

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS  
INSTITUTO DE FÍSICA “GLEB WATAGHIN”

**Integrais de Caminho  
para o Mapa do Padeiro**

Marcos Gomes Eleutério da Luz 

Orientador: Prof. Dr. Alfredo Miguel  
Ozorio de Almeida

Janeiro de 1995

# Integrais de Caminho para o Mapa do Padeiro

Marcos Gomes Eleutério da Luz

Orientador: Prof. Dr. Alfredo Miguel Ozorio de Almeida

Este exemplar corresponde à redação final da tese defendida pelo aluno Marcos Gomes Eleutério da Luz e aprovada pela Comissão julgadora.

8/5/95

Alfredo M. Ozorio de Almeida

Tese apresentada ao Instituto de Física 'Gleb Wataghin' da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos à obtenção do título de Doutor em Ciências  
- Janeiro de 1995

*Existem dois tipos de homens aos quais devemos respeitar, os homens de idéias e os homens de ações. Infelizmente, não se “aprende” a ter idéias, pois são inerentes a cada um. Mas as ações, estas sim, podem ser “cultivadas” com o tempo. Quanto às idéias, sou o que sou, mas sinceramente espero ter ficado, ao final deste trabalho, um pouquinho mais perto de ser um homem de ação.*

## Agradecimentos

Antes de mais nada aos meus pais, por tudo que sou

Ao meu orientador Ozorio de Almeida, por me ensinar uma parte do pouco que sei

À todos os amigos que me acompanharam nesta longa jornada, pois sozinho não conseguimos andar

Em especial ao amigos das “repúblicas” em que morei, pois como dizem por aí, um homem e seu castelo

Ao amigo Luis Guilherme, por ajudas computacionais no decorrer do trabalho

Ao amigo Giancarlo, por ajudas na editoração deste trabalho

À Fapesp e Faep (Unicamp), pelo suporte financeiro

E finalmente à Liberdade, única forma autêntica de expressão

## Resumo

Derivamos, para a transformação do padeiro, uma soma exata formal de integrais de caminho para o propagador quântico e seu traço. As fases dependem somente das ações clássicas, a exemplo das integrais de caminho usuais, e as somas são sobre todas as órbitas simbólicas. A dedução baseia-se em transformações de Poisson múltiplas, que resultam em uma soma infinita de integrais, mas nossas computações para o propagador e seu traço mostram que os resultados são rapidamente convergentes. Correções quânticas ao propagador semiclássico são discutidas e fórmulas explícitas são apresentadas para o caso de duas iteradas do mapa. Desenvolvemos também uma aproximação estacionária que leva em conta efeitos de borda. Tal aproximação não fornece nada de novo para o propagador, mas se mostra interessante no caso do traço, dando resultados melhores que o semiclássico se considerarmos tempos menores que o “log-time”.

## Abstract

We derive a formally exact sum of path integrals for the quantum propagator of the baker's transformation. The phases depend only on the classical actions as in usual phase space path integrals and the sums are over all the symbolic orbits. The deduction depends on multiple Poisson transformations, which lead to a further infinite sum of integrals, but our computations for the propagator and its trace show that this is rapidly convergent. Quantum corrections to the semiclassical propagator are discussed and explicit formulae for two iterations are presented. We also developed an stationary approximation considering edge effects. Such approximation gives nothing new for the propagator, but it becomes interesting for the trace, provide better results than the semiclassical one for times earlier than the "log-time".

# Conteúdo

<b>Agradecimentos</b>	<b>ii</b>
<b>Resumo</b>	<b>iii</b>
<b>Abstract</b>	<b>iv</b>
<b>Conteúdo</b>	<b>vi</b>
<b>Nota sobre as Figuras</b>	<b>vii</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Revisão do Mapa do Padeiro</b>	<b>3</b>
2.1 Mapa Clássico . . . . .	3
2.2 Mapa Quântico . . . . .	5
2.3 Quantização Semiclássica . . . . .	7
<b>3 Integral de Caminho para o Mapa Quântico Iterado</b>	<b>9</b>
<b>4 O Caso Particular <math>l = 2</math></b>	<b>14</b>
4.1 O Propagador . . . . .	14
4.2 O traço do propagador . . . . .	31

4.3	Contribuições Semiclássicas e Puramente Quânticas ao Propagador	
	Exato . . . . .	35
4.4	Uma Expressão Alternativa para o Propagador . . . . .	44
<b>5</b>	<b>O Caso Geral I</b>	<b>46</b>
5.1	Aproximação Borda-Estacionária . . . . .	47
5.2	O Propagador . . . . .	50
	5.2.1 Truncamento da Soma de Poisson . . . . .	50
	5.2.2 Correções ao Propagador Semiclássico . . . . .	70
5.3	O Traço do Propagador . . . . .	94
<b>6</b>	<b>Conclusão</b>	<b>103</b>
<b>A</b>	<b>Tempo e Constante de Planck na Aproximação Semiclássica</b>	<b>105</b>
	A.1 Avaliação do “Break-Time” . . . . .	105
	A.2 Não-Comutabilidade de $t \rightarrow \infty$ com $\hbar \rightarrow 0$ : Um Exemplo Simples . .	106
<b>B</b>	<b>Dedução da Aproximação Semiclássica</b>	<b>107</b>
<b>C</b>	<b>Dedução da Integral (4.3)</b>	<b>110</b>
<b>D</b>	<b>Deduções das Aproximações (4.19) e (4.29)</b>	<b>112</b>
	<b>Bibliografia</b>	<b>116</b>

# Nota sobre as Figuras

Usamos neste trabalho, para a quantização do mapa do padeiro, as condições anti-periódicas propostas por M. Saraceno, ou seja, as coordenadas quânticas do mapa devem ser escritas como  $m + 1/2$  para o momento e  $n + 1/2$  para a posição (sendo  $m, n = 0, 1, \dots, N - 1$ ), ao invés de puramente  $m$  e  $n$  como na quantização de Balazs e Voros. Entretanto, por comodidade, escrevemos em nossos gráficos as coordenadas de momento e posição simplesmente como  $m$  e  $n$ , mas considerando que assumem os valores semi-inteiros corretos.

Atenção especial também deve ser dada às escalas nas figuras, pois não são todas as mesmas devido aos diversos intervalos de valores que as amplitudes dos propagadores e de seus traços assumem.

# Capítulo 1

## Introdução

O estudo de sistemas dinâmicos não-lineares é relativamente recente, remontando aos trabalhos de Poincaré no início do século. Mais recente ainda é o estudo da quantização dos mesmos, principalmente no contexto de uma teoria semiclássica, que possa fornecer comportamentos quânticos a partir de estruturas puramente clássicas.

A dificuldade de uma tal teoria semiclássica já era apontada em 1917 (portanto antes mesmo da teoria quântica moderna) pela mente visionária de A. Einstein [1]. Foi no entanto, em uma série de trabalhos de Gutzwiller, considerando a fórmula do propagador semiclássico de Van-Vleck [2], que se desenvolveu o ferramental necessário para o entendimento de sistemas quânticos, a partir de seus análogos clássicos caóticos. Desde então, vem-se perguntando quais seriam as características da chamada caologia quântica, ou seja, que tipos de comportamentos “não-usuais” seriam esperados em sistemas quânticos, para os quais as contrapartidas clássicas fossem caóticas; por exemplo, as formas das distribuições de níveis de energia (uma boa visão geral sobre estas questões é dada no livro de M.C. Gutzwiller [3]).

Entre estas indagações, uma das que mais tem sido investigadas nestes últimos anos é a validade da aproximação semiclássica, ao considerarmos o limite de tempos grandes. Este problema está ligado ao grau de “resolução” que podemos ter dos níveis de energia do sistema quântico, quando usamos a fórmula do traço de Gutzwiller [4]. Surpreendentemente, tem-se verificado bons resultados semiclássicos mesmo quando ultrapassamos os tempos estimados para uma boa concordância da aproximação com o resultado exato. Tal tempo limite é chamado de “break-time” (para uma estimativa geral do “break-time” ver Apêndice A).

Neste contexto, torna-se muito importante examinar a derivação dos cálculos semiclássicos, com o objetivo de se estimar as magnitudes de correções quânticas. Certamente que um tal programa é extremamente ambicioso em sua generalidade, mas factível para um modelo específico, que de forma geral tenha uma dinâmica caótica no limite clássico, mas ao mesmo tempo simples de ser calculada.

Certamente um bom candidato a este projeto pode ser “encontrado” entre os mapas no toro, sistemas discretos no tempo e com uma evolução dinâmica dada

em uma região finita do espaço de fase. Seus parentescos com sistemas contínuos no tempo podem ser entendidos a partir das Seções de Poincarè destes últimos. A vantagem dos mapas no toro é que apresentam comportamento caótico mesmo tendo um número de graus de liberdade menor que os dos sistemas usuais.

Seguindo então estes requisitos, torna-se óbvia a escolha do mapa do padeiro para tal programa. Em primeiro lugar é um paradigma do chamado “hard-chaos”, na terminologia de Gutzwiller, ou seja, um sistema puramente hiperbólico. Não possui portanto remanescências de integrabilidade como no caso do mapa do rotor quicado [5] ou degenerescências como no caso do mapa do gato [6]. Em segundo, contém todos os ingredientes básicos da dinâmica caótica de um sistema conservativo. Na conhecida ferradura de Smale [7], a evolução temporal cria estiramentos e compressões no espaço, que vão recaindo recorrentemente sobre si mesmos, ilustrando assim a complexidade topológica do espaço de fase de um sistema não-linear. O mapa do padeiro pode ser visualizado como a linearização local da ferradura de Smale.

Como um terceiro ponto, podemos citar alguns ‘aspectos técnicos’ do mapa. Sua evolução clássica é descrita facilmente em termos de dinâmica simbólica, sua quantização formal é simples, obtida a partir de algumas analogias com o caso clássico e por último, tem também uma teoria semiclássica já desenvolvida. Para o mapa do padeiro o “break-time”, chamado de “log-time”, é bem especificado. Se  $N$  for o número de estados quânticos do mapa e  $l$  denotar o número de iterações do mesmo, o “log-time”  $l^*$ , fica dado pela relação

$$l^* = \log_2 N. \quad (1.1)$$

Neste trabalho então, propomo-nos estudar o mapa do padeiro considerando o formalismo de integrais de caminho [8] (usualmente considerado o ponto de partida ideal para a aproximação semiclássica) em seu espaço de fase. Preocupações similares podem ser encontradas em trabalhos anteriores na literatura, mas aqui desenvolveremos nossas expressões exatamente, sem a utilização de aproximações ou construções que possam, eventualmente, “encobrir” os pontos mais importantes no entendimento do limite clássico-quântico para o mapa.

