_E = \frac{1}{2} \frac{F \left(\alpha, \frac{1}{\kappa'} \right)}{F \left(\frac{\pi}{2}, \frac{1}{\kappa'} \right)},$$

que deve ser um número racional. Na figura 4.3, está graficada a razão ν_s/ν_u em função de κ . Dada a topologia (M_u, M_s) , com $M_u > 2M_s$, podemos obter

facilmente o valor correspondente de κ impondo que a razão acima seja igual a M_s/M_u .

Observando algumas órbitas, vemos que as famílias (M_u, M_s) do grupo r se parecem muito com famílias do círculo. De fato, cada família elíptica desse grupo se reduz a uma família circular, com (M_u, M_s) iguais a (M_r, M_θ) , se a excentricidade da elipse for escolhida nula.

Os parâmetros importantes de cada família são dados por:

$$\begin{aligned} \eta_M &= 3M_u \\ S_{0,M} &= 2\pi(M_u I_u + M_s I_s) \\ T_M &= \frac{S_{0,M}}{2E} \\ g_E &= \frac{\pi}{4C\hbar k} \left(\frac{M_u}{M_s} \right)^3 \frac{\kappa'}{\kappa \left\{ F\left(\frac{\pi}{2}, \frac{1}{\kappa'}\right) \right\}^2} \cdot \\ &\quad \left\{ E\left(\alpha, \frac{1}{\kappa'}\right) - 2\frac{M_s}{M_u} E\left(\frac{\pi}{2}, \frac{1}{\kappa'}\right) + \frac{\cosh(u_0) \cos \alpha \sqrt{\kappa}}{\kappa' \sqrt{\sinh^2(u_0) - \kappa}} \right\}. \end{aligned}$$

A área englobada por cada órbita depende das condições iniciais da órbita, e pode ser calculada numericamente. Isso é um reflexo da não-integrabilidade do bilhar elíptico com campo magnético: cada órbita de uma família tem uma correção de ação, δS , diferente. Se (u_0, s_0) são as coordenadas iniciais da órbita (para simplificar, assumimos que o ponto inicial está na fronteira), então a integral em $d\theta$ é

$$\int_0^{2\pi} e^{iBA_M/\hbar} d\theta_1 = M_u \frac{\pi}{2} \frac{\kappa'}{F\left(\frac{\pi}{2}, \frac{1}{\kappa'}\right)} \int \cos\left(\frac{BA_M}{\hbar}\right) \frac{ds_0}{\sqrt{\sin^2(s_0) + \kappa}}.$$

4.3.2 Órbitas periódicas das famílias o

Nas famílias o , a integração em u volta a ser no domínio completo: um ciclo fechado entre 0 e u_0 . Porém, s deve ser integrado entre $\frac{\pi}{2} - \bar{s}$ e $\frac{\pi}{2} + \bar{s}$, ou entre $\frac{3\pi}{2} - \bar{s}$ e $\frac{3\pi}{2} + \bar{s}$, onde $\sin(\bar{s}) = \sqrt{-\kappa}$. O resultado é:

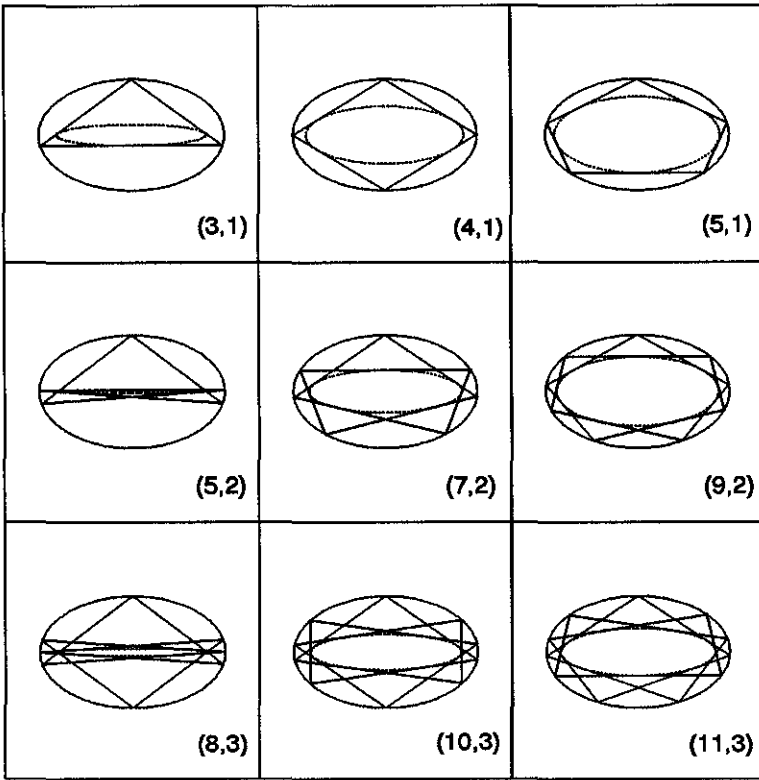


Figura 4.4: Algumas famílias do grupo r do bilhar elíptico, $\epsilon = 0.8$. A cáustica (linha pontilhada) e a topologia (M_u, M_s) de cada família estão indicadas

$$I_u = \frac{2\sqrt{2EC}}{\pi} \left\{ \frac{\sinh(u_0) \cosh(u_0)}{\sqrt{\sinh^2(u_0) - \kappa}} - E(\alpha', \kappa') + (-\kappa)F(\alpha', \kappa') \right\}$$

$$I_s = \frac{2\sqrt{2EC}}{\pi} \left\{ E\left(\frac{\pi}{2}, \kappa'\right) - (-\kappa)F\left(\frac{\pi}{2}, \kappa'\right) \right\},$$

onde

$$\alpha' = \arcsin \left[\frac{\sinh u_0}{\sqrt{\sinh^2(u_0) - \kappa}} \right].$$

Assim como no caso anterior, as famílias de órbitas aparecem quando ν_u/ν_s é racional. Nesse caso, a razão entre frequências é

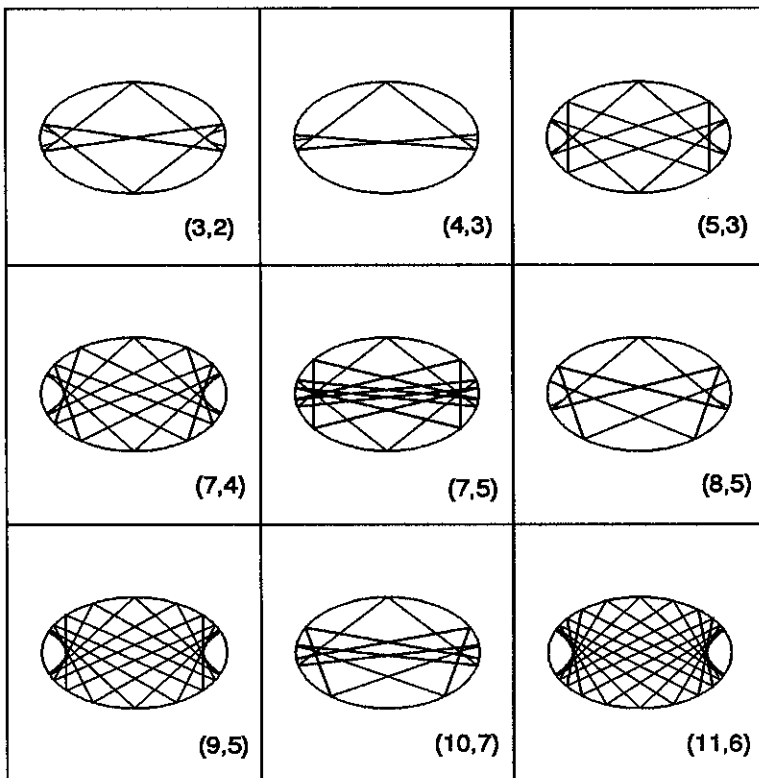


Figura 4.5: Algumas famílias do grupo o do bilhar elíptico, $\epsilon = 0.8$. A cáustica (linha pontilhada) e a topologia (M_u, M_s) de cada família estão indicadas

$$\frac{\nu_s}{\nu_u} = \frac{F(\alpha', \kappa')}{F\left(\frac{\pi}{2}, \kappa'\right)}$$

Quando a fronteira elíptica é reduzida a uma fronteira circular, o limite inferior de κ passa a ser 0. Isso significa que famílias do tipo o não têm correspondente no bilhar circular. Além disso, uma diferença marcante entre famílias o e r é que, em geral, as primeiras têm comprimento muito maior que as últimas. Essa característica se reflete na análise semiclassica: em geral, a contribuição de famílias o na susceptibilidade é bem menor que a de famílias r , devido à rápida supressão de temperatura de cada contribuição. Voltaremos a esse ponto mais tarde.

4.4 Propriedades termodinâmicas

As propriedades grand-canônicas do gás estão armazenadas no potencial grand-canônico, Ω , que pode ser calculado pelas fórmulas da seção 3.1. No limite semiclássico, podemos aproximar a densidade de níveis por uma função suave, $\bar{\rho}$, somada a pequenas correções oscilatórias. Essa idéia é diretamente transportada para o potencial grand-canônico, dividido em uma parte suave somada a uma correção oscilatória:

$$\Omega(T, \mu, B, \mathcal{A}) = - \int_0^\infty \bar{\Omega}_0 f'(E - \mu) dE - \int_0^\infty \tilde{\Omega}_0 f'(E - \mu) dE ,$$

onde $\bar{\Omega}_0$ e $\tilde{\Omega}_0$ derivam respectivamente de $\bar{\rho}$ e $\tilde{\rho}$ por uma relação como a (3.1). A parte suave já foi tratada na seção 3.2, onde vimos que ela dá origem à susceptibilidade de Landau e correções de fronteira sobre esta. A parte oscilatória é basicamente a primitiva segunda da densidade oscilatória:

$$\tilde{\Omega}_0 = - \int^\mu \left(\int^{E'} \tilde{\rho}(E') dE' \right) dE . \quad (4.4)$$

Os limites inferiores de integração podem ser ignorados porque resultariam em termos constantes, que já estão computados no potencial médio. Realmente, o termo médio responsável pela susceptibilidade de Landau tem origem na correção oscilatória em energia nula.

O mais interessante mesmo é um ensemble canônico de bilhares, pois a ligação com o experimento é bem mais simples. Nesse caso, o potencial grand-canônico é substituído pela função *Energia Livre de Helmholtz*, $F = -k_B T \log \mathcal{Z}$. Seguindo o método proposto por Imry [47, 8], a energia livre de Helmholtz pode ser relacionada com o potencial grand-canônico da forma usual, $F = \Omega + \mu N$. No regime mesoscópico, quando o sistema tem poucas partículas, essa relação perde um pouco de sentido, mas podemos considerá-la útil pois N é razoavelmente grande (tipicamente da ordem de 10^3 ou 10^4).