Nossos objetivos principais serão:

- (i) Obter uma expressão exata do propagador e de seu traço para um número arbitrário de iteradas do mapa.
- (ii) Reconhecê-la como uma integral de caminho contínua no espaço de fase.
- (iii) Reobter o propagador semiclássico, mas sem as restrições das construções feitas anteriormente.
- (iv) Discutir o alcance de validade da aproximação semiclássica.
- (v) Avaliar as contribuições puramente quânticas ao propagador.
- (vi) Estender a aproximação semiclássica, considerando correções de ordem maior, ou seja, os efeitos de borda do mapa.

A isto é que nos dedicaremos a seguir.

# Capítulo 2

## Revisão do Mapa do Padeiro

### 2.1 Mapa Clássico

O mapa do padeiro [9] é uma transformação definida sobre o quadrado unitário, que preserva área e leva  $(p, q)$  em  $(p', q')$  através da relação

$$\begin{aligned} p' &= \frac{p + [2q]}{2} \\ q' &= 2q - [2q], \end{aligned} \tag{2.1}$$

com  $[x]$  indicando a parte inteira de  $x$ . Sua ação é, portanto, inicialmente comprimir na direção vertical (eixo  $p$ ) e esticar na horizontal (eixo  $q$ ) de uma forma linear e então, cortar e recompor o retângulo resultante (tal dinâmica é mostrada esquematicamente na Figura 2.1).

A análise das propriedades do mapa do padeiro fica extremamente simplificada se usamos, para sua descrição, dinâmica simbólica [9, 10]. Escrevendo as coordenadas

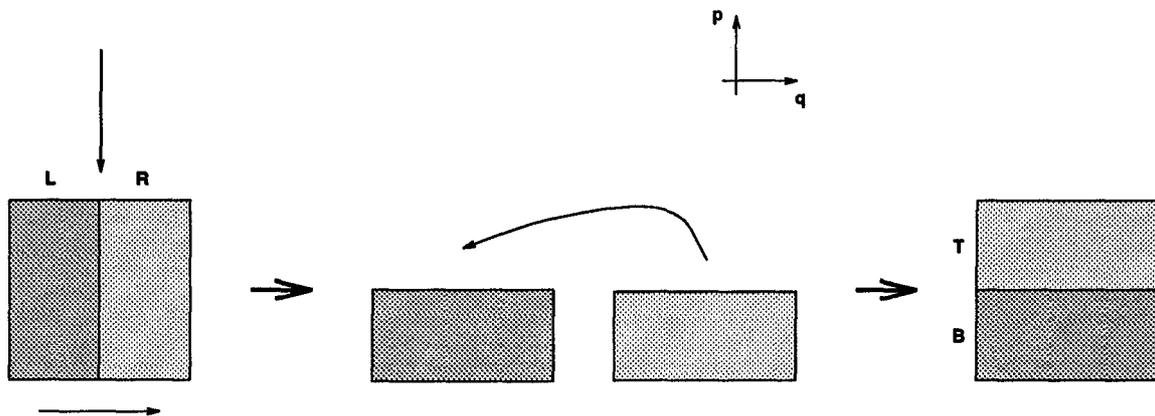


Figura 2.1: Forma esquemática da dinâmica do mapa do padeiro.

$p$  e  $q$  em notação binária,

$$\begin{aligned} p &= \cdot a_0 a_{-1} a_{-2} \dots \\ q &= \cdot a_1 a_2 a_3 \dots, \end{aligned} \quad (2.2)$$

onde  $a_j = 0$  ou  $1$ ; a ação do mapa é, então, isomórfica à transformação  $\sigma(a_j) = a_{j+1}$ , ou seja, representando o par  $(p, q)$  por

$$(p, q) = \dots a_{-2} a_{-1} a_0 \cdot a_1 a_2 a_3 \dots, \quad (2.3)$$

os subseqüentes valores iterados de  $p$  e  $q$  são obtidos pelo deslocamento do ponto decimal (que separa as duas cadeias de  $a_j$ 's em (2.3)) para a direita. Em particular, para a seqüência de decimais  $\nu = a_1 a_2 \dots a_l$ , o conjunto de órbitas *alguma coisa*  $\nu$  *alguma coisa*, após  $l$  iteradas do mapa, se transformará em *alguma coisa*  $\nu$   $\cdot$  *alguma coisa*. Este conjunto de órbitas evoluídas pode ser descrito de duas formas diferentes:

(i) Os sucessivos inteiros  $a_j$  determinam, para cada iterada, em que lado do quadrado a órbita passa;  $a_j = 0$ , lado  $L$  e  $a_j = 1$ , lado  $R$  (ver Figura 2.1). Assim, a seqüência  $\nu$  contém informação parcial sobre a história comum da evolução do conjunto de órbitas para as  $l$  iteradas do mapa.

(ii) Podemos considerar inicialmente o quadrado unitário dividido em  $2^l$  faixas verticais de largura  $1/2^l$  (Figura 2.2). Para uma dada seqüência fixa  $\nu$ , todos os  $q$ 's escritos como  $\nu$  *alguma coisa* pertencem a uma única faixa (determinada por  $\nu$ ). Após  $l$  iteradas, estas faixas são mapeadas em  $2^l$  faixas horizontais de larguras  $1/2^l$ , onde agora todos os  $p$ 's escritos como  $\bar{\nu}$  *alguma coisa* pertencem também a uma única faixa (determinada por  $\bar{\nu}$ , com  $\bar{\nu} = a_l a_{l-1} \dots a_1$ ).

As equações para  $l$  iteradas do mapa do padeiro são então dadas por [11]

$$\begin{aligned} p_l &= 2^{-l}(p_0 + \bar{\nu}) \\ q_l &= 2^l q_0 - \nu. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Desta forma, é fácil mostrar que

$$F_\nu(p_l, q_0) = 2^l p_l q_0 - \nu p_l - \bar{\nu} q_0 \quad (2.5)$$

é uma função geratriz do tipo  $F_2$  [12] para o mapa. As coordenadas do ponto periódico (de período  $l$ ), que se localiza na interseção da faixa vertical  $\nu$  com a faixa horizontal  $\bar{\nu}$ , são facilmente obtidas, se impomos  $p_0 = p_l$  e  $q_0 = q_l$  em (2.4), ou

$$\begin{aligned} p^* &= \frac{\bar{\nu}}{2^l - 1} \\ q^* &= \frac{\nu}{2^l - 1}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

A ação clássica destas órbitas periódicas é determinada por uma transformação de Legendre sobre a função geratriz  $F_\nu(p_l, q_0)$ , resultando em [11]

$$S_\nu = \frac{\nu \bar{\nu}}{2^l - 1} \quad (\text{módulo } 1). \quad (2.7)$$

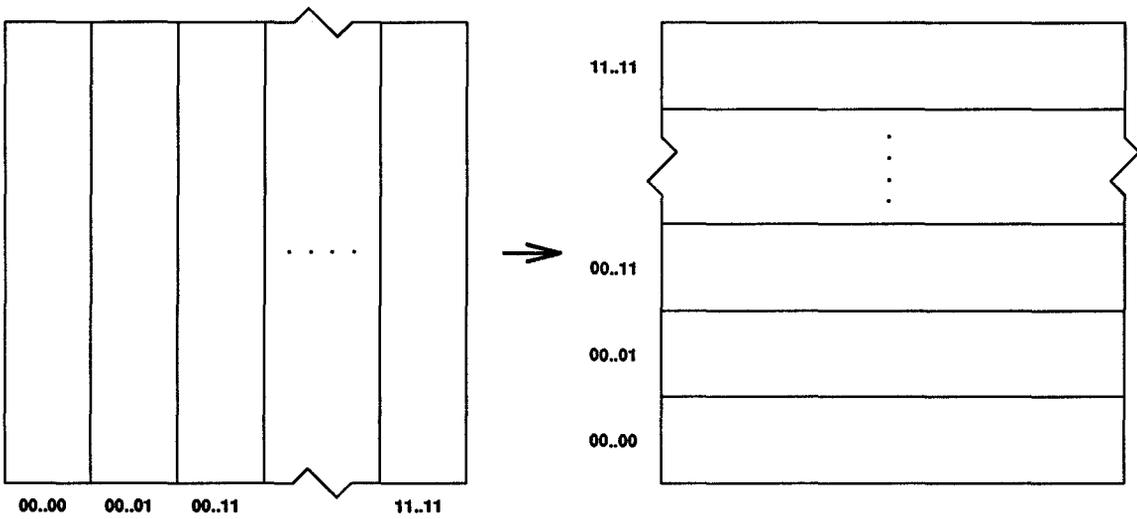


Figura 2.2: Descrição de faixas para a dinâmica simbólica. As faixas verticais são nomeadas de acordo com  $\nu$  e as faixas horizontais de acordo com  $\bar{\nu}$ .

Por último, é interessante também mencionar as simetrias do mapa clássico. Uma é a simetria de reversão temporal anticanônica, ou seja, temos a invariância do mapa do padeiro, se fizermos a troca  $p \leftrightarrow q$  e revertermos o tempo,  $t \rightarrow -t$ . A outra é a simetria de reflexão através do centro do espaço de fase, isto é, toda trajetória  $(p, q)$  tem a trajetória correspondente  $(1 - p, 1 - q)$  (que é a reflexão da primeira, pelo centro  $(1/2, 1/2)$  do quadrado unitário).

## 2.2 Mapa Quântico

A quantização formal do mapa do padeiro foi obtida por Balazs e Voros [13] e ligeiramente modificada por Saraceno [14], impondo condições antiperiódicas nas bordas do mapa de forma a preservar as simetrias do caso clássico (e serão estas as condições assumidas no decorrer deste trabalho). A justificativa destes resultados em termos de óptica paraxial é apresentada por Hannay e colaboradores em [15].

No processo de quantização, precisamos inicialmente discretizar o espaço de fase quântico do mapa (uma vez que o espaço de fase do mapa clássico é compacto). Temos um quadrado de área  $A = 1$  e, portanto, a dimensão  $N$  do espaço vetorial necessário para descrever todos os possíveis estados quânticos do sistema é dada por

$$N = \frac{A}{h} = \frac{1}{2\pi\hbar}, \quad (2.8)$$

onde  $h$  é a constante de Planck. Desta forma, os estados de posição e momento são representados respectivamente pelos vetores  $|n\rangle$  e  $|m\rangle$ , com  $0 \leq m, n \leq N - 1$

(sendo  $N$  tomado como um número par por conveniência). As mudanças entre as representações de posição e momento são mediadas por uma transformada de Fourier discreta, onde cada elemento da matriz é dado por

$$G_N(m, n) = \langle m | n \rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \exp \left[ -\frac{2\pi i}{N} \left( m + \frac{1}{2} \right) \left( n + \frac{1}{2} \right) \right]. \quad (2.9)$$

A definição da dinâmica quântica é feita através de uma estreita comparação com a dinâmica clássica. A Tabela 2.1 faz um paralelo entre o mapa clássico e o mapa quântico, mostrando as analogias existentes entre os dois casos.