Definimos agora um *potencial químico médio*, $\bar{\mu}$, como sendo o potencial químico que o sistema teria se o número de partículas fosse igual ao número médio de partículas nesse potencial, $N = \bar{N}(\bar{\mu})$. No limite semiclássico, N e \bar{N} , dado pela equação (3.12), são bastante próximos entre si, e é natural esperar que $\bar{\mu}$ seja uma boa aproximação para o potencial químico real. Explicitamente, usamos a expressão;

$$\bar{\mu} = \frac{\hbar^2 k_f^2}{2} = \frac{2\pi\hbar^2}{g_s \mathcal{A}} N + \frac{\hbar^2 \mathcal{L}}{\mathcal{A}} \sqrt{\frac{\pi N}{g_s \mathcal{A}}}. \quad (4.5)$$

A diferença entre $\bar{\mu}$ e o μ real é obtida novamente lançando mão de $\tilde{\rho}$ e $\bar{\rho}$:

$$\delta\mu = -\frac{1}{D(\bar{\mu})} \tilde{N}(\bar{\mu}) = -\frac{\int_0^\infty \tilde{\rho}^{(-1)}(E) f'(E - \bar{\mu}) dE}{\int_0^\infty \bar{\rho}(E) f'(E - \bar{\mu}) dE}. \quad (4.6)$$

Agora, escrevemos a energia livre nessa aproximação,

$$F = \left\{ \bar{\Omega}(\bar{\mu} + \delta\mu) + \tilde{\Omega}(\bar{\mu} + \delta\mu) \right\} + \{\bar{\mu} + \delta\mu\} N.$$

Tomando termos em ordem mais baixa em $\delta\mu$, encontramos:

$$F = \bar{F} + \Delta F_1 + \Delta F_2,$$

com

$$\begin{aligned} \bar{F} &= \bar{\Omega}(\bar{\mu}) + \bar{\mu} N, \\ \Delta F_1 &= \tilde{\Omega}(\bar{\mu}), \\ \Delta F_2 &= \frac{1}{2D(\bar{\mu})} [\tilde{N}(\bar{\mu})]^2. \end{aligned}$$

A susceptibilidade canônica também admite a divisão em três contribuições, $\chi = \bar{\chi} + \chi_1 + \chi_2$, com

$$\bar{\chi} = -\frac{1}{\mathcal{A}} \frac{\partial^2}{\partial B^2} \bar{F} = \bar{\chi}_{gce}(\bar{\mu}) \quad (4.7)$$

$$\chi_1 = -\frac{g_s}{\mathcal{A}} \frac{\partial^2}{\partial B^2} \int_0^\infty \tilde{\rho}^{(-2)}(E) f'(E - \bar{\mu}) dE \quad (4.8)$$

$$\chi_2 = -\frac{g_s}{2\bar{\rho}(\bar{\mu})\mathcal{A}} \frac{\partial^2}{\partial B^2} \left\{ \int_0^\infty \tilde{\rho}^{(-1)}(E) f'(E - \bar{\mu}) dE \right\}^2. \quad (4.9)$$

A eq. (4.7) recupera a susceptibilidade de Landau, que já existia no ensemble grand-canônico. χ_1 também está presente no ensemble grand-canônico: ela é a correção oscilatória para um gás com potencial químico $\bar{\mu}$ (ver eq. 4.4). O termo novo é χ_2 , que aparece exatamente porque o potencial

químico é função dos parâmetros termodinâmicos. Denotamos por $\tilde{\rho}^{(-n)}$ a primitiva de n -ésima ordem de $\tilde{\rho}$.

A presença do termo $S_{0,M}/\hbar$ no argumento da função cosseno (eq. 4.2) nos permite tirar algumas conclusões sobre a forma de χ_1 e χ_2 . Inicialmente, devemos esperar para as primitivas primeira e segunda de $\tilde{\rho}$ o mesmo comportamento oscilante de $\tilde{\rho}$. No limite semiclássico, a contribuição principal dessas primitivas é a que resulta da integração da parte oscilatória, as demais sendo de ordem $1/(kL_M)$ menores. Usamos as seguintes aproximações para essas primitivas:

$$\tilde{\rho}^{(-1)} = \frac{1}{\pi^2 \sqrt{\hbar}} \sum_M \frac{1}{|M_s^3 g_E|^{1/2}} \sin \left[kL_M - \eta \frac{\pi}{2} + \sigma \frac{\pi}{4} \right] \mathcal{C}(B),$$

$$\tilde{\rho}^{(-2)} = -\frac{\hbar^{3/2}}{\pi^2} \sum_M \frac{k}{L_M |M_s^3 g_E|^{1/2}} \cos \left[kL_M - \eta \frac{\pi}{2} + \sigma \frac{\pi}{4} \right] \mathcal{C}(B),$$

onde $\mathcal{C}(B) = \int_0^{2\pi} \cos(BA_M/\hbar) d\theta_1$, $k = \sqrt{2E}/\hbar$ e L_M é o comprimento da órbita M .

Para temperatura nula, as integrais de convolução que aparecem em χ_1 e χ_2 (4.8) e (4.9) resultam respectivamente em $-\tilde{\rho}^{(-2)}$ e $-\tilde{\rho}^{(-1)}$ calculados em $E = \mu$. Por outro lado, se a temperatura for muito grande, alguns termos em $\tilde{\rho}^{(-1)}$ e $\tilde{\rho}^{(-2)}$, aqueles com período de oscilação menor, irão apresentar várias oscilações dentro de uma faixa de alguns $k_B T$ em torno de μ . A integral resultante tenderá a ser muito pequena. Quantitativamente, podemos definir uma função R_T por

$$R_T(L) = \frac{\pi L k_B T}{k_f \hbar^2} \left[\sinh \left(\frac{\pi L k_B T}{k_f \hbar^2} \right) \right]^{-1},$$

e encontrar para χ_1 e χ_2 os resultados:

$$\chi_1 = -\frac{\mathbf{g}_s \hbar^{3/2}}{\pi^2 \mathcal{A}} k_f \sum_M \frac{1}{L_M |M_s^3 g_E|^{1/2}} \cos \left[k_f L_M - \eta \frac{\pi}{2} + \sigma \frac{\pi}{4} \right] R_T(L_M) \frac{d^2}{dB^2} \mathcal{C}(B), \quad (4.10)$$

$$\chi_2 = -\frac{\mathbf{g}_s \hbar}{\pi^3 \mathcal{A}^2} \frac{\partial^2}{\partial B^2} \left\{ \sum_M \frac{1}{|M_s^3 g_E|^{1/2}} \sin \left[k_f L_M - \eta \frac{\pi}{2} + \sigma \frac{\pi}{4} \right] R_T(L_M) \mathcal{C}(B) \right\}^2. \quad (4.11)$$

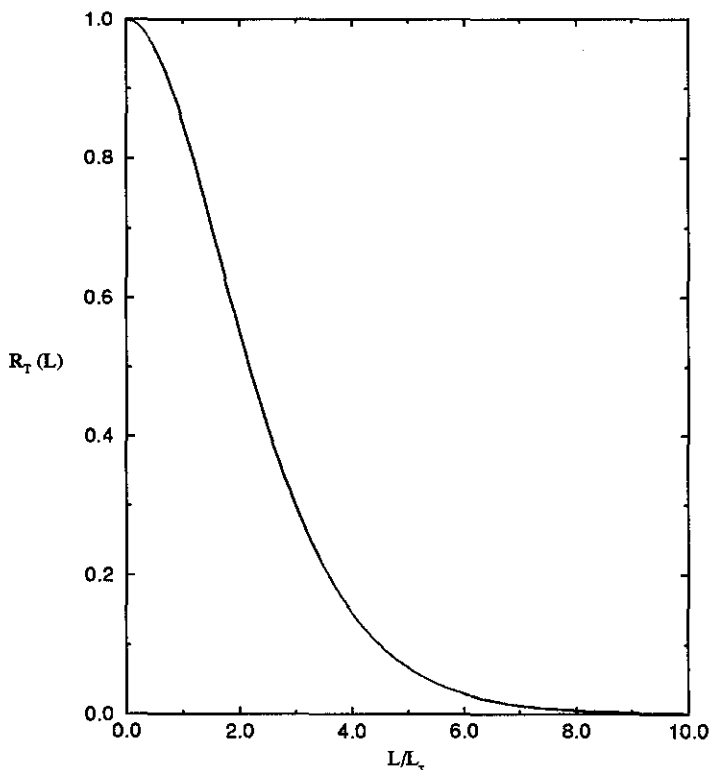


Figura 4.6: Função de temperatura, $R_T(L)$, com L escalado pela unidade de comprimento L_τ . Verifique a rápida queda no valor da função

Como discutido na seção anterior, a temperatura efetivamente introduz uma diminuição exponencial na contribuição de cada família (M_u, M_s) na susceptibilidade (ver fig. 4.6). Apenas famílias com comprimento menor ou da ordem do "comprimento térmico", $L_\tau = k_f \hbar^2 / \pi k_B T$, contribuem de forma significativa. No caso do bilhar elíptico, isso significa que as famílias do grupo o contribuem pouco, enquanto as famílias do grupo r , especialmente aquelas com M_s pequeno, são mais importantes. No bilhar quadrado, a órbita mais importante é a órbita "retangular" (que bate uma vez em cada lado do quadrado, fazendo um ângulo de 45° com a fronteira). Essa órbita é a mais curta desse bilhar.

Capítulo 5

Resultados numéricos versus previsão analítica

O teste numérico do modelo semiclássico foi feito nos bilhares de fronteira elíptica e circular. Além de verificar se o espectro desses bilhares resulta em resposta magnética coerente com o modelo semiclássico, estaremos preocupados em tentar comparar as previsões desse modelo com o experimento de Lévy *et al.* No primeiro ponto, as propriedades de um bilhar isolado serão importantes. No segundo, entrarão as médias em ensembles de bilhares.

Um terceiro tipo interessante de bilhar é o de fronteira quadrada. As famílias de órbitas de campo nulo para esse bilhar foram extensivamente discutidas [8, 7]. Por outro lado, os níveis de energia podem ser obtidos facilmente por diagonalização exata do Hamiltoniano quântico numa base de senos e cossenos [48]. Para a fronteira circular, os níveis foram calculados procurando zeros da função hipergeométrica $\Phi(\alpha, |l| + 1, \omega R^2/\hbar)$ (seção 2.3). Para a fronteira elíptica, usamos o método de fronteira apresentado na seção 2.4. A escolha de três fronteiras diferentes reflete a preocupação em verificarmos de que forma a susceptibilidade, para um bilhar isolado ou para um ensemble, depende da forma da fronteira. O interesse maior reside nos bilhares circular e elíptico. Nos referimos a [8] para uma discussão bastante completa sobre a termodinâmica no bilhar quadrado.

No capítulo anterior, exploramos a análise semiclássica do bilhar elíptico. Coisa semelhante pode ser feita para o bilhar circular: a integrabilidade do sistema permite definir integrais de ação e, a partir delas, obtemos as propriedades das famílias de órbitas periódicas. Mais uma vez, a referência

[8] traz toda essa análise, um pouco mais detalhada que na seção 4.2. Nas seções 5.1 e 5.2, apresentaremos resultados obtidos para o bilhar circular. A seção 5.3 traz o mesmo para o bilhar elíptico.

5.1 Susceptibilidade para um bilhar circular isolado

Em temperatura nula, a susceptibilidade de um bilhar isolado envolve contribuições de todas as famílias de órbitas periódicas, inclusive as de período muito longo. Isso ocorre porque o amortecimento de temperatura, representado pela função R_T , não está presente nas expressões de χ_1 e χ_2 (eq. 4.8 e 4.9). Famílias de período longo introduzem contribuições que oscilam extremamente rápido na susceptibilidade como função de k_f . Frequentemente surgem picos altos e estreitos nessa função: eles ocorrem quando existe interferência construtiva entre as contribuições de período longo. Numericamente, esse fenômeno é compreendido se nos lembrarmos dos *avoided crossings*: sempre que o nível de Fermi se aproxima de um outro nível abaixo ou acima dele, de forma que o nível inferior contribui na soma (3.3) mas o nível superior não, a derivada $\partial\Omega/\partial B$ aumenta ou diminui bruscamente. Na susceptibilidade, aparece um pico alto e estreito. Pares de níveis muito próximos bem abaixo do nível de Fermi não provocam o mesmo efeito porque a contribuição na derivada de um nível costuma ser de sinal contrário à do outro, anulando-se o efeito líquido.

O efeito de temperatura finita é regularizar a curva de susceptibilidade. As contribuições rapidamente oscilatórias desaparecem, e as únicas famílias importantes passam a ser as de comprimento curto, menor que o comprimento térmico $L_\tau = k_f \hbar^2 / \pi k_B T$. No caso do bilhar circular, as famílias mais importantes são as famílias de "uma volta" (semelhantes às famílias do grupo r com $M_s = 1$). Essas famílias têm comprimento entre $3\sqrt{3}/\pi$, para a família (3, 1), e $2\sqrt{\pi}$, para as famílias $(M_u, 1)$ com $M_u \gg 1$. Vemos na fig. 5.1 que, para temperatura de 5 espaçamentos médios (ou seja, $k_B T = 5\Delta$, $\Delta = 2\pi \hbar^2 / \mathcal{A}$), a susceptibilidade oscila em um modo de oscilação principal com período de aproximadamente 1.8. Esse período corresponde ao da contribuição de uma família hipotética com comprimento 3.5. Para temperatura de 1 espaçamento médio, vemos a superposição de dois modos

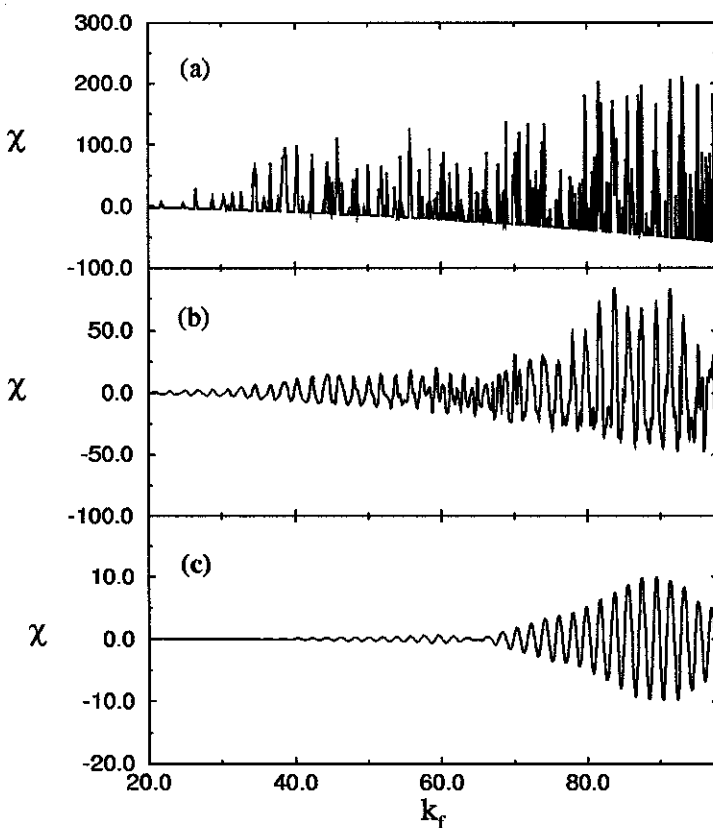


Figura 5.1: Susceptibilidade de um bilhar circular, com campo externo $B= 4.4$ e temperatura $k_B T$ igual a 0 (a), 1 espaçamento médio (b) e 5 espaçamentos médios (c). O espaçamento médio é $\Delta = 2\pi\hbar^2/A$, e $k_f = \frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar} = \sqrt{\frac{4\pi N}{g_s A}}$

de oscilação, que devem ser interpretados como contribuições de famílias de "uma volta" ($M_s = 1$) e "duas voltas" ($M_s = 2$), essas últimas com tipicamente o dobro do comprimento das primeiras. À medida que a temperatura diminui, surgem cada vez mais modos de oscilação até que, em temperatura nula, praticamente todos os modos de oscilação possíveis estão presentes.

Olhando para a susceptibilidade com função do campo magnético externo, também aparece um padrão oscilatório, originário da correção magnética δS sobre a ação ao longo de cada órbita. Novamente, a contribuição de famílias de órbitas longas tende a diminuir. Na fig. 5.2, graficamos a susceptibilidade numérica, quântica, e algumas curvas semiclássicas, obtidas considerando famílias com $M_s = 1, 2$ e 3. Para esse valor de temperatura, há

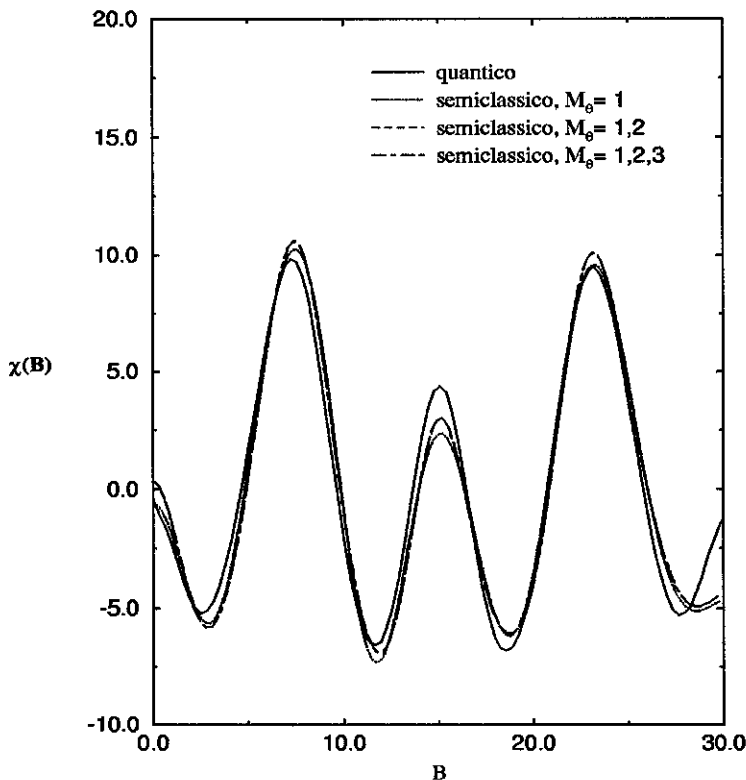


Figura 5.2: Susceptibilidade de um bilhar circular, com 1400 partículas e temperatura correspondente a 5 espaçamentos médios. A curva cheia é a função quântica. As curvas pontilhada, tracejada e pontilhada-tracejada (praticamente indistinguível da tracejada) são curvas semiclássicas obtidas das eq. (4.10) e (4.11) com respectivamente $M_\theta \leq 1, 2$ e 3. Para esse regime de temperatura, a diferença entre as curvas semiclássicas é muito pequena

pouca diferença entre a curva semiclássica obtida para famílias com $M_s = 1$ e a correspondente obtida para famílias com $M_s \geq 1$. Isso não é verdade para temperatura mais baixa (ver fig. 5.3).

A susceptibilidade numérica para um bilhar é bem aproximada pela susceptibilidade semiclássica, $\bar{\chi} + \chi_1 + \chi_2$. Na fig. 5.4, foram graficadas a susceptibilidade numérica e sua aproximação semiclássica. O termo χ_1 já é uma boa aproximação para a susceptibilidade de um sistema isolado, já que χ_2 é uma correção de ordem superior em χ_1 , como se observa pelo gráfico. Além disso, verificamos que, para campo magnético maior que um certo valor

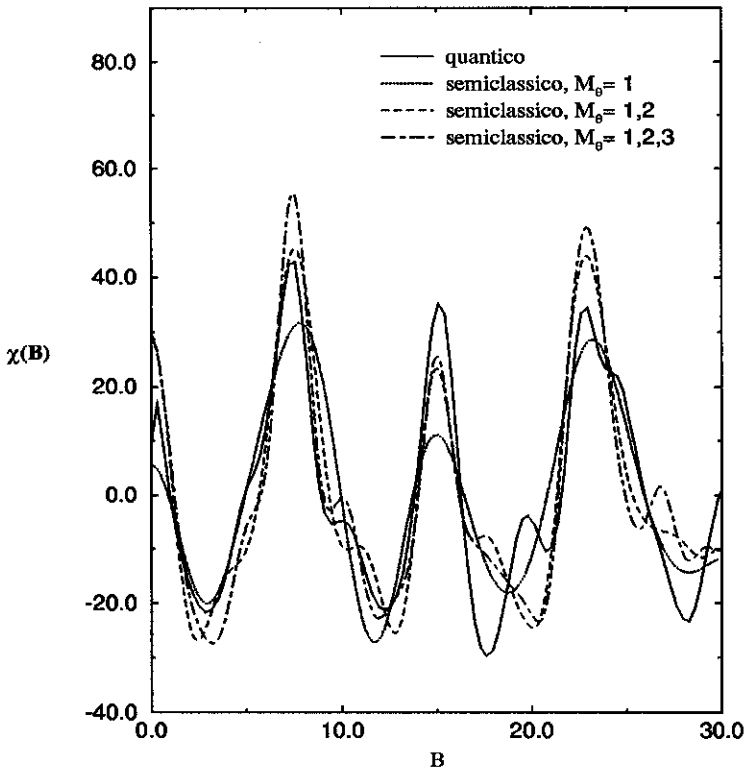


Figura 5.3: O mesmo que a anterior para temperatura correspondente a 2 espaçamentos médios. Note a separação visível entre as curvas semiclássicas e a curva quântica

(cerca de 20), as curvas numérica e semiclássica se mantêm da mesma ordem de grandeza mas tornam-se defasadas. Isso é um indicador do limite de validade da aproximação perturbativa em campo. À medida que o campo magnético aumenta, o raio ciclotrônico diminui e as órbitas periódicas de campo nulo deixam de ser uma boa aproximação para as órbitas periódicas reais. Também os toros ressonantes que haviam em campo nulo tornam-se cada vez menores para campo crescente. O fato de a ordem de grandeza ainda se manter será significativo quando discutirmos a susceptibilidade com média em tamanho.