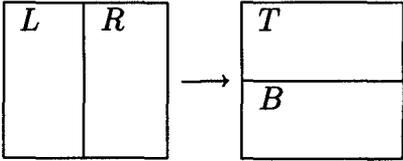
Mapa Clássico	Mapa Quântico
	$\mathcal{H} = \mathcal{L} \oplus \mathcal{R} \longrightarrow \mathcal{H} = \mathcal{B} \oplus \mathcal{T}$ $\mathcal{L} \rightarrow \mathcal{B}$ $\mathcal{R} \rightarrow \mathcal{T}$
$p' = p/2$ $q' = 2q$ <p>para <math>0 \leq q &lt; 1/2</math></p>	$\overline{\Psi}_{2m}^{\mathcal{L}} = \overline{\Phi}_m^{\mathcal{B}} / \sqrt{2}$ $\overline{\Phi}_{2n}^{\mathcal{B}} = \Psi_n^{\mathcal{L}} / \sqrt{2}$ $\overline{\Phi}_m^{\mathcal{B}} = \Psi_n^{\mathcal{L}} = 0 \text{ se } m, n \geq N/2$
$p' = p/2 + 1/2$ $q' = 2q - 1$ <p>para <math>1/2 \leq q &lt; 1</math></p>	$\overline{\Psi}_{2m}^{\mathcal{R}} = \overline{\Phi}_{m+N/2}^{\mathcal{T}} / \sqrt{2}$ $\overline{\Phi}_{2n-N}^{\mathcal{T}} = \Psi_n^{\mathcal{R}} / \sqrt{2}$ $\overline{\Phi}_m^{\mathcal{T}} = \Psi_n^{\mathcal{R}} = 0 \text{ se } m, n < N/2$

Tabela 2.1

O espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$  do mapa quântico inicialmente é decomposto em dois sub-espacos disjuntos, sendo escrito então como  $\mathcal{H} = \mathcal{L} \oplus \mathcal{R}$  (aqui,  $\oplus$  é a notação para soma direta de sub-espacos). Estados pertencentes à  $\mathcal{L}$  e  $\mathcal{R}$ ,  $\Psi^{\mathcal{L}}$  e  $\Psi^{\mathcal{R}}$ , são tais que,  $\Psi_n^{\mathcal{L}} = \Psi_{n+N/2}^{\mathcal{R}} = 0$  para  $n < N/2$ , seguindo assim o tipo de decomposição feita no espaço de fase do mapa clássico. Após uma iterada, temos que estados em  $\mathcal{L}$  evoluem para o sub-espaco  $\mathcal{B}$  e estados em  $\mathcal{R}$  evoluem para o sub-espaco  $\mathcal{T}$  (com  $\mathcal{B}$

e  $\mathcal{T}$  também disjuntos e, portanto, o espaço de Hilbert podendo ser reescrito como  $\mathcal{H} = \mathcal{B} \oplus \mathcal{T}$ ). Novamente a semelhança com o caso clássico aparece, pois temos que as funções de onda evoluídas  $\Phi$  são tais que  $\overline{\Phi}_m^{\mathcal{B}} = \overline{\Phi}_{m+N/2}^{\mathcal{T}} = 0$  para  $m < N/2$  (com a barra denotando que as funções de onda estão na representação de momento).

A dinâmica é dada pelo operador de evolução para uma iterada, que fornece a função de onda final a partir da função de onda inicial, ou

$$\Phi = U\Psi. \quad (2.10)$$

A relação entre as funções de onda finais e iniciais segue uma estrita analogia com a evolução das variáveis dinâmicas clássicas  $p$  e  $q$ . Na Tabela 2.1 isto está mostrado, comparando-se os casos clássico e quântico (notamos que os fatores  $\sqrt{2}$ , que aparecem nas igualdades entre as funções de onda, são necessários para garantir as normalizações corretas). Assim, com a ajuda das relações entre os  $\Phi$ 's e  $\Psi$ 's e da transformada de Fourier (2.9), que nos permite passar de uma representação à outra, podemos determinar os elementos de matriz de  $U$  (em alguma representação específica) e então, obtermos o propagador do mapa do padeiro quântico (para detalhes ver referência [13]).

Se associarmos “números quânticos”,  $\mu$  e  $\nu$ , aos vetores  $|m\rangle$  e  $|n\rangle$  do espaço de Hilbert do mapa através de

$$\begin{aligned} \nu = 0 & \rightarrow 0 \leq n < \frac{N}{2} & \mu = 0 & \rightarrow 0 \leq m < \frac{N}{2} \\ \nu = 1 & \rightarrow \frac{N}{2} \leq n < N & \mu = 1 & \rightarrow \frac{N}{2} \leq m < N, \end{aligned} \quad (2.11)$$

o propagador na representação mista  $m'n$  fica em uma forma extremamente simples, dada por

$$\langle m'|U|n\rangle = G_{\frac{N}{2}}(m', n) \delta_{\mu\nu}, \quad (2.12)$$

tendo a seguinte estrutura de blocos

$$U_{m'n} = \begin{bmatrix} G_{\frac{N}{2}} & 0 \\ 0 & G_{\frac{N}{2}} \end{bmatrix}. \quad (2.13)$$

## 2.3 Quantização Semiclássica

A quantização semiclássica usual, a partir da função geratriz  $F(p', q)$ , para um sistema com variáveis de posição e momento contínuas tem a forma [16]

$$\langle p'|U|q\rangle = (2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}} \left| \frac{\partial^2 F(p', q)}{\partial p' \partial q} \right|^{\frac{1}{2}} \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} F(p', q) + i\alpha \right]. \quad (2.14)$$

Agora, identificando  $p' = (m+1/2)/N$  e  $q = (n+1/2)/N$  e usando  $\hbar = 1/(2\pi N)$ , encontramos que os dois blocos não nulos do propagador (2.13) são obtidos exatamente por (2.14) com  $\alpha = 0$  e  $F$  dado por (2.5) para  $l = 1$ .

Embora a representação mista do propagador tenha uma forma semiclássica exata, a representação de posição

$$\langle n' | U | n \rangle = \sum_{m'=0}^{N-1} \langle n' | m' \rangle \langle m' | U | n \rangle \quad (2.15)$$

não tem. A razão é que a preservação da forma semiclássica de uma transformada de Fourier, obtida pelo método de Maslov [16], não resulta da transformada de Fourier discreta. Disto segue que a generalização para um número  $l$  arbitrário de iterações do mapa,

$$\langle m_l | U^l | n_0 \rangle = \sum_{\substack{m_i, n_i=0 \\ (i=1,2,\dots,l-1)}}^{N-1} \langle m_l | U | n_{l-1} \rangle \langle n_{l-1} | m_{l-1} \rangle \dots \langle n_1 | m_1 \rangle \langle m_1 | U | n_0 \rangle, \quad (2.16)$$

não tem, também, aproximação semiclássica exata. Este resultado foi obtido por Ozório de Almeida e Saraceno [11] ao inserir a função geratriz (2.5), para cada faixa de comprimento  $2^{-l}$ , em (2.14). O fato de que  $p$  e  $q$  devam estar restritos a valores discretos espaçados de  $1/N$  parece invalidar a aproximação semiclássica para tempos tais que  $2^l > N$ , uma vez que neste caso estaríamos quantizando estruturas clássicas menores que  $\hbar$  (é interessante observar aqui que esta discussão oferece uma das maneiras de se deduzir o “log-time” para o mapa do padeiro,  $l^* = \log_2 N$ ). Entretanto, O’Connor e colaboradores [17] verificaram que é possível obter boa concordância numérica para o propagador bem além deste limite. A explicação para tal fato surpreendente está na dupla interpretação da seqüência simbólica do mapa clássico discutida anteriormente. Embora não possamos dividir o espaço de fase quântico em faixas (ii) menores que  $1/N = 2\pi\hbar$  (o que ocorreria para tempos maiores que o “log-time”), a quantização respeita perfeitamente a interpretação histórica (i) da seqüência simbólica.

Foi possível a Saraceno e Voros [18] expressar o propagador quântico exato, para  $l$  iteradas, como uma integral de caminho discreta para cada seqüência simbólica e então, comparar estes termos com a aproximação semiclássica. Entretanto, tais caminhos discretizados não têm uma ação clássica como na integral de caminho usual de Feynman [19]. Isto pode ser obtido se aproximarmos as somas de Fourier por integrais, como feito na tese de O’Connor [20], mas então perdemos contato com o propagador exato.

Nos próximos capítulos atacaremos o problema de definir uma integral de caminho para o mapa do padeiro que seja contínua, exata e que dependa explicitamente de ações clássicas.