O padrão oscilatório da susceptibilidade é um comportamento universal em bilhares. Não só o bilhar de fronteira circular mas também os de fronteira elíptica e quadrada apresentam o mesmo padrão [8]. Um gás de elétrons confinado num potencial parabólico apresenta características ligeiramente diferentes. A regularidade desse potencial faz com que, em alguns

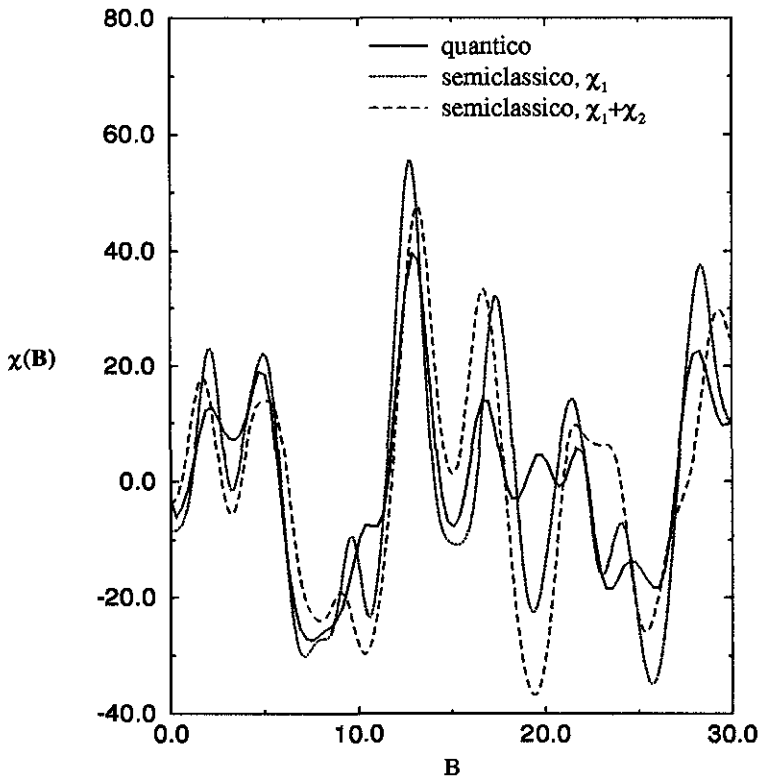


Figura 5.4: Susceptibilidade de um bilhar circular, com 1500 partículas e temperatura equivalente a 2 espaçamentos médios. A linha cheia é a curva numérica, a linha tracejada é a susceptibilidade semiclássica, $\bar{\chi} + \chi_1 + \chi_2$. A linha pontilhada é apenas χ_1 . Note a diferença entre essas duas últimas

valores ressonantes de campo magnético, a susceptibilidade média tenha um pico bastante elevado [39].

5.2 Médias em ensemble de bilhares e o teste experimental

Compreendendo a forma da susceptibilidade para um sistema isolado, podemos acrescentar um ingrediente experimental: a média estatística em um conjunto de sistemas. No experimento de Lévy *et al.*, havia um conjunto de

vários bilhares, com tamanhos ligeiramente diferentes entre si. Para simular a situação experimental, pode ser introduzida uma distribuição gaussiana de áreas no ensemble de bilhares ou, alternativamente distribuições gaussianas de áreas e de partículas (esse último caso representa um ensemble em que a densidade eletrônica varia um pouco de bilhar para bilhar). Especificamente, se a susceptibilidade de um bilhar for calculada pelas fórmulas da seção anterior, então a sua média é:

$$\langle \chi \rangle_L = \frac{\int dL' e^{-\frac{(L'-L)^2}{2L^2\delta_L^2}} \chi(T, N, B, L'^2)}{\int dL' e^{-\frac{(L'-L)^2}{2L^2\delta_L^2}}} . \quad (5.1)$$

onde o parâmetro L é $\sqrt{\mathcal{A}}$ e a dispersão é dada por $L\delta_L$. A princípio, o cálculo computacional dessa média exige o conhecimento dos níveis de energia, não apenas para vários valores de campo magnético como também para tamanhos diferentes de bilhares. Essa dificuldade pode ser contornada se usarmos a propriedade de escala existente no Hamiltoniano. Por essa propriedade, níveis de energia para um bilhar genérico de área \mathcal{A}' se relacionam com os correspondentes para um bilhar de área \mathcal{A} por:

$$E_n(B, \mathcal{A}') = \frac{1}{x} E_n(xB, \mathcal{A}) . \quad (5.2)$$

A relação correspondente para a susceptibilidade é:

$$\chi(T, N, B, \mathcal{A}') = \chi(xT, N, xB, \mathcal{A}) , \quad (5.3)$$

onde $x = (\mathcal{A}'/\mathcal{A})$. Relação análoga existe em um ensemble grand-canônico,

$$\chi_{gce}(T, \mu, B, \mathcal{A}') = \chi_{gce}(xT, x\mu, xB, \mathcal{A}) .$$

Uma média em ensemble que investigamos foi a chamada "média em número de partículas": suponha que, em lugar de um ensemble de bilhares com dispersão em tamanho, tenhamos um ensemble de bilhares com dispersão em número de partículas, de forma que seja possível apenas estabelecer um número médio de partículas, \bar{N} , em cada membro do ensemble. A susceptibilidade média nesse caso é:

$$\langle \chi \rangle_N(T, \bar{N}, B, \mathcal{A}) = \frac{\sum_N e^{-\frac{(N-\bar{N})^2}{2\bar{N}^2\delta_N^2}} \chi(T, N, B, \mathcal{A})}{\sum_N e^{-\frac{(N-\bar{N})^2}{2\bar{N}^2\delta_N^2}}}. \quad (5.4)$$

onde admitimos novamente uma distribuição gaussiana para N . Essa média é bastante diferente da média em tamanho, $\langle \rangle_L$, tanto na dependência com o campo magnético externo quanto na dependência com o número de partículas. Porém, se calculássemos uma média simultânea em partículas e em tamanho, substituindo o valor médio $\langle \chi \rangle_N$ na eq. (5.1), esta era em geral bastante próxima da média simples em tamanho, escolhendo apropriadamente as dispersões. Esse resultado é bastante intuitivo pois a média dupla, $\langle \langle \rangle_N \rangle_L$, corresponde a um ensemble composto de bilhares com diferentes tamanhos e diferentes números de partículas. A mesma coisa ocorre na média em tamanho, embora a densidade de partículas nesse último caso seja constante. De fato, esses dois tipos de médias são equivalentes. A escolha de uma ou outra é, enfim, uma questão de conveniência numérica e/ou analítica.

Porém, devemos nos perguntar: já que as médias $\langle \langle \rangle_N \rangle_L$ e $\langle \rangle_L$ interferem sobre as oscilações típicas em $k_f L_M$ e BA_M , porque então a "conveniência numérica" da média dupla em detrimento à simples? A resposta está no passo numérico em que L deve ser alterado para as média serem calculadas corretamente. No caso da média simples, o passo em L deve ser menor que o período mínimo $2\pi/k_f$, que em geral é muito pequeno. Se for feita previamente uma média em partículas, o passo em L deve ser menor que um período da ordem de $\hbar\pi/B\sqrt{A_M}$, que é bem maior que o anterior. Apesar de introduzir uma média adicional, a economia em esforço computacional é grande.

Em geral, médias em ensemble destroem o padrão de oscilação em k_f . Uma média em ensemble que, por exemplo, envolva bilhares com diferentes valores de k_f , irá certamente destruir a coerência entre elétrons de sistemas diferentes. Da forma como foi definida, a média $\langle \rangle_N$ também pode ser vista como uma média em k_f , ligado a N pela eq. (4.5). As contribuições de χ_1 sobre essa média desaparecem completamente se a média envolver bilhares com uma variação em k_f muito maior que $2\pi/L_M$. Para órbitas curtas, mesmo dispersões pequenas já são capazes de provocar decoerência. Órbitas longas naturalmente contribuem pouco pelo amortecimento exponencial em

temperatura.

A função χ_2 , por outro lado, tem dependência um pouco mais complicada em k_f . O produto de somatórios resulta em dois tipos de termos: aqueles que envolvem o produto direto:

$$\sin^2 \left[k_f L_M - \eta \frac{\pi}{2} + \sigma \frac{\pi}{4} \right]$$

e aqueles que envolvem o produto cruzado ($M \neq M'$):

$$\sin \left[k_f L_M - \eta \frac{\pi}{2} + \sigma \frac{\pi}{4} \right] \sin \left[k_f L_{M'} - \eta' \frac{\pi}{2} + \sigma' \frac{\pi}{4} \right].$$

Os primeiros resultam em média suave ($\langle \sin^2 \rangle = 1/2$), enquanto os últimos resultam em médias que variam mais lentamente em k_f quanto menor for a diferença entre os comprimentos das órbitas envolvidas. Mais uma vez, o termo dominante na média de χ_2 resulta de produtos cruzados entre as famílias de "uma volta". Essas famílias têm comprimentos curtos (todos eles menores que o perímetro do bilhar) e muito próximos entre si, especialmente quando $M_u \gg 1$. Na fig. 5.5, comparamos o cálculo quântico, exato, de $\langle \chi \rangle_N$ com o cálculo semiclássico. Na linha tracejada, está separada a contribuição dos termos de produto direto na média. De fato, essa contribuição é pequena em comparação com o total.

Um traço marcante da importância de χ_2 na média $\langle \chi \rangle_N$ é o seu comportamento em campo nulo: enquanto χ_1 oscila entre valores positivos e negativos, χ_2 é sempre positiva, paramagnética, quando o campo magnético é zero (isso se vê pela eq. (4.11) e considerando que \mathcal{C} é máximo em $B = 0$). Essa propriedade é marcante em ensembles de bilhares magnetizados [7, 8]: a susceptibilidade média em campo nulo é paramagnética e, em geral, bem maior que a de Landau. Experimentalmente, foi possível observar esse efeito também [5].

O caráter paramagnético de χ_2 na média $\langle \chi \rangle_N$ é característico da descrição canônica. Como vimos, o termo χ_2 se origina do fato de o potencial químico ser *dependente* dos demais parâmetros termodinâmicos. Realmente, a susceptibilidade média em um gás grand-canônico é simplesmente a susceptibilidade de Landau (ver seção 3.3).

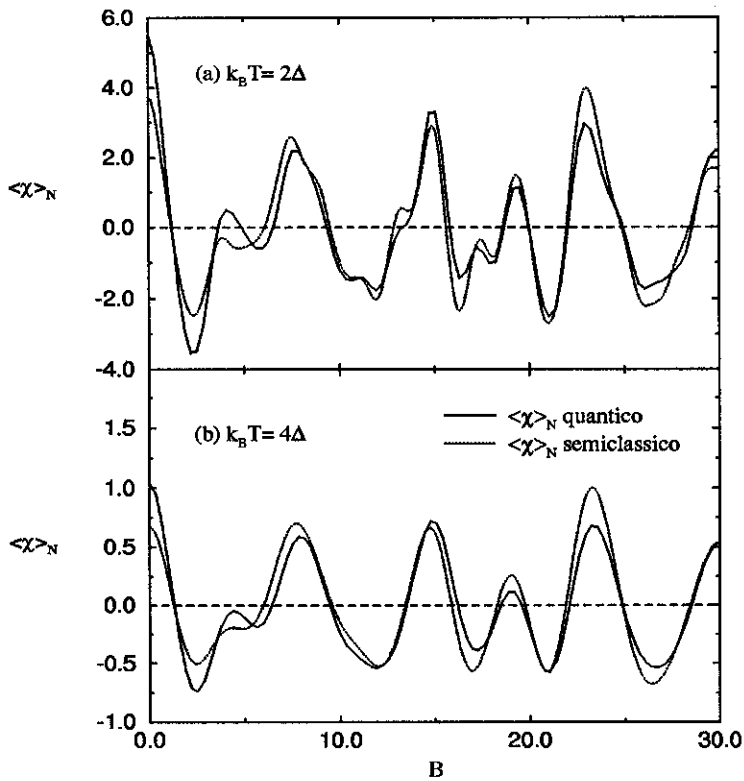


Figura 5.5: Susceptibilidade média em um ensemble de bilhares circulares com dispersão em partículas, $\delta_N = 0.1$. O número médio de partículas é 1400 e a temperatura é equivalente a 2 espaçamentos médios (a) e 4 espaçamentos médios (b). A curva cheia é a susceptibilidade quântica. A curva pontilhada é o cálculo semiclassico completo, e a curva tracejada considera apenas a contribuição dos termos de produto direto em χ_2

Fisicamente, a destruição do padrão oscilatório pode ser interpretado como a perda de coerência entre elétrons que descrevem a mesma órbita mas com velocidades diferentes. Um ensemble com sistemas de diferentes tamanhos provoca, além disso, uma perda de coerência entre elétrons que descrevem órbitas com a mesma geometria mas em *escalas de tamanho* diferentes. Enquanto a perda de coerência entre elétrons da mesma órbita é visível como destruição do padrão oscilatório em k_f , a perda de coerência entre elétrons de órbitas diferentes é visível como destruição do padrão oscilatório em B . Apenas nas proximidades de campo nulo, essa última perda de coerência é pequena porque, aí, a ação $S \cong \hbar k_f L_M + B A_M$ muda pouco.

Essa análise é confirmada numericamente pela média $\langle \langle \chi \rangle_N \rangle_L$. Na fig.

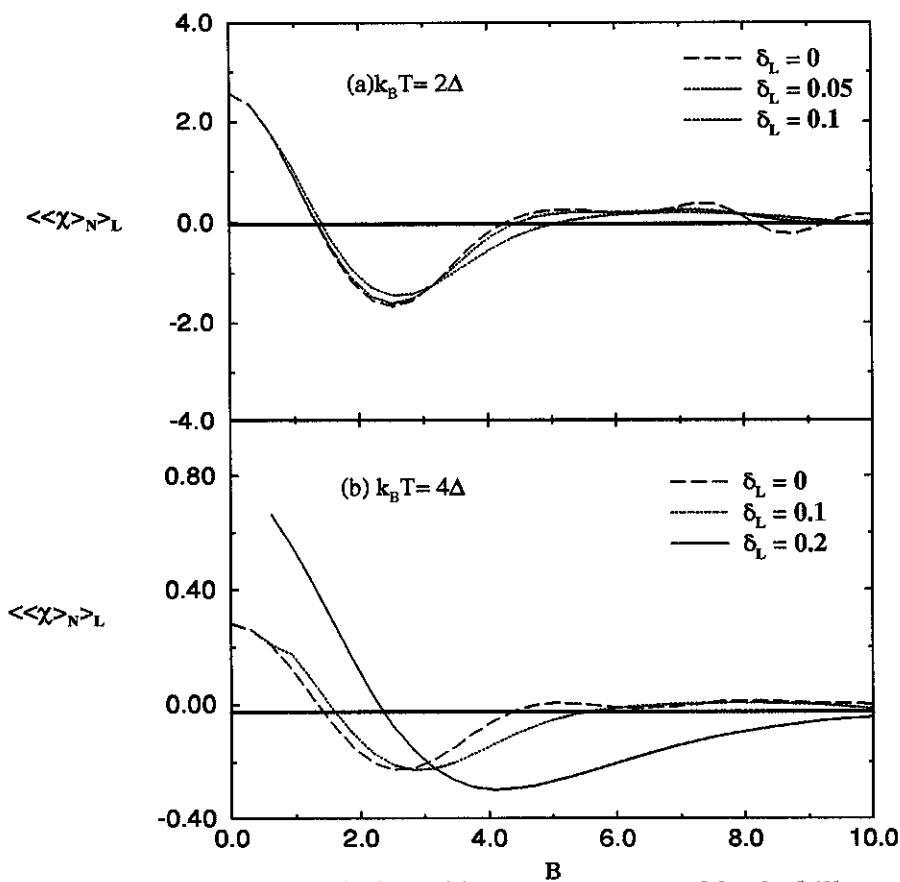


Figura 5.6: Susceptibilidade média em um ensemble de bilhares circulares com dispersão em partículas e em tamanho, $\delta_N = 0.1$. O número médio de partículas é 800 e a temperatura é equivalente a 2 espaçamentos médios (a) e 4 espaçamentos médios(b)

5.6, vemos médias desse tipo para um ensemble de bilhares circulares com dispersão em partículas pequena ($\delta_N = 0.1$). Como é razoável esperar, as oscilações típicas de campo magnético não nulo são gradativamente amortecidas à medida que a dispersão em tamanho, δ_L , aumenta. Nas proximidades de campo nulo, a mudança é pequena. Em especial, o pico paramagnético de campo nulo se mantém. Esse comportamento também foi verificado experimentalmente.

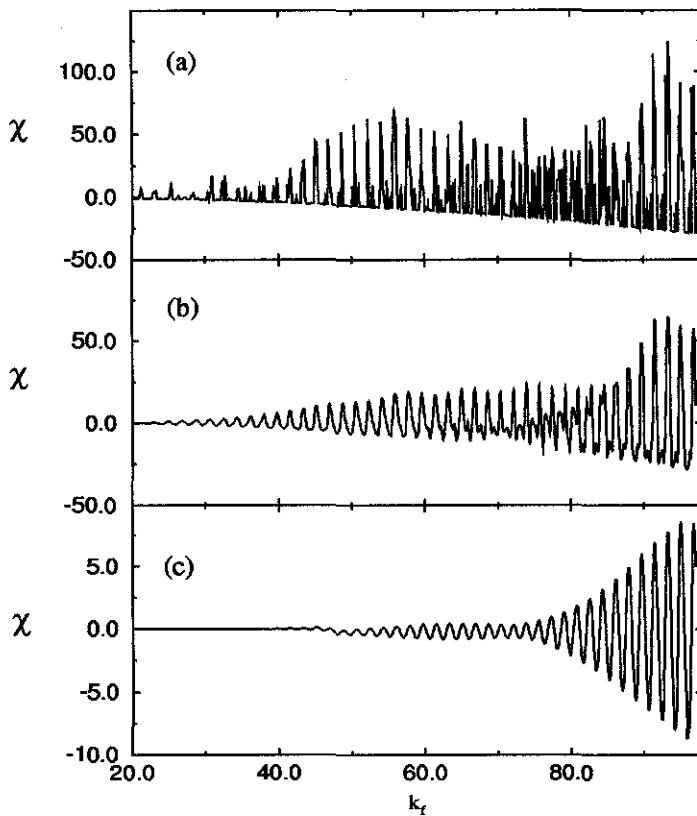


Figura 5.7: Susceptibilidade de um bilhar elíptico, com campo externo $B=4.4$ e temperatura equivalente a 0 (a), 1 espaçamento médio (b) e 5 espaçamentos médios (c). O espaçamento médio é $\Delta = 2\pi\hbar^2/\mathcal{A}$, e $k_f = \frac{\sqrt{2\mu}}{\hbar} = \sqrt{\frac{4\pi N}{g_s \mathcal{A}}}$

5.3 O bilhar elíptico

Para um gás confinado num bilhar de fronteira elíptica, a termodinâmica é bem semelhante à de fronteira circular. Do ponto de vista semiclássico, a única coisa diferente entre um sistema e outro é a estrutura de órbitas periódicas: as famílias de órbitas da elipse têm particularidades, especialmente a existência de dois grupos de famílias. Porém, isso não afeta qualitativamente a análise.

A susceptibilidade para um bilhar isolado é tipicamente uma função oscilatória em k_f (ou N) e B . Semiclassicamente, as órbitas mais importantes têm comprimento menor que o comprimento térmico L_T . Assim como no bilhar circular, também no elíptico a temperatura desempenha um papel regularizador, como se vê na fig. 5.7. O período de oscilação principal de

$\chi(k_f)$, para temperatura de 5 espaçamentos médios, é 1.8. Esse período é aproximadamente o período típico das contribuições de famílias de "uma volta" ($M_s = 1$), algo entre 1.7 e 1.96. Para temperatura mais alta, famílias de duas ou mais voltas tornam-se cada vez mais importantes.

Mantendo o campo magnético como parâmetro variável, também existe um padrão oscilatório na susceptibilidade, embora ele seja um pouco mais complicado pois sua origem está no termo $\mathcal{C}(B)$. Mais uma vez, é possível comparar as curvas semiclássica e quântica para esse sistema. A dificuldade aqui é a existência de famílias do grupo r e do grupo o , às vezes com a mesma topologia. Com isso, não se garante eficiência no esquema semiclássico de Berry-Tabor. Eventualmente, pode ser necessário introduzir órbitas complexas na densidade oscilatória $\tilde{\rho}$. Porém, se o interesse é a susceptibilidade em temperatura suficientemente alta, uma boa aproximação é considerar apenas as órbitas r mais curtas. Nas fig. 5.8 e 5.9, comparamos a susceptibilidade quântica e a semiclássica para dois valores diferentes de temperatura. Nelas, observamos a importância de órbitas longas.

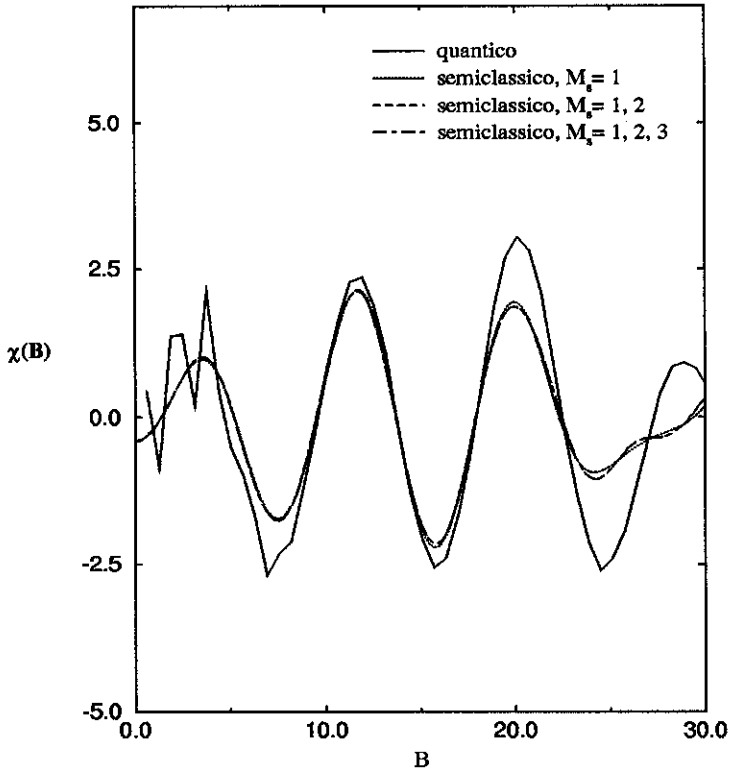


Figura 5.8: Susceptibilidade de um bilhar elíptico, com 1000 partículas e temperatura correspondente a 5 espaçamentos médios. A curva cheia é a função quântica. As curvas pontilhada, tracejada e pontilhada-tracejada (praticamente indistinguível da tracejada) são curvas semiclássicas obtidas das eq. (4.10) e (4.11) com respectivamente $M_s \leq 1, 2$ e 3

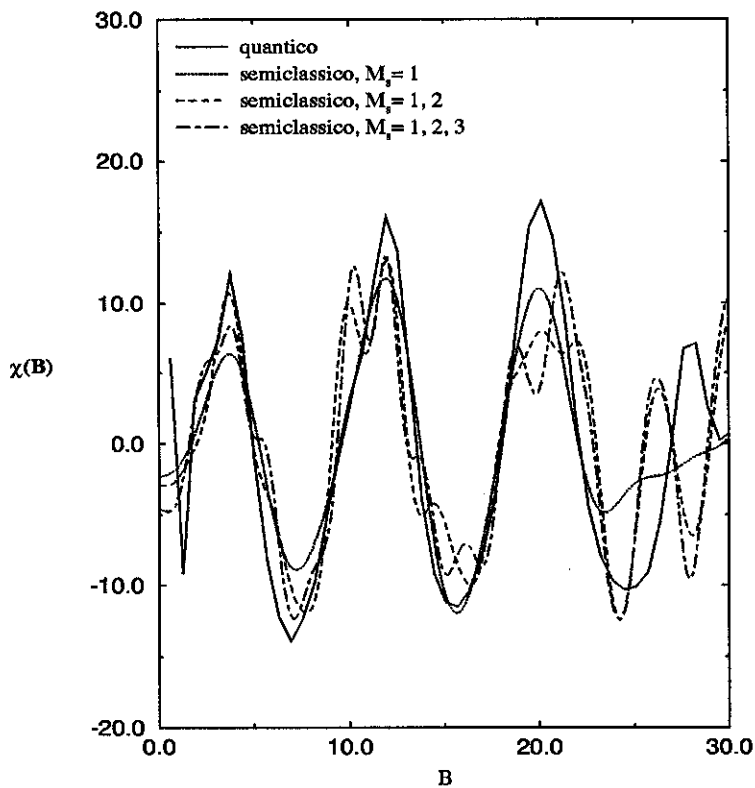


Figura 5.9: O mesmo que a anterior para temperatura correspondente a 2 espaçamentos médios. Verifique o distanciamento entre as curvas semiclássicas