# Capítulo 3

## Integral de Caminho para o Mapa Quântico Iterado

O propagador para  $l$  iteradas do mapa do padeiro quântico pode ser obtido através de sua propriedade de composição, dada pela eq. (2.16). Assim, com a ajuda de (2.9) e (2.12), chegamos à seguinte soma explícita para a representação mista do propagador

$$\begin{aligned}
 \langle m_l | U^l | n_0 \rangle &= \sqrt{\frac{2^l}{N^{2l-1}}} \sum_{\substack{m_i, n_i=0 \\ (i=1, \dots, l-1)}}^{N-1} \exp \left[ -\frac{4\pi i}{N} (m_l + \frac{1}{2})(n_{l-1} + \frac{1}{2}) \right] \\
 &\times \exp \left[ \frac{2\pi i}{N} (m_{l-1} + \frac{1}{2})(n_{l-1} + \frac{1}{2}) \right] \times \dots \\
 &\times \exp \left[ \frac{2\pi i}{N} (m_1 + \frac{1}{2})(n_1 + \frac{1}{2}) \right] \exp \left[ -\frac{4\pi i}{N} (m_1 + \frac{1}{2})(n_0 + \frac{1}{2}) \right] \\
 &\times \delta_{\mu_l \nu_{l-1}} \delta_{\mu_{l-1} \nu_{l-2}} \dots \delta_{\mu_1 \nu_0}.
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

Aqui, as deltas de Kronecker  $\delta_{\mu_j \nu_{j-1}}$  garantem que sejam permitidas apenas as seguintes evoluções

$$\begin{aligned}
 |n_{j-1}\rangle; \quad 0 \leq n_{j-1} \leq \frac{N}{2} - 1 \quad (\nu_{j-1} = 0) &\rightarrow |m_j\rangle; \quad 0 \leq m_j \leq \frac{N}{2} - 1 \quad (\mu_j = 0) \\
 |n_{j-1}\rangle; \quad \frac{N}{2} \leq n_{j-1} \leq N - 1 \quad (\nu_{j-1} = 1) &\rightarrow |m_j\rangle; \quad \frac{N}{2} \leq m_j \leq N - 1 \quad (\mu_j = 1),
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

onde  $|n_{j-1}\rangle$  representam os estados de posição e  $|m_j\rangle$  os estados de momento. A notação é simplificada quando fazemos uma mudança para variáveis semi-inteiras, ou seja,  $m_i \rightarrow m_i - 1/2$  e  $n_i \rightarrow n_i - 1/2$  ( $i = 1, 2, \dots, l-1$ ); e definimos  $\tilde{m}_l = m_l + 1/2$

e  $\tilde{n}_0 = n_0 + 1/2$ . Desta forma

$$\begin{aligned} \langle m_l | U^l | n_0 \rangle &= \sqrt{\frac{2^l}{N^{2l-1}}} \sum_{m_1, n_{l-1} = \frac{1}{2}}^{N-\frac{1}{2}} \delta_{\mu_1 \nu_0} \exp \left[ -\frac{4\pi i}{N} m_1 \tilde{n}_0 \right] \delta_{\mu_l \nu_{l-1}} \exp \left[ -\frac{4\pi i}{N} \tilde{m}_l n_{l-1} \right] \\ &\times \sum_{\substack{m_{i+1}, n_i = \frac{1}{2} \\ (i=1, \dots, l-2)}}^{N-\frac{1}{2}} \delta_{\mu_2 \nu_1} \dots \delta_{\mu_{l-1} \nu_{l-2}} \exp \left[ \frac{2\pi i}{N} \left( \sum_{j=1}^{l-1} m_j n_j - 2 \sum_{j=1}^{l-2} m_{j+1} n_j \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Agora eliminamos as deltas de Kronecker pela introdução de um somatório em  $\nu = 0$  ou 1, isto é, restringimos  $m_j$  e  $n_j$  a serem menores que  $N/2$  através das transformações  $m_j \rightarrow m_j + \nu_{j-1} N/2$  e  $n_j \rightarrow n_j + \nu_j N/2$  ( $j = 1, \dots, l-1$ ) e fazemos uma soma explícita sobre os  $\nu_j$ 's. Chegamos então a

$$\begin{aligned} \langle m_l, \mu_l | U^l | n_0, \nu_0 \rangle &= \sqrt{\frac{2^l}{N^{2l-1}}} \sum_{\nu_1 \dots \nu_{l-2} = 0}^1 \sum_{\nu_{l-1} = 0}^1 \delta_{\mu_l \nu_{l-1}} \sum_{m_1, n_{l-1} = \frac{1}{2}}^{\frac{N}{2}-\frac{1}{2}} \sum_{\nu_1 \dots \nu_{l-2} = 0}^1 \sum_{\substack{m_{i+1}, n_i = \frac{1}{2} \\ (i=1, \dots, l-2)}}^{\frac{N}{2}-\frac{1}{2}} \\ &\times \exp \left[ -\frac{4\pi i}{N} (m_1 + \frac{N}{2} \nu_0) \tilde{n}_0 \right] \exp \left[ -\frac{4\pi i}{N} \tilde{m}_l (n_{l-1} + \frac{N}{2} \nu_{l-1}) \right] \\ &\times \exp \left\{ \frac{2\pi i}{N} \left[ \sum_{j=1}^{l-1} (m_j + \frac{N}{2} \nu_{j-1}) (n_j + \frac{N}{2} \nu_j) \right. \right. \\ &\left. \left. - 2 \sum_{j=1}^{l-2} (m_{j+1} + \frac{N}{2} \nu_j) (n_j + \frac{N}{2} \nu_j) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.4)$$

que se torna, após algumas simplificações,

$$\begin{aligned} \langle m_l, \mu_l | U^l | n_0, \nu_0 \rangle &= \sqrt{\frac{2^l}{N^{2l-1}}} \sum_{\nu_1, \dots, \nu_{l-1} = 0}^1 \delta_{\mu_l \nu_{l-1}} f_\nu \sum_{\substack{m_i, n_i = \frac{1}{2} \\ (i=1, \dots, l-1)}}^{\frac{N}{2}-\frac{1}{2}} \\ &\times \exp \left\{ \frac{2\pi i}{N} \left[ \sum_{j=1}^{l-1} \left( m_j n_j + \frac{N}{2} (m_j \nu_j + n_j \nu_{j-1}) \right) \right. \right. \\ &\left. \left. - 2 \left( \sum_{j=1}^{l-2} m_{j+1} n_j + m_1 \tilde{n}_0 + \tilde{m}_l n_{l-1} \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

com

$$f_\nu = (-1)^{\nu_0 + \nu_{l-1}} (i)^{N(\nu_0 \nu_1 + \nu_1 \nu_2 + \dots + \nu_{l-2} \nu_{l-1})}. \quad (3.6)$$

Neste ponto, podemos interpretar o propagador acima como uma soma de caminhos [18]. A soma externa sobre  $\nu = (\nu_1, \dots, \nu_{l-1})$  é a soma sobre todas as órbitas

simbólicas possíveis, o que é permitido classicamente. Já a soma interna sobre os  $m$ 's e  $n$ 's são não-clássicas. Todos os possíveis caminhos internos  $(n_1, m_1, \dots, n_{l-1}, m_{l-1})$  são permitidos e cada um contribui com um termo oscilatório ao propagador. Para um caminho interno fixo, uma mudança da órbita simbólica ou fornece a mesma contribuição ou muda seu sinal. Isto é essencialmente o resultado de Saraceno e Voros [18]; o problema é que os expoentes não estão em uma forma apropriada para a discussão do limite semiclássico.

Para obtermos as ações clássicas nas somas internas, tomamos agora suas transformações de Poisson [11, 21], definidas por

$$\sum_{k=\frac{1}{2}}^{\frac{N}{2}-\frac{1}{2}} F(k) = \sum_{K=-\infty}^{\infty} \int_0^{\frac{N}{2}} dx F(x) \exp[2\pi i(x + \frac{1}{2})K], \quad (3.7)$$

onde  $F(x)$  é a função que interpola corretamente  $F(k)$ . Temos também que para a correspondência clássica apropriada devemos usar as variáveis contínuas  $p$  e  $q$  com  $m_i = Np_i$  e  $n_i = Nq_i$ . Assim, aplicando-se (3.7) a cada soma interna em (3.4), considerando-se a mudança de variáveis mencionada, obtemos o propagador

$$\begin{aligned} \langle m_l, \mu_l | U^l | n_0, \nu_0 \rangle &= \sqrt{2^l N} N^{l-2} \sum_{\nu} \sum_{\substack{K_i, L_i = -\infty \\ (i=1, \dots, l-1)}}^{\infty} G_{KL} \int_0^{\frac{1}{2}} dp_1 \dots dp_{l-1} dq_1 \dots dq_{l-1} \\ &\times \exp \left\{ 2\pi i N \left[ \sum_{j=1}^{l-1} \left( p_j q_j + p_j \left( K_j + \frac{\nu_j}{2} \right) + q_j \left( L_j + \frac{\nu_{j-1}}{2} \right) \right) \right. \right. \\ &\left. \left. - 2 \sum_{j=0}^{l-1} p_{j+1} q_j \right] \right\}, \quad (3.8) \end{aligned}$$

onde  $p_l = \tilde{m}_l/N$ ,  $q_0 = \tilde{n}_0/N$ ,  $G_{KL} = (-1)^{K_1 + \dots + K_{l-1} + L_1 + \dots + L_{l-1}}$  e

$$\sum_{\nu} \equiv \sum_{\nu_1, \dots, \nu_{l-1}=0}^1 \delta_{\mu_l \nu_{l-1}} f_{\nu} \quad (3.9)$$

é a soma sobre todas as órbitas simbólicas  $\nu$  com começo ( $\nu_0$ ) e fim ( $\mu_l$ ) especificados. O propagador (3.8) pode ser reconhecido como soma de integrais de caminho no espaço de fase [22].

Embora estejamos trabalhando agora com uma soma infinita de integrais, ao invés de uma soma finita normal de números, ficará claro logo a seguir como somente poucas destas integrais contribuem em cada órbita simbólica para o limite semiclássico usual.

Se ignorarmos todos os termos das somas em (3.8), para os quais não hajam pontos estacionários para as múltiplas integrais no intervalo de integração  $(0, 1/2)$  e

estendermos à  $(-\infty, \infty)$  os limites de integração das integrais restantes, obteremos (veja o Apêndice A para dedução)

$$\langle m_l, \mu_l | U^l | n_0, \nu_0 \rangle^{(est.)} = \sqrt{\frac{2^l}{N}} \exp[2\pi i N (-2^l p_l q_0 + p_l \mu_l + q_0 \nu_0)] \delta_{\mu \bar{\nu}}, \quad (3.10)$$

que coincide exatamente com o propagador semiclássico obtido por Ozorio de Almeida e Saraceno. Assim, temos sucesso em nosso objetivo de rederivar o propagador semiclássico, sem recorrer à faixas que se estreitam à medida que o número de iterações do mapa aumenta. Além disso, obtemos explicitamente expressões (embora complicadas) para as correções quânticas; a saber: os termos das somas que foram ignorados e as diferenças nos intervalos de integração dos termos considerados (uma vez que podemos escrever  $\int_a^b = \int_{-\infty}^{+\infty} - \int_b^{+\infty} - \int_{-\infty}^a$ ). Desta forma, o propagador exato sempre pode ser escrito como

$$\langle m_l, \mu_l | U^l | n_0, \nu_0 \rangle = \langle m_l, \mu_l | U^l | n_0, \nu_0 \rangle^{(est.)} + \langle m_l, \mu_l | U^l | n_0, \nu_0 \rangle^{(c.q.)}, \quad (3.11)$$

sendo o último termo do lado direito de (3.11) a correção quântica ao propagador semiclássico.