Conclusões

Vimos que o bilhar de fronteira elíptica pode ser resolvido através de um método de fronteira proposto nessa dissertação. Além disso, puderam ser observados efeitos de *avoided crossings*, provocados pela quebra de integrabilidade provocada pelo campo magnético. Verificamos também que o regime de campo alto, $E \ll \hbar B$, é caracterizado por um suave agrupamento de níveis em pacotes igualmente espaçados. Devido a sua energia, esses pacotes devem ser associados aos níveis de Landau, cujas energias características são:

$$E_L = \frac{1}{2}\hbar B, \frac{3}{2}\hbar B, \frac{5}{2}\hbar B, \dots$$

Nas figuras 2.3 e 2.1, observamos esse agrupamento nos dois primeiros níveis de Landau. A semelhança entre os espectros do bilhar circular e do bilhar elíptico nesse regime indica que, apesar de apresentarem dinâmica clássica bem diferente, o espectro de energias desses bilhares é praticamente o mesmo. Nesse regime, a dinâmica quântica é dominada pelo campo magnético, que tende a tornar regulares todos os sistemas, e a fronteira deixa de ser um fator decisivo.

Os bilhares circular e elíptico serviram como um campo de prova, onde testamos a validade da teoria semiclássica feita para bilhares genéricos. Verificamos nesse teste que, a menos de pequenos detalhes quantitativos, existe de fato um comportamento geral presente no bilhar estudado: para um gás confinado em um bilhar isolado, existe uma dependência oscilatória da susceptibilidade com o número de partículas (ou o tamanho do sistema, equivalentemente), essa dependência oscilatória desaparecendo numa média do tipo $\langle \rangle_N$ ou $\langle \rangle_L$. O fato de ocorrer o mesmo em um ensemble de bilhares quadrados [8, 7] é um forte indício de que tal fenômeno é uma propriedade comum a bilhares de fronteira genérica, desde que integráveis em campo magnético nulo.

Embora a superfície de energia do bilhar elíptico seja especial, com a coexistência de dois grupos diferentes de famílias de órbitas periódicas, o esquema semiclássico de Berry-Tabor mostrou-se coerente com o cálculo puramente quântico. Isso ocorre ao menos dentro de um certo limite de temperatura.

A susceptibilidade média apresenta algumas oscilações em campo finito que tendem a desaparecer se o conjunto de sistemas apresenta alguma dispersão em tamanho. A dependência em temperatura é bastante forte: à medida que esta aumenta, a contribuição de cada família tende a diminuir exponencialmente, com rapidez proporcional ao comprimento das órbitas na família. Para temperaturas de moderadas a altas, a susceptibilidade se reduz praticamente àquela originária do modelo de Landau, eventualmente corrigida com uma contribuição devida ao perímetro do bilhar.

Experimentalmente, a dependência com temperatura não é tão dramática. Ainda não se pode explicar exatamente porque teoria e experiência divergem tanto nesse ponto, apesar de ambas concordarem em vários outros pontos. Sem dúvida, existe uma dificuldade em procurar confirmação experimental dessa teoria semiclássica porque, apesar de a experiência de Lévy *et al.* ter sido realizada já faz algum tempo, ela continua sendo a única experiência relevante nessa área.

Existem possíveis extensões para esse trabalho. Um aspecto interessante a ser verificado é: qual o limite de validade do tratamento perturbativo em campo magnético? Um cálculo em campo magnético finito envolve órbitas periódicas exatas do bilhar, e não as órbitas em campo nulo. Observamos na figura 5.4 que, se o fluxo magnético através do sistema for de até alguns quanta de fluxo, a aproximação semiclássica perturbativa permanece boa. Além desse limite, ela perde confiabilidade. O cálculo com órbitas periódicas exatas pode ser feito por exemplo no bilhar circular, que permanece integrável para qualquer valor de B [41]. Esperamos que, nesse sistema, a comparação entre o cálculo perturbativo e o cálculo exato possa ser feita com simplicidade.

Apêndice A

Função de Green para bilhares com campo magnético

A.1 Função de Green para campo magnético finito

No caso de um campo uniforme e constante \mathbf{B} , aplicado na direção ortogonal ao plano do bilhar, a função de Green pode ser obtida das equações (1.4). O operador Hamiltoniano é $H = \frac{1}{2}(\mathbf{p} - \mathbf{A})^2$. Vamos escolher um sistema de coordenadas cilíndricas (r, θ) e o gauge simétrico, $\mathbf{A} = \frac{\mathbf{B} \times \mathbf{r}}{2} = \frac{B r}{2} \hat{\theta}$. Definimos também $\sigma = \frac{B}{|B|}$ (σ : sinal do campo) e $\omega = \frac{|B|}{2}$. Nessas coordenadas, a equação diferencial a ser resolvida é:

$$E G_B + \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} - \frac{\omega^2 r^2}{\hbar^2} - 2i\hbar\omega\sigma \frac{\partial}{\partial \theta} \right\} G_B = \frac{2}{\hbar^2} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

Com $G_B(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = G_B^*(\mathbf{r}', \mathbf{r}; E)$. O termo não-homogêneo dessa equação, $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, não tem simetria cilíndrica. Para resolver convenientemente essa equação, vamos fazer uma mudança de gauge no potencial vetor e no operador H [49]. Definimos a função $\psi = \frac{1}{2\hbar} \mathbf{B} \cdot \mathbf{r}' \times \mathbf{r}$ e aplicamos o operador unitário $e^{i\psi}$ à direita e à esquerda do operador diferencial:

$$\left\{ e^{-i\psi} [E - H(\mathbf{r})] e^{i\psi} \right\} \left[e^{-i\psi} G_B \right] = e^{-i\psi} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'),$$

que resulta em

$$\left[E - \frac{1}{2} \left(e^{-i\psi} \mathbf{p} e^{i\psi} - \mathbf{A} \right)^2 \right] \left[e^{-i\psi} G_B \right] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (\text{A.1})$$

Usando a identidade de Baker-Hausdorff, obtemos

$$e^{-i\psi} \mathbf{p} e^{i\psi} = \mathbf{p} + \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r}',$$

e a equação (A.1) se reduz a:

$$\left[E - \frac{1}{2} \left(-i\hbar \nabla - \frac{1}{2} \mathbf{B} \times (\mathbf{r} - \mathbf{r}') \right)^2 \right] \left[e^{-i\psi} G_B \right] = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

Definindo $G'_B = e^{-i\psi} G_B$, obtemos uma equação no vetor posição relativa, $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$, que não depende de \mathbf{r}' :

$$\left[E - \frac{1}{2} \left(-i\hbar \nabla_{\mathbf{R}} - \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{R} \right)^2 \right] G'_B = \delta(\mathbf{R}). \quad (\text{A.2})$$

Note que o operador de gradiente em relação a \mathbf{R} , $\nabla_{\mathbf{R}}$, é igual aqui a $\nabla_{\mathbf{r}}$ pois \mathbf{r}' e \mathbf{r} são independentes entre si. A equação (A.2) pode ser resolvida agora por separação de variáveis usual (R e ϕ são as coordenadas cilíndricas de \mathbf{R}):

$$\left\{ \frac{2}{\hbar^2} E + \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} \left(R \frac{\partial}{\partial R} \right) + \frac{1}{R^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} - \frac{\omega^2 R^2}{\hbar^2} - 2i\hbar\omega\sigma \frac{\partial}{\partial \phi} \right\} G'_B = \frac{2}{\hbar^2} \delta(\mathbf{R}). \quad (\text{A.3})$$

A parte angular dessa equação é resolvida por uma exponencial imaginária, $e^{i\ell\phi}$. A parte radial, com $\frac{\partial}{\partial \phi}$ substituído por $i\ell$, é satisfeita por funções do tipo

$$\left(\sqrt{\frac{\omega}{\hbar}} R \right)^{|\ell|} e^{-\omega R^2 / 2\hbar} F \left(\alpha_{\ell}, |\ell| + 1; \frac{\omega}{\hbar} R^2 \right),$$

onde F é uma função hipergeométrica confluyente [20]. A equação diferencial dessas funções é:

$$\left[z \frac{d^2}{dz^2} + (c - z) \frac{d}{dz} - a \right] F(a, c; z) = 0.$$

A solução da equação homogênea associada à (A.3) é uma combinação linear de funções do tipo:

$$e^{il\phi} \left(\sqrt{\frac{\omega}{\hbar}} R \right)^{|l|} e^{-\omega R^2/2\hbar} F \left(\alpha_l, |l| + 1; \frac{\omega}{\hbar} R^2 \right), \quad (\text{A.4})$$

para todos os valores possíveis de l e um para de funções hipergeométricas confluentes.

Por outro lado, o operador diferencial de (A.3) tem simetria cilíndrica em \mathbf{R} . Como o termo não-homogêneo e as condições de contorno também são independentes do ângulo ϕ , então podemos assumir que G'_B só depende do valor absoluto $R = |\mathbf{R}|$. Para encontrar a solução $G'_B(R)$, vamos explicitar as condições de contorno em $R = 0$. Integrando ambos os membros da eq. (A.2) em um círculo de raio ϵ em torno da origem, obtemos;

$$E \int_0^\epsilon 2\pi R G'_B(R) dR + \frac{\hbar^2}{2} \left[2\pi R \frac{\partial}{\partial R} G'_B \right] \Big|_0^\epsilon - \frac{B^2}{8} \int_0^\epsilon 2\pi R^3 G'_B(R) dR = 1.$$

G'_B deve ser singular em $R = 0$, devido à função $\delta(\mathbf{R})$, mas espera-se que a singularidade nas derivadas de G'_B seja maior ainda. Por isso, vamos reter na equação acima apenas os termos de derivada primeira, que resulta na equação diferencial aproximada:

$$\lim_{R \rightarrow 0} \left\{ \hbar^2 \pi R \frac{\partial}{\partial R} G'_B \right\} = 1,$$

com solução:

$$G'_B(R) \approx \frac{1}{\pi \hbar^2} \ln(R) + \text{constante} \quad R \rightarrow 0. \quad (\text{A.5})$$

Basta agora procurar uma combinação linear do tipo (A.4) que satisfaça simultaneamente a equação (A.5) e que seja nula no limite $R \rightarrow \infty$. De fato, a única solução para esse problema é a função:

$$-\frac{1}{2\pi \hbar^2} \Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{E}{2\hbar\omega}\right) e^{-\frac{\omega}{2\hbar} R^2} \Psi\left(\frac{1}{2} - \frac{E}{2\hbar\omega}, 1; \frac{\omega}{\hbar} R^2\right).$$

Sabendo G'_B , basta restaurar a fase de gauge para chegarmos na função de Green, eq. (1.9).

A.2 Limite de campo magnético nulo na função de Green

Ainda podemos demonstrar que a expressão (1.9) se reduz a (1.5) se $B = 0$. Para isso, estabelecemos uma notação apropriada:

$$\begin{cases} a = \frac{1}{2} + \frac{E+i\eta}{2\hbar\omega} \\ z = R^2 \frac{E+i\eta}{2\hbar^2} \end{cases},$$

para obter:

$$G_B = -\frac{1}{2\pi\hbar^2} e^{\frac{i}{2\hbar}\mathbf{B}\cdot\mathbf{r}'\times\mathbf{r}} \Gamma(1-a) e^{-\frac{\omega}{2\hbar}R^2} \Psi(1-a, 1; \frac{\omega}{\hbar}R^2).$$

Se estabelecemos o limite $a \rightarrow \infty e^{+i0}$, com z constante, o limite das funções Γ e Ψ separadamente não está bem definido. Porém, o limite do produto $\Gamma\Psi$ está bem definido, como veremos a seguir. Além disso, as funções exponenciais todas desaparecem nesse limite de campo baixo, e temos:

$$\lim_{B \rightarrow 0} G_B(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \lim_{a \rightarrow \infty e^{+i0}} \left\{ \frac{-1}{2\pi\hbar^2} \Gamma(1-a) \Psi(1-a, 1; z/a) \right\}.$$

Usamos a equação 6.7(7) da ref. [20],

$$\Gamma(1-a)\Psi(1-a, a; -z) = e^{-z} \left[\Gamma(a)\Psi(a, 1; z) - e^{i\pi a} \Gamma(a)\Gamma(1-a)\Phi(a, 1; z) \right],$$

para obter

$$\lim_{B \rightarrow 0} G_B(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = \frac{-1}{2\pi\hbar^2} \lim_{a \rightarrow \infty e^{+i0}} \left\{ \frac{\Gamma(a)\Psi(a, 1; -z/a) - e^{i\pi a} \Gamma(a)\Gamma(1-a)\Phi(a, 1; -z/a)}{e^{i\pi a} \Gamma(a)\Gamma(1-a)\Phi(a, 1; -z/a)} \right\}.$$

Os limites assintóticos importantes são (eq. 6.9(17) e 6.9(16) de [20]):

$$\lim_{a \rightarrow \infty} \Phi(a, c; -z/a) = J_0(2\sqrt{x}),$$

$$\lim_{a \rightarrow \infty} \Gamma(a)\Psi(a, c; -z/a) = i\pi H_0^{(1)}(2\sqrt{x})$$

e

$$\lim_{a \rightarrow \infty e^{+i0}} e^{i\pi a} \Gamma(a) \Gamma(1-a) = \lim_{a \rightarrow \infty e^{+i0}} \frac{e^{i\pi a}}{\sin(\pi a)} = 0,$$

e o resultado final é:

$$\lim_{B \rightarrow 0} G_B = -\frac{1}{2\hbar^2} H_0^{(1)} \left(\frac{\sqrt{2ER}}{\hbar} \right),$$

que é a própria função G_0 (da eq. 1.5). Nesse cálculo, foi essencial a preservação de uma pequena parte imaginária, $i\eta$, agregada à energia.

A.3 Função de Green para campo magnético perturbativo

O cálculo anterior prova que a função de Green de campo finito obedece ao limite correto quando a intensidade de campo é tornada nula. Porém, ele não fornece diretamente as primeiras correções na função de Green quando o campo é pequeno mas não nulo. Essas correções podem ser obtidas por um procedimento semelhante ao da seção A.1. Em lugar de resolver exatamente a eq. (A.3) exatamente, vamos procurar uma solução perturbativa no parâmetro $\hbar\omega/E$, do tipo

$$G'_B \cong -\frac{i}{2\hbar^2} H_0^{(1)}(kR) + \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{\hbar\omega}{E} \right)^n f_n(kR), \quad (\text{A.6})$$

onde cada termo da soma corresponde a uma contribuição de ordem $(\hbar\omega/E)^n$ na função de Green. Usamos a notação $k = \sqrt{2E}/\hbar$. A contribuição de ordem nula é exatamente a função de Green de campo nulo, apresentada na seção anterior. O fato de G'_B ser invariante por mudança de sinal no campo magnético faz com que apenas contribuições com n par estejam presentes na equação acima. O termo de acoplamento campo-momento angular (eq. A.3) aplicado sobre essa função resulta zero. Substituindo a solução acima na equação diferencial (A.3) e separando contribuições de mesma ordem, obtemos o conjunto de equações diferenciais acopladas:

$$\left\{ E + \frac{\hbar^2}{2} \nabla^2 \right\} f_n(kR) = \begin{cases} -\frac{iE^2}{4\hbar^2} R^2 H_0^{(1)}(kR) & n = 2 \\ \frac{R^2 E^2}{2\hbar^2} f_{n-2}(kR) & n > 2 \end{cases}$$

Resolvendo ordenadamente cada uma dessas equações, é possível obter a função de Green como uma série em potências de $\hbar\omega/E$, que pode ser truncada em algum ponto. A condição para isso é que o campo magnético seja suficientemente baixo ou a energia seja suficientemente alta de forma que $\hbar\omega/E \ll 1$. Em especial, a função f_2 é dada por

$$f_2(kR) = -\frac{iE}{24\hbar^4} \left\{ kR^3 H_1^{(1)}(kR) - R^2 H_2^{(1)}(kR) \right\} ,$$

e a função de Green, com primeira correção em campo magnético, é

$$G_B(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) \cong -\frac{i}{2\hbar^2} e^{\frac{i}{2\hbar} \mathbf{B} \cdot \mathbf{r}' \times \mathbf{r}} \left[H_0^{(1)}(kR) + \frac{\omega^2}{12E} \left\{ kR^3 H_1^{(1)}(kR) - R^2 H_2^{(1)}(kR) \right\} \right] \quad (\text{A.7})$$

Apêndice B

Expansão assintótica da Função Espectral

Nesse apêndice, vamos calcular a função espectral definida pela eq. (3.8), no limite $s \gg 1$. Começamos por definir as funções

$$\mathcal{F}_\Omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = G_\Omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) - G_B(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E)$$

e

$$\mathcal{F}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) = G_B(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) - G_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; E) ,$$

onde G_0 e G_B são dadas respectivamente pelas equações (1.5) e (1.9). G_Ω é a função de Green exata do bilhar. Com essas definições, $\Phi(s)$ poderá ser escrita como a soma de $\Phi_\Omega(s)$ com $\Phi_0(s)$, onde

$$\Phi_\Omega(s) = -\text{Tr} \{ \mathcal{F}_\Omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; -s) \}$$

e

$$\Phi_0(s) = -\text{Tr} \{ \mathcal{F}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; -s) \} .$$

A função \mathcal{F}_Ω deve satisfazer o par de equações diferenciais homogêneas, $\hat{H}(\mathbf{r})\mathcal{F}_\Omega = 0$ e $\hat{H}^*(\mathbf{r}')\mathcal{F}_\Omega = 0$, mas as condições de contorno devem ser tais que G_Ω se anule na fronteira do bilhar. Condições de contorno desse tipo podem ser tratadas com uma representação integral do tipo

$$\mathcal{F}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; -s) = \int_B dS_0 \nu(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}') \left\{ \frac{\partial}{\partial n_0} + \frac{i}{\hbar} A_{n_0} \right\} G_B(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0; -s) , \quad (\text{B.1})$$

que satisfaz automaticamente as equações diferenciais se for assegurado que: (1) a função desconhecida ν obedeça a relação $\nu(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}') = \nu^*(\mathbf{r}', \mathbf{r}_0)$, e (2) que os pontos \mathbf{r} e \mathbf{r}' estejam dentro do bilhar. Se acontecer de um desses pontos estar sobre a fronteira do bilhar, a função de Green fatalmente irá divergir quando a variável de integração \mathbf{r}_0 passar por ele. Por isso, a representação acima deve ser tratada com cuidado se quisermos estabelecer corretamente as condições de contorno. Em lugar de colocar \mathbf{r} ou \mathbf{r}' exatamente sobre a fronteira, adotamos um processo de limite:

$$\lim_{\mathbf{r} \rightarrow \mathcal{B}} \mathcal{F}_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; -s) = -G_B(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; -s) .$$

Quando esse limite é imposto sobre a eq. (B.1), encontramos uma equação integral para a função de densidade ν :

$$-G_B(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}'; -s) = \frac{1}{\hbar^2} \nu(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}') + \int_{\mathcal{B}} dS_1 \nu(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}') \left\{ \frac{\partial}{\partial n_1} + \frac{i}{\hbar} A_{n_1} \right\} G_B(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1; -s) . \quad (\text{B.2})$$

Equações integrais desse tipo aparecem freqüentemente quando se resolve problemas de condições de contorno em que o operador diferencial é o laplaciano ou o operador de Helmholtz, $(\nabla^2 + k^2)$. No último caso, a representação correta envolve o operador $\frac{\partial}{\partial n_1}$ em lugar de $\left\{ \frac{\partial}{\partial n_1} + \frac{i}{\hbar} A_{n_1} \right\}$ [38]. O termo $\frac{i}{\hbar} A_n$, que está presente na representação com campo magnético, assegura que a solução do problema apresente propriedades de invariância por mudança do gauge magnético. Podemos admitir que uma solução aproximada da equação (B.2) seja obtida desprezando o termo integral. Nesse caso, a aproximação ν_0 para a função de densidade é

$$\nu_0(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}') = -\hbar^2 G_B(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}'; -s) .$$

A aproximação seguinte aparece quando ν_0 é colocada dentro do termo integral:

$$\nu_1(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}') = -\hbar^2 G_B(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}'; -s) - \hbar^2 \int_{\mathcal{B}} dS_1 \nu_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}') \left\{ \frac{\partial}{\partial n_1} + \frac{i}{\hbar} A_{n_1} \right\} G_B(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1; -s) .$$

O procedimento pode ser repetido sucessivamente: da aproximação ν_n , encontramos ν_{n+1} por

$$\nu_{n+1}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}') = -\hbar^2 G_B(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}'; -s) - \hbar^2 \int_{\mathcal{B}} dS_1 \nu_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}') \left\{ \frac{\partial}{\partial n_1} + \frac{i}{\hbar} A_{n_1} \right\} G_B(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1; -s) .$$

Espera-se que, no limite $n \rightarrow \infty$, a seqüência convirja para a função correta ν .

Em termos de G_Ω , esse método de aproximações sucessivas tem um significado intuitivo. A função de Green do bilhar aparece na forma:

$$G_\Omega(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; -s) = G_B(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; -s) + \int_B dS_0 \left(-\hbar^2\right) G_B(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}'; -s) \left\{ \frac{\partial}{\partial n_0} + \frac{i}{\hbar} A_{n_0} \right\} G_B(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0; -s) + \int_B dS_0 \left(-\hbar^2\right) G_B(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}'; -s) \left\{ \frac{\partial}{\partial n_0} + \frac{i}{\hbar} A_{n_0} \right\} \int_B dS_1 \left(-\hbar^2\right) \cdot G_B(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_0; -s) \left\{ \frac{\partial}{\partial n_1} + \frac{i}{\hbar} A_{n_1} \right\} G_B(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1; -s) + \dots \quad (\text{B.3})$$

O primeiro termo corresponde à função de Green na ausência de fronteira. Semiclassicamente, as trajetórias que contribuem para a função de Green partem do ponto \mathbf{r}' e vão diretamente para \mathbf{r} . O segundo termo contém a contribuição das trajetórias que partem de \mathbf{r}' , colidem com a fronteira uma vez (em \mathbf{r}_0), e chegam em \mathbf{r} . O terceiro termo contém a contribuição das trajetórias que colidem duas vezes com a fronteira (em \mathbf{r}_0 e \mathbf{r}_1), antes de chegarem em \mathbf{r} . Os termos seguintes levam em conta trajetórias que colidem três vezes, quatro vezes, e assim por diante. Note que o processo iterativo sempre adiciona uma integração a mais em relação ao termo anterior.