Uma expressão contínua para o traço do propagador pode ser obtida de forma similar. De fato, inserindo (2.4) em

$$\text{Tr}(U^l) = \sum_{m_l, n_0=0}^{N-1} \langle n_0 | m_l \rangle \langle m_l | U^l | n_0 \rangle \quad (3.12)$$

e restringindo  $m_l$  e  $n_0$  a serem menores que  $N/2$ , como anteriormente explanado, temos

$$\begin{aligned} \text{Tr}(U^l) &= \frac{\sqrt{2^l}}{N^l} \sum_{\nu_0, \dots, \nu_{l-1}=0}^1 (-1)^{\nu_{l-1} + \nu_0} (i)^{N\nu_{l-1}\nu_0} f_\nu \sum_{\substack{m_{i+1}, n_i = \frac{1}{2} \\ (i=0, \dots, l-1)}}^{\frac{N}{2} - \frac{1}{2}} \\ &\times \exp \left\{ \frac{2\pi i}{N} \left[ \sum_{j=1}^{l-1} \left( m_j n_j + \frac{N}{2} (m_j \nu_j + n_j \nu_{j-1}) \right) - 2 \sum_{j=0}^{l-1} m_{j+1} n_j \right] \right\} \\ &\times \exp \left\{ \frac{2\pi i}{N} \left[ m_l n_0 + \frac{N}{2} (m_l \nu_0 + n_0 \nu_{l-1}) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Agora, aplicando a transformação de Poisson (2.6) à expressão acima, encontramos finalmente

$$\text{Tr}(U^l) = \sqrt{2^l} N^l \sum_{\nu_0, \nu} \sum_{\substack{K_{i+1}, L_i = -\infty \\ (i=0, \dots, l-1)}}^{\infty} (-1)^{K_i + L_0} G_{KL} \int_0^{\frac{1}{2}} dp_1 \dots dp_l dq_0 \dots dq_{l-1}$$

$$\begin{aligned}
& \times \exp \left\{ 2\pi i N \left[ \sum_{j=1}^{l-1} \left( p_j q_j + p_j \left( K_j + \frac{\nu_j}{2} \right) + q_j \left( L_j + \frac{\nu_{j-1}}{2} \right) \right) \right. \right. \\
& \quad \left. \left. - 2 \sum_{j=0}^{l-1} p_{j+1} q_j \right] \right\} \\
& \times \exp \left\{ 2\pi i N \left[ p_l q_0 + p_l \left( K_l + \frac{\nu_0}{2} \right) + q_0 \left( L_0 + \frac{\nu_{l-1}}{2} \right) \right] \right\}, \quad (3.14)
\end{aligned}$$

com

$$\sum_{\nu_0, \nu} \equiv \sum_{\nu_0, \dots, \nu_{l-1}=0}^1 (i)^{N(\nu_0 \nu_1 + \dots + \nu_{l-1} \nu_0)}. \quad (3.15)$$

Analogamente, uma aproximação para o traço do propagador é obtida de (3.14), tomando-se os termos para os quais hajam pontos estacionários para as integrais múltiplas e estendendo-se o intervalo de integração à  $(-\infty, +\infty)$ . A expressão assim obtida é equivalente àquela em [11], mas agora sem nenhuma relação com a dinâmica de faixas discutidas no Capítulo 2.

# Capítulo 4

## O Caso Particular $l = 2$

Este é o caso mais simples onde podemos estudar a integral de caminho desenvolvida no Capítulo 3. Seu interesse está no fato de que é o único caso para o qual a eq. (3.8) tem solução analítica exata. Portanto, temos a possibilidade de fazer um estudo mais detalhado, sem a necessidade de usarmos aproximações ou cálculos numéricos mais complicados (mesmo para o traço, onde não podemos resolver analiticamente as integrais, os cálculos numéricos se limitam à integração em uma única variável). Salientamos também que, embora estando longe de discutir algum limite de “log-time” para  $l = 2$ , podemos examinar a convergência das somas de Poisson, bem como a precisão da aproximação semiclássica.

### 4.1 O Propagador

Considerando  $l = 2$  na eq. (3.8), temos

$$\begin{aligned} \langle m_2, \mu_2 | U^2 | n_0, \nu_0 \rangle &= 2\sqrt{N} (-1)^{\mu_2 + \nu_0} (i)^{N\mu_2\nu_0} \sum_{K_1 L_1} (-1)^{K_1 + L_1} \int_0^{\frac{1}{2}} dp_1 dq_1 \\ &\times \exp \left\{ 2\pi i N \left[ p_1 q_1 + p_1 (-2q_0 + K_1 + \frac{\mu_2}{2}) \right. \right. \\ &\left. \left. + q_1 (-2p_2 + L_1 + \frac{\nu_0}{2}) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (4.1)$$

uma vez que para este caso há apenas uma única órbita simbólica. Integrando sobre  $p_1$ , encontramos

$$\begin{aligned} \langle m_2, \mu_2 | U^2 | n_0, \nu_0 \rangle &= 2\sqrt{N} (-1)^{\mu_2 + \nu_0} (i)^{N\mu_2\nu_0} \sum_{K_1 L_1} (-1)^{K_1 + L_1} \frac{1}{2\pi i N} \int_0^{\frac{1}{2}} dq_1 \\ &\times \frac{1}{(q_1 - 2q_0 + K_1 + \frac{\mu_2}{2})} \exp \left[ 2\pi i N q_1 (-2p_2 + L_1 + \frac{\nu_0}{2}) \right] \\ &\times \left\{ \exp \left[ \pi i N (q_1 - 2q_0 + K_1 + \frac{\mu_2}{2}) \right] - 1 \right\}. \end{aligned} \quad (4.2)$$

A eq. (4.2) é facilmente integrada com a ajuda da identidade (veja o Apêndice B para dedução)

$$\int_{\alpha}^{\beta} \frac{\exp[i\gamma x]}{x} dx = \text{Ei}(i\gamma\beta) - \text{Ei}(i\gamma\alpha) + i\frac{\pi}{2} \xi(\gamma) [\xi(\beta) - \xi(\alpha)], \quad (4.3)$$

onde  $\text{Ei}(x)$  é a função exponencial-integral [23] e  $\xi(x) = +1$  se  $x \geq 0$  e  $\xi(x) = -1$  se  $x < 0$ ; então

$$\begin{aligned} \langle m_2, \mu_2 | U^2 | n_0, \nu_0 \rangle &= \frac{2}{\sqrt{N}} \exp[2\pi i N(-4p_2q_0 + p_2\mu_2 + q_0\nu_0)] \\ &\times \left\{ \Theta + \frac{1}{2\pi i} \sum_{K_1, L_1} (-1)^{K_1+L_1} (-1)^{\mu_2+\nu_0} \right. \\ &\times \left[ \text{Ei}[2\pi i N(-2p_2 + L_1 + \frac{\nu_0}{2} + \frac{1}{2})(-2q_0 + K_1 + \frac{\mu_2}{2} + \frac{1}{2})] \right. \\ &+ \text{Ei}[2\pi i N(-2p_2 + L_1 + \frac{\nu_0}{2})(-2q_0 + K_1 + \frac{\mu_2}{2})] \\ &- \text{Ei}[2\pi i N(-2p_2 + L_1 + \frac{\nu_0}{2} + \frac{1}{2})(-2q_0 + K_1 + \frac{\mu_2}{2})] \\ &\left. \left. - \text{Ei}[2\pi i N(-2p_2 + L_1 + \frac{\nu_0}{2})(-2q_0 + K_1 + \frac{\mu_2}{2} + \frac{1}{2})] \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Na equação acima, a soma

$$\begin{aligned} \Theta &= \frac{1}{4} \sum_{K_1, L_1} (-1)^{K_1+L_1} (-1)^{\mu_2+\nu_0} \left[ \xi(-2p_2 + L_1 + \frac{\nu_0}{2} + \frac{1}{2}) - \xi(-2p_2 + L_1 + \frac{\nu_0}{2}) \right] \\ &\times \left[ \xi(-2q_0 + K_1 + \frac{\mu_2}{2} + \frac{1}{2}) - \xi(-2q_0 + K_1 + \frac{\mu_2}{2}) \right], \end{aligned} \quad (4.5)$$

pode ser diferente de zero apenas se  $K_1$  e  $L_1$  forem 0 ou 1 (para os outros casos, os argumentos de cada par de  $\xi$ 's têm o mesmo sinal, dando então contribuição nula).

Assim

$$\begin{aligned} \Theta &= \frac{1}{4} \sum_{K_1, L_1=0}^1 (-1)^{K_1+L_1} (-1)^{\mu_2+\nu_0} \left[ \xi(-2p_2 + L_1 + \frac{\nu_0}{2} + \frac{1}{2}) - \xi(-2p_2 + L_1 + \frac{\nu_0}{2}) \right] \\ &\times \left[ \xi(-2q_0 + K_1 + \frac{\mu_2}{2} + \frac{1}{2}) - \xi(-2q_0 + K_1 + \frac{\mu_2}{2}) \right]. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Aqui observamos que os valores de  $[\xi(-2p_2 + L_1 + \frac{\nu_0}{2} + \frac{1}{2}) - \xi(-2p_2 + L_1 + \frac{\nu_0}{2})]$  dependem dos valores de  $q_0$  através de  $\nu_0$ , o mesmo ocorrendo para  $[\xi(-2q_0 + K_1 + \frac{\mu_2}{2} + \frac{1}{2}) - \xi(-2q_0 + K_1 + \frac{\mu_2}{2})]$  que depende dos valores de  $p_2$  através de  $\mu_2$ . Agora, definindo em código binário  $\nu = 00; 01; 10; 11$  ( $\mu = 00; 01; 10; 11$ ) segundo,  $0 < q_0 < 1/4$ ;  $1/4 < q_0 < 1/2$ ;  $1/2 < q_0 < 3/4$ ;  $3/4 < q_0 < 1$  ( $0 < p_2 < 1/4$ ;  $1/4 < p_2 <$

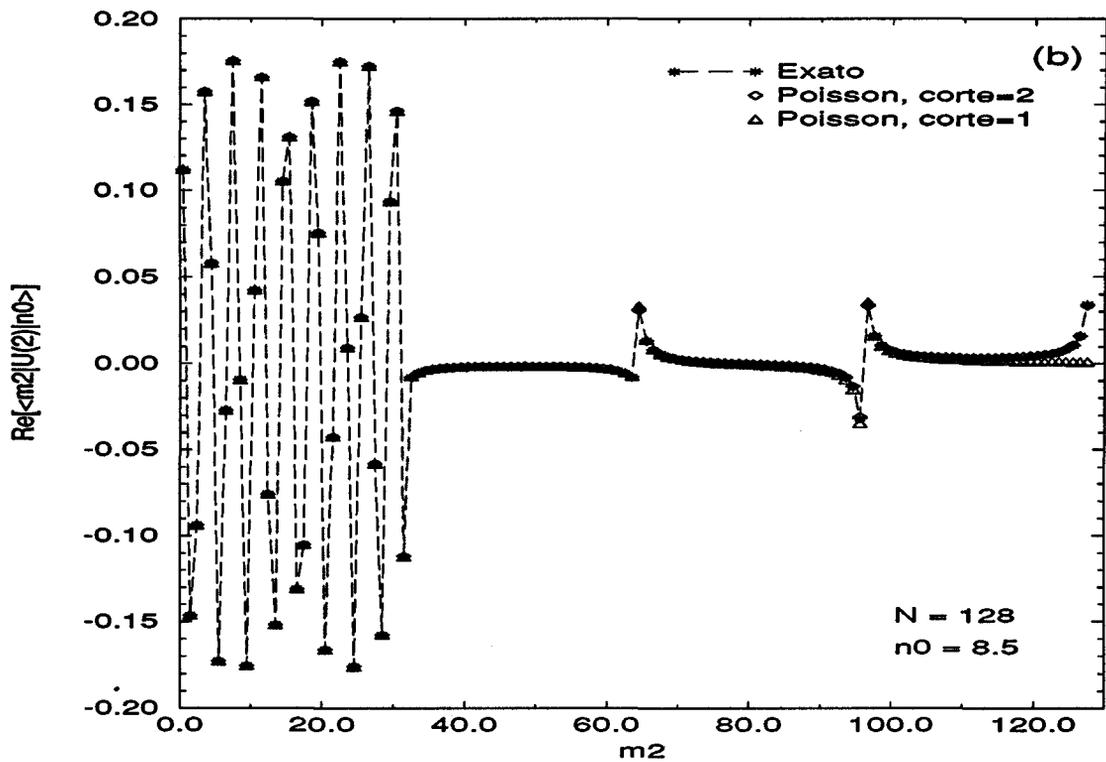
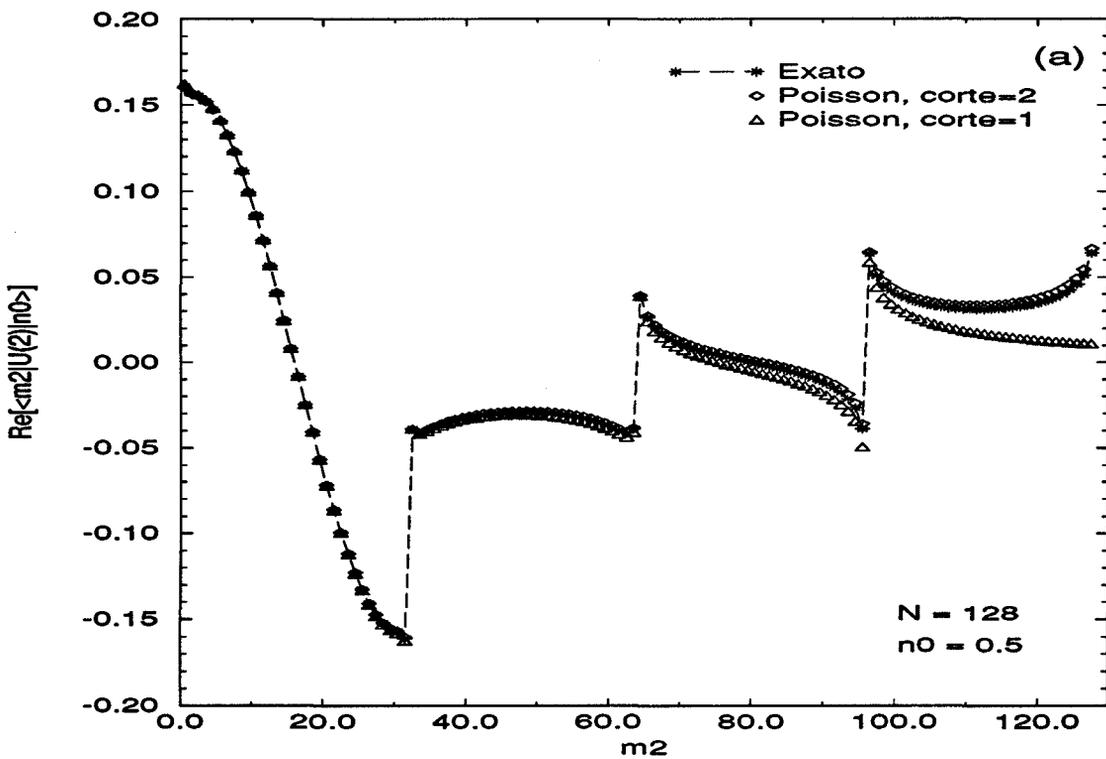
$1/2$ ;  $1/2 < p_2 < 3/4$ ;  $3/4 < p_2 < 1$ ), uma análise cuidadosa da eq. (4.6) mostra que  $\Theta = \delta_{\mu\bar{\nu}}$  e a forma final do propagador exato fica

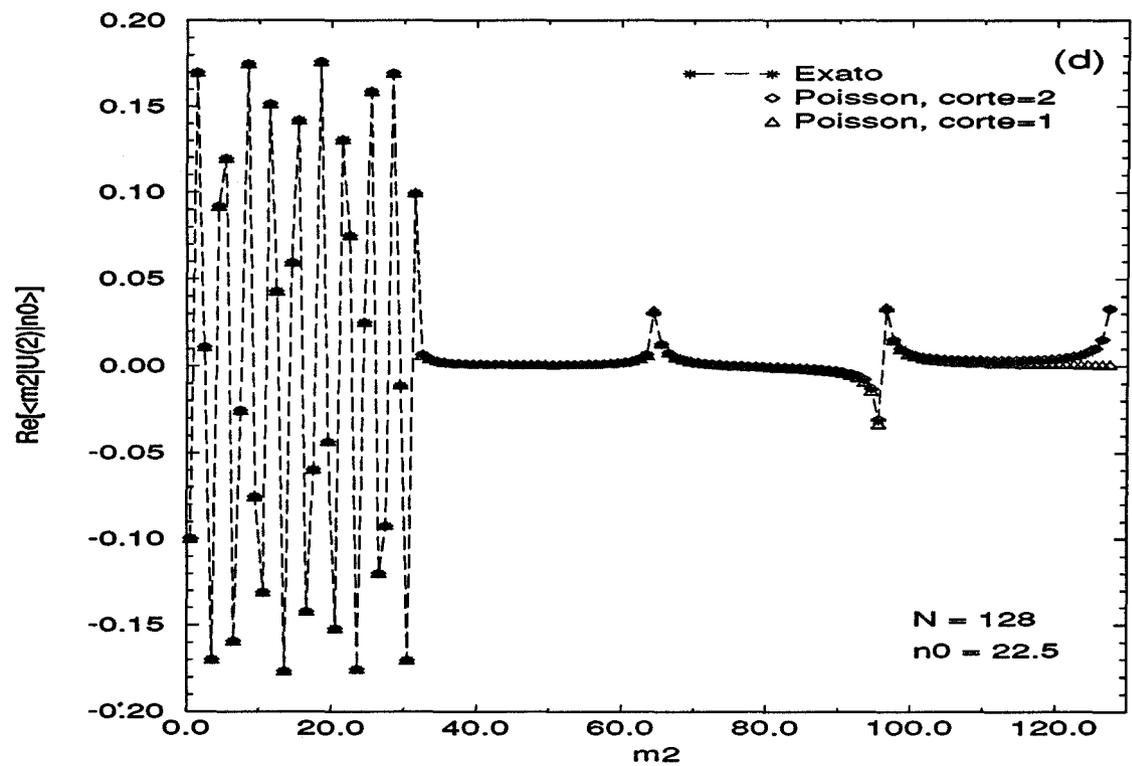
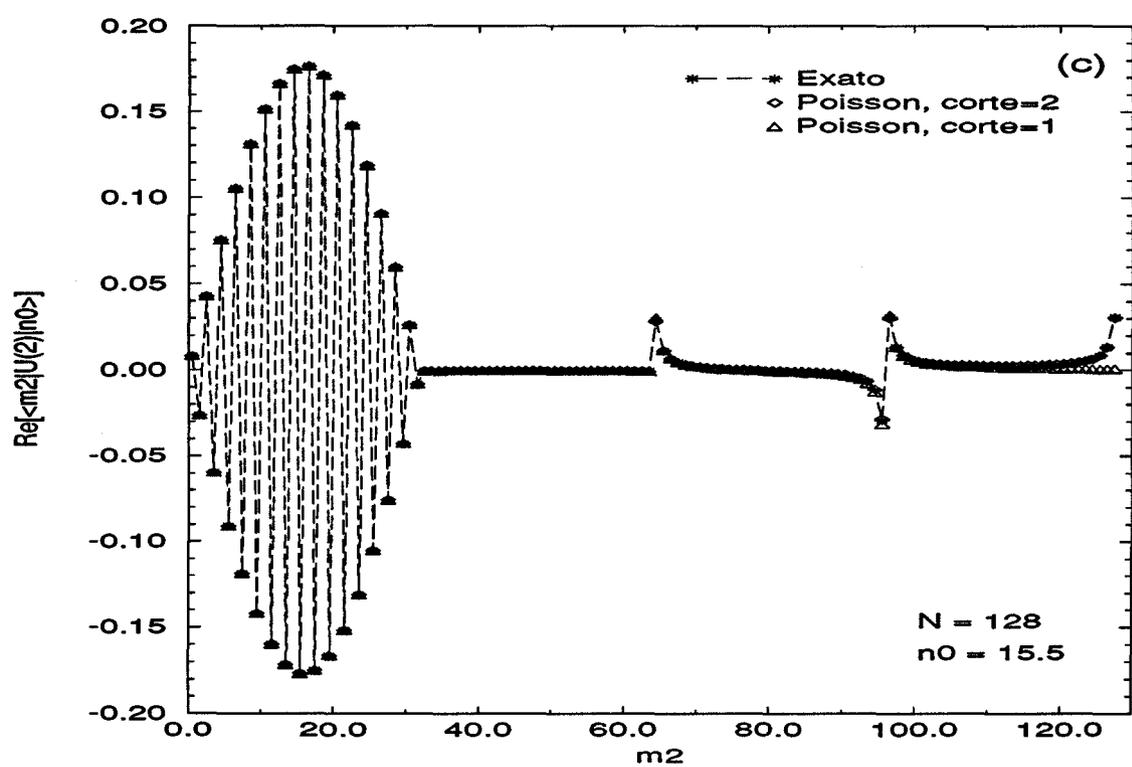
$$\begin{aligned}
\langle m_2, \mu_2 | U^2 | n_0, \nu_0 \rangle &= \frac{2}{\sqrt{N}} \exp[2\pi i N(-4p_2 q_0 + p_2 \mu_2 + q_0 \nu_0)] \delta_{\mu\bar{\nu}} \\
&+ \frac{2}{\sqrt{N}} \exp[2\pi i N(-4p_2 q_0 + p_2 \mu_2 + q_0 \nu_0)] \\
&\times \frac{1}{2\pi i} \sum_{K_1 L_1} (-1)^{K_1+L_1} (-1)^{\mu_2+\nu_0} \\
&\times \left\{ \text{Ei}[2\pi i N(-2p_2 + L_1 + \frac{\nu_0}{2} + \frac{1}{2})(-2q_0 + K_1 + \frac{\mu_2}{2} + \frac{1}{2})] \right. \\
&+ \text{Ei}[2\pi i N(-2p_2 + L_1 + \frac{\nu_0}{2})(-2q_0 + K_1 + \frac{\mu_2}{2})] \\
&- \text{Ei}[2\pi i N(-2p_2 + L_1 + \frac{\nu_0}{2} + \frac{1}{2})(-2q_0 + K_1 + \frac{\mu_2}{2})] \\
&\left. - \text{Ei}[2\pi i N(-2p_2 + L_1 + \frac{\nu_0}{2})(-2q_0 + K_1 + \frac{\mu_2}{2} + \frac{1}{2})] \right\}. \tag{4.7}
\end{aligned}$$

Estamos agora em posição de discutir a convergência da soma sobre os inteiros  $K_1$  e  $L_1$ , introduzidos pela transformação de Poisson. Uma vez que a expressão (4.7) para o propagador é formalmente exata, podemos comparar diferentes truncamentos da soma sem o uso de nenhuma outra aproximação.

Primeiro é necessário determinar quais são os maiores termos na série acima. Mesmo sem estarmos, a princípio, considerando alguma aproximação semiclassical à integral dupla em (4.1), é evidente que a soma de Poisson será dominada por termos para os quais a fase do integrando tenha um ponto estacionário no quadrado  $0 \leq p_1 \leq 1/2$ ,  $0 \leq q_1 \leq 1/2$ . Esta condição pode ser encontrada apenas quando  $L_1, K_1 = 0$  ou  $1$ , dependendo dos valores de  $p_2$  e  $q_0$  (ver Apêndice A). Então, consideraremos sucessivos truncamentos da soma em torno destes valores. Nas Figuras que se seguem, corte =  $j$  indica que somente os termos com  $K_1 = -j$  a  $K_1 = j$  e  $L_1 = -j$  a  $L_1 = j$  serão considerados na soma.

Nas Figs. 4.1 (a) até (e) comparamos a soma exata da parte real do propagador (usando-se o cálculo de matrizes discretas, eq. (2.16)) com a soma de Poisson truncada com corte = 1 e 2, sendo  $N = 128$ . Em cada gráfico fixamos  $n_0$  e variamos  $m_2$  entre  $\frac{1}{2}$  e  $127\frac{1}{2}$ . Nas Figs. 4.2 (a) até (c) o mesmo é feito com relação à parte imaginária. Ainda que corte = 1 forneça uma boa aproximação global, o erro é apreciável para valores grandes de  $m_2$ . A concordância da soma de Poisson para corte = 2 é excelente em geral.





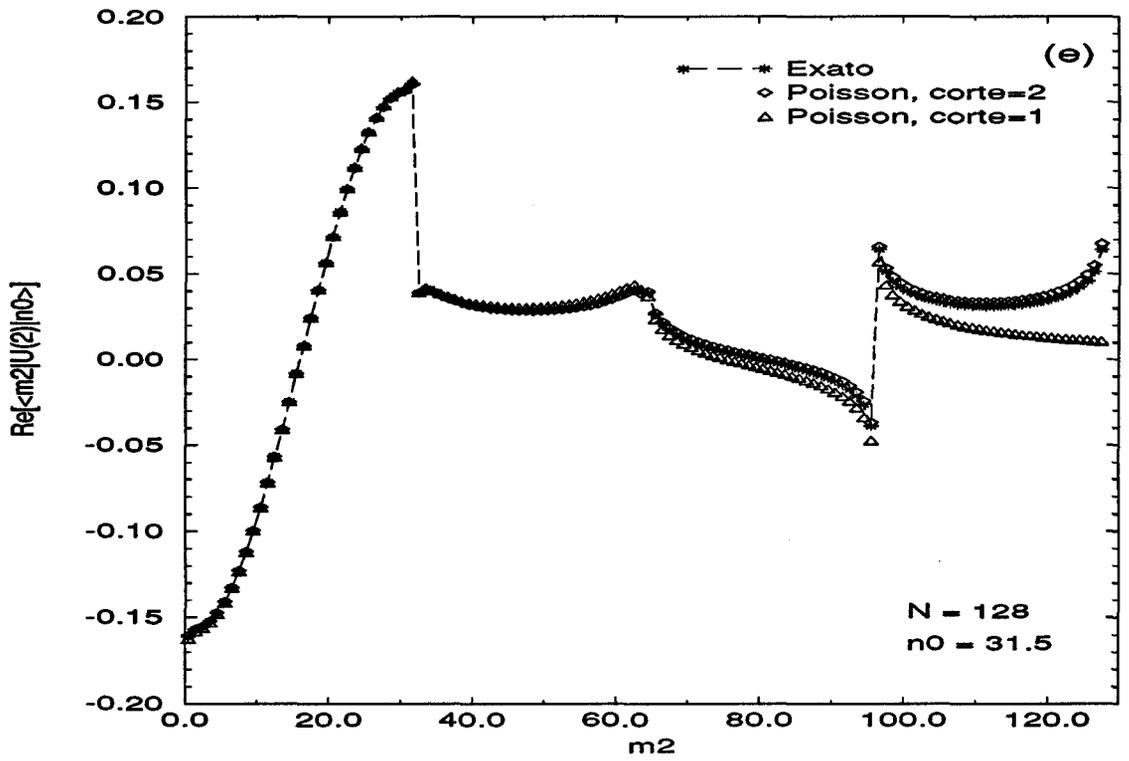
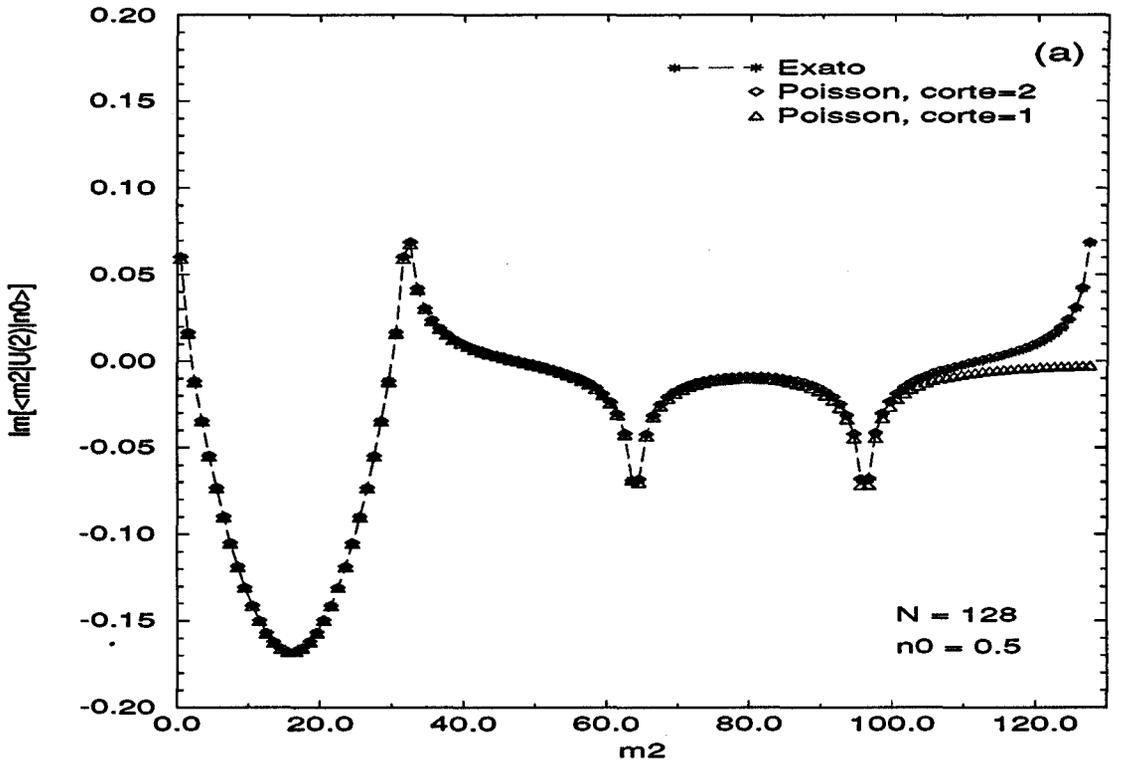


Figura 4.1: Comparação entre o exato e a soma de Poisson truncada (com cortes em 1 e 2) para a parte real de  $\langle m_2, \mu_2 | U^2 | n_0, \nu_0 \rangle$ , sendo  $N = 128$ . Os gráficos de (a) até (e) mostram o propagador como função de  $m_2$  para diferentes valores de  $n_0$ .



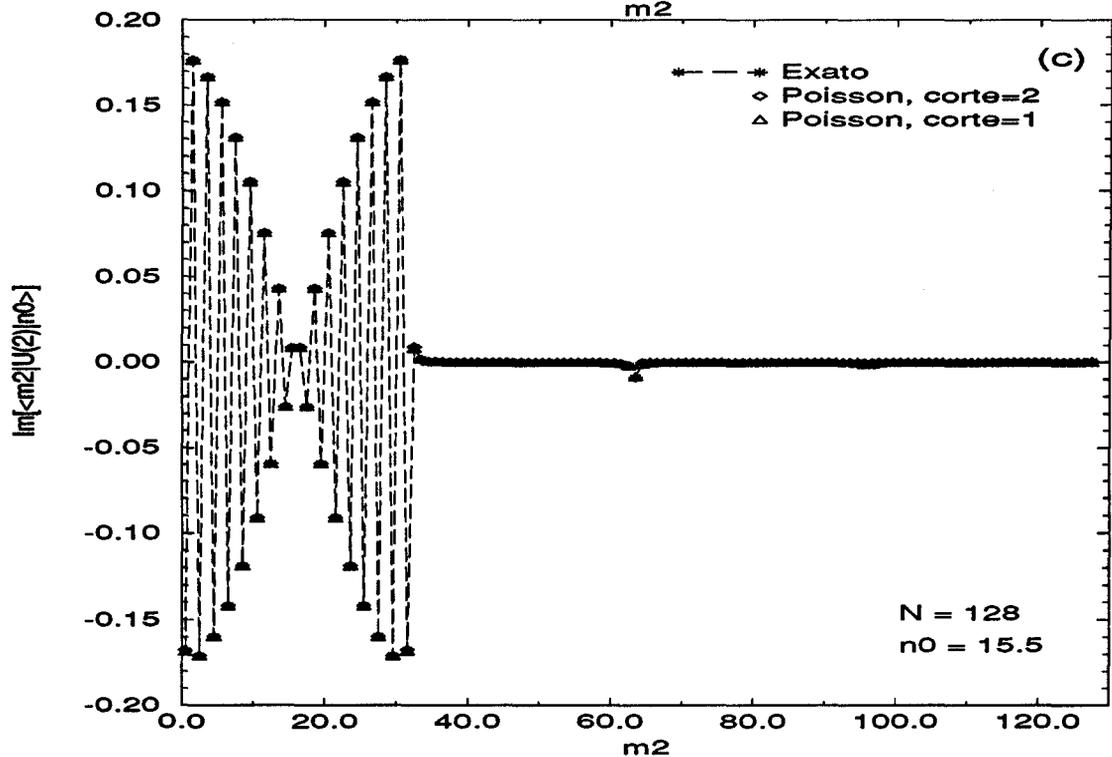
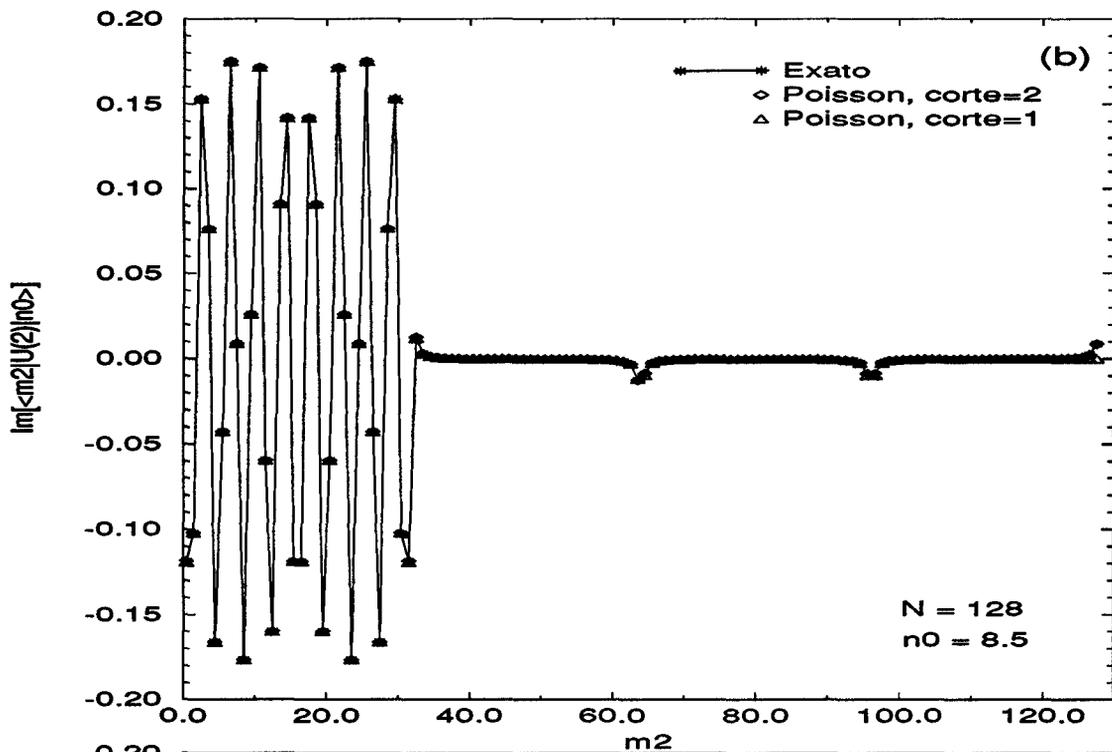
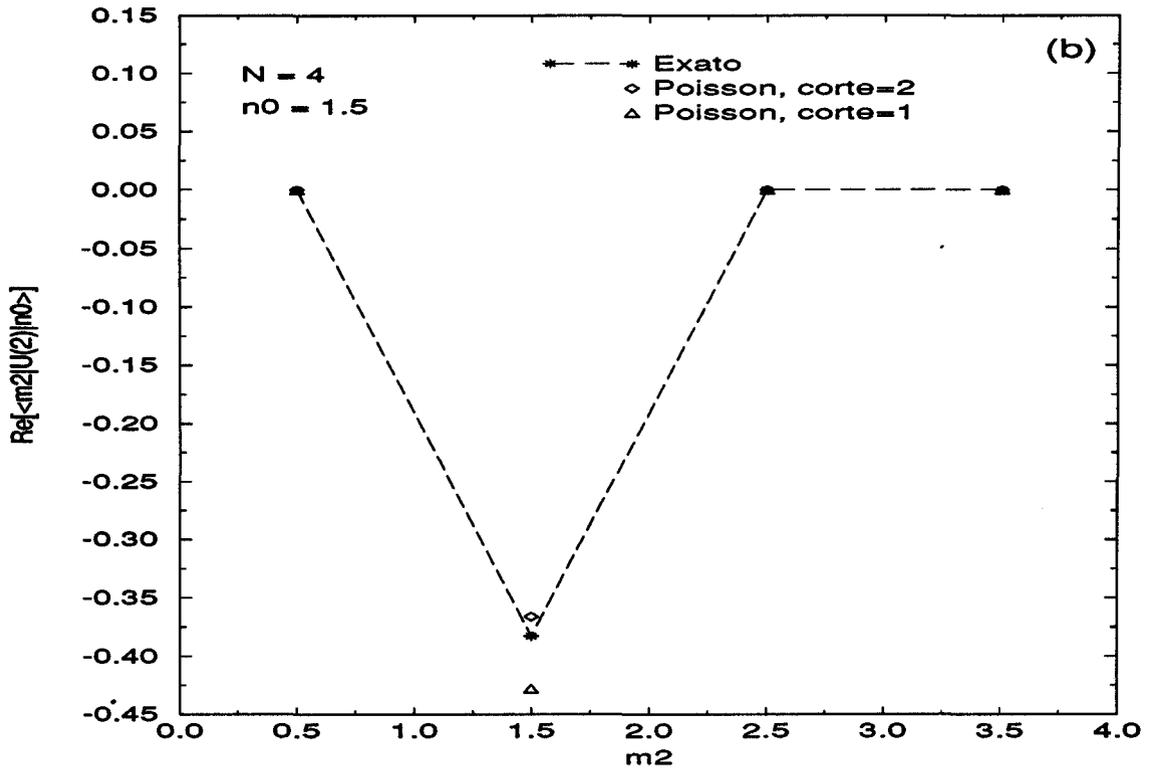
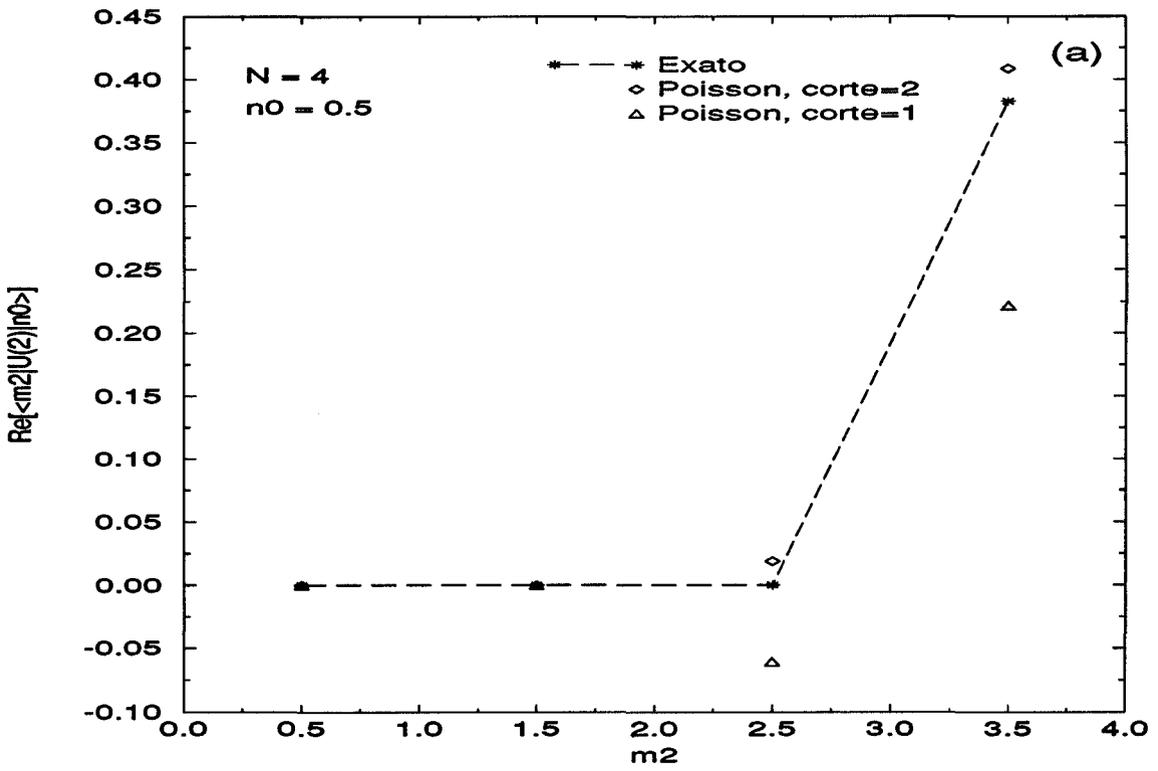


Figura 4.2: Comparação entre o exato e a soma de Poisson truncada para a parte imaginária do propagador, sendo  $N = 128$ .

Truncamentos com cortes maiores melhoram uniformemente a convergência, mas tal “esforço” é de difícil implementação. Devemos ter em mente que corte = 1 reduz a soma de Poisson para 9 termos, ao passo que para corte = 2 temos 25 termos a serem considerados e ainda, para corte = 3, este número aumenta para 49. Certamente que não há vantagens em se obter