Para a função Φ_Ω , uma boa aproximação aparece quando consideramos o primeiro termo de fronteira de (B.3):

$$\Phi_\Omega(s) \cong \hbar^2 \int_{\text{int}B} d^2\mathbf{r} \left\{ \int_B dS_0 G_B(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}; -s) \left\{ \frac{\partial}{\partial n_0} + \frac{i}{\hbar} A_{n_0} \right\} G_B(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0; -s) \right\} . \quad (\text{B.4})$$

No regime de energia negativa e de valor absoluto muito grande ($s \gg \hbar\omega$ e $s \gg \hbar^2/l^2$, para algum comprimento característico l do bilhar), a função de Green pode ser bem aproximada pela da eq. (A.7). Mais importante do que isso, a série iterativa para G_Ω converge, o que justifica a truncagem dela já no primeiro termo. A expressão de G_B para energia negativa é

$$G_B(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0; -s) \cong -\frac{1}{\pi\hbar^2} e^{\frac{i}{2\hbar} \mathbf{B} \cdot \mathbf{r}' \times \mathbf{r}} \left[K_0(\alpha |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|) - \frac{\omega^2 R^4}{6\hbar^2} \left\{ \frac{1}{\alpha |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} K_1(\alpha |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|) - \frac{1}{\alpha^2 |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^2} K_2(\alpha |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|) \right\} \right] ,$$

onde $\alpha = \sqrt{2s}/\hbar$. Tipicamente, essa função decai exponencialmente com a distância entre os pontos \mathbf{r} e \mathbf{r}_0 , a taxa de decaimento sendo α . Isso indica

que a contribuição principal nas integrais de (B.4) é quando o ponto \mathbf{r} está próximo da fronteira. Em suas vizinhanças, a curvatura da fronteira pode ser desprezada, e a contribuição principal na função espectral é

$$\Phi_{\Omega}(s) \cong -\sqrt{\frac{1}{2}} \frac{\mathcal{L}}{4\hbar} s^{-1/2}.$$

A primeira contribuição dependente de campo magnético é

$$-\frac{9}{256} \sqrt{\frac{1}{2}} \frac{\hbar\omega^2 \mathcal{L}}{s^{-5/2}}.$$

Para Φ_0 , o cálculo é mais simples, pois G_B e G_0 são conhecidas pelas eq. (A.7) e (1.5). O resultado final é:

$$\Phi_0(s) \cong -\frac{\omega^2 \mathcal{A}}{12\pi} s^{-2}.$$

Reunindo esses resultados, obtemos a função espectral

$$\Phi(s) \cong \left\{ -\sqrt{\frac{1}{2}} \frac{\mathcal{L}}{4\hbar} s^{-1/2} \right\} + \left\{ -\frac{\omega^2 \mathcal{A}}{12\pi} s^{-2} - \frac{9}{256} \sqrt{\frac{1}{2}} \frac{\hbar\omega^2 \mathcal{L}}{s^{-5/2}} \right\}, \quad (\text{B.5})$$

onde as contribuições dependentes de campo magnético estão separadas das independentes de campo. Nessa função espectral, a única informação do bilhar aparece na área, \mathcal{A} , e no perímetro, \mathcal{L} . Coisas como a curvatura da fronteira, existência ou não de "bicos" na fronteira ou de "buracos" dentro do bilhar influem em correções presentes tanto nos termos seguintes da série iterativa quanto em contribuições ignoradas no cálculo das integrais. Apesar de todas as aproximações feitas, essa expressão de $\Phi(s)$ fornece uma boa descrição do potencial grand-canônico médio e da susceptibilidade grand-canônica média. Da expansão em série de Φ , obtemos a expansão em série do potencial grand-canônico:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Phi(s) \cong \sum_{i=1}^k c_i \Gamma(1-r_i) s^{r_i-1} + o(s^{r_{k+1}-1}) \\ \Omega(\mu) \cong -g_s \frac{\mathcal{A}}{4\pi\hbar^2} \mu^2 - g_s \sum_{i=1}^k \frac{c_i}{\Gamma(2+r_i)} \mu^{1+r_i} + o(\mu^{r_{k+1}+1}), \end{array} \right.$$

que resulta em:

$$\Omega(\mu) = g_s \left\{ -\frac{\mathcal{A}}{4\pi\hbar^2} \mu^2 + \frac{\mathcal{L}}{3\sqrt{2}\pi\hbar} \mu^{3/2} + o(\mu^{<3/2}) \right\} + g_s \left\{ \frac{\omega^2 \mathcal{A}}{12\pi} - \frac{3}{64\pi} \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{\hbar\omega^2}{\sqrt{\mu}} \mathcal{L} + o(\mu^{<-1/2}) \right\}.$$

Bibliografia

- [1] *The Quantum Hall Effect*, ed. R.E. Prange and S.M. Girvin (1990) (Springer-Verlag, NY)
- [2] M. C. Gutzwiller, *J. Math. Phys.* **12** (1971) 343; M. C. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics* (Springer-Verlag, New York, 1990)
- [3] M. V. Berry, M. Tabor, *Proc. R. Soc. A* **349** (1976) 101; M. V. Berry, M. Tabor, *J. Phys. A* **10** (1977) 371
- [4] M. Robnik and M. V. Berry, *J. Phys. A* **18** (1985) 1361;
- [5] L. P. Lévy, D. H. Reich, L. Pfeiffer, K. West, *Physica B* **189** (1993) 204
- [6] K. Nakamura, H. Thomas, *Phys. Rev. Lett.* **61** (1988) 247
- [7] F. von Oppen, *Phys. Rev. B* **50** (1994) 17151; D. Ullmo, K. Richter, R. Jalabert, *Phys. Rev. Lett.* **74** (1995) 383
- [8] K. Richter, D. Ullmo, R. Jalabert, *Phys. Rep.* **276** (1996) 1
- [9] M. L. Tiago, T. O. Carvalho, M. A. M. Aguiar, *Phys. Rev. E* **55** (1997) 65
- [10] R. J. Ridell Jr., *J. Comp. Phys.* **31** (1979) 21; R. J. Ridell Jr., *J. Comp. Phys.* **31** (1979) 42
- [11] R. Aurich, F. Steiner, *Physica D* **64** (1993) 185
- [12] E. J. Heller, *Chaos and Quantum Systems Proc. NATO ASI Les Houches Summer School*, ed. M. J. Giannoni, A. Voros, J. Zinn-Justin (Amsterdam, Elsevier) p. 547 (1989); E. J. Heller, *Phys. Rev. Lett.* **53** (1984) 1515

- [13] S. L. Sobolev, *Partial Differential Equations of Mathematical Physics*; trad. E. R. Dawson, T. A. A. Broadbent (Pergamon Press, Oxford, 1964)
- [14] R. Courant, D. Hilbert, *Methods of Mathematical Physics* (J. Wiley & Sons Inc., New York, 1953)
- [15] C. D. Green, *Integral Equations Methods* (Nelson, London, 1969)
- [16] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics* (J. Wiley, New York, 1970)
- [17] H. M. Nussenzveig, *Causality and Dispersion Relations* (Academic Press, New York, 1972)
- [18] R. P. Feynman, A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals* (Mc Graw-Hill Book Co., New York, 1965)
- [19] T. Ueta, *J. Phys. Soc. Japan* **61** (1992) 4314
- [20] A. Erdélyi, ed., *Higher Transcendental Functions*, 3 vol. (McGraw-Hill Book Co., New York, 1953)
- [21] H. Buchholz, *The Confluent Hypergeometric Function* (Springer Verlag, New York, 1969)
- [22] L. D. Landau, *Z. Phys.* **69** (1930) 629
- [23] K. Nakamura, K. Ito, K. Takane, *J. Phys. A* **27** (1994) 5889
- [24] W. H. Press et al., *Numerical Recipes in FORTRAN, the Art of Scientific Computing*, 2nd ed. sec. 2.6 (Cambridge Univ. Press, 1992)
- [25] M.A.M. de Aguiar, *Phys. Rev. E* **53**, 4555 (1996)
- [26] M. V. Berry, M. Wilkinson, *Proc. R. Soc. London A* **392** (1984) 15
- [27] B. Li, M. Robnik, *J. Phys. A* **27** (1994) 5509; B. Li, M. Robnik, *J. Phys. A* **28** (1995) 2799
- [28] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Statistical Physics* (Pergamon Press, Oxford, 1985)
- [29] M. Robnik, *J. Phys. A* **19**(1986) 3619

- [30] C. Kittel, *Elementary Statistical Physics* (J. Wiley & Sons Inc., New York, 1958); J. H. van Leeuwen, *J. Phys* (Paris) **2** (1921) 361
- [31] E. H. Sondheimer, A. H. Wilson *Proc. R. Soc. A* **210** (1952) 173
- [32] R. E. Peierls, *Surprises in Theoretical Physics* (Princeton, Princeton University Press, 1979)
- [33] P. John, L. G. Suttorp, *J. Phys. A* **28**(1995) 6087
- [34] K. Stewardson, R. T. Waechter, *Proc. Camb. Phil. Soc.* **69** (1971) 353
- [35] M. V. Berry, C. J. Howls; *Proc. R. Soc. A* **447** (1994) 527
- [36] M Brack, O. Genzken, K. Hansen, *Z. Phys. D* **21** (1991) 65
- [37] M. O. Terra, comunicação não-publicada
- [38] R. Balian, C. Bloch, *Ann. Phys.* **60** (1970) 401; R. Balian, C. Bloch, *Ann. Phys.* **64** (1971) 271;
- [39] M. O. Terra, M. A. M. de Aguiar, M. L. Tiago, a ser publicado no *Physical Review E* (1998)
- [40] S. Tomsovic, M. Grinberg, D. Ullmo, *Phys. Rev. Lett.* **75** (1995) 4346; D. Ullmo, M. Grinberg, S. Tomsovic, *Phys. Rev. E* **54** (1995) 136
- [41] J. Blaschke, M. Brack, *Physical Review A* **56** (1997) 182
- [42] H. Goldstein, *Classical Mechanics* (Addison-Wesley, Reading MA, 1980)
- [43] J. B. Keller, S. I. Rubinow, *Ann. Phys.* **9** (1960) 24
- [44] H. Waalkens, J. Wiersig, H. R. Dullin, *Ann. Phys.* **260** (1997) 50
- [45] G. Arfken, *Mathematical Methods for Physicists* (Academic Press Inc., New York, 1970)
- [46] I. Gradshteyn and I. Ryzhik, *Table of Integrals Series and Products* (Academic Press Inc., New York, 1980)
- [47] B. L. Altshuler, Y. Gefen, Y. Imry, *Phy. Rev. Lett.* **66** (1991) 88

- [48] S.D. Prado and M.A.M. de Aguiar, *Phys. Rev. E* **54** (1996) 1369
- [49] J. J. Sakurai, S. F. Tuan, *Modern Quantum Mechanics* (Addison-Wesley, Reading MA, 1994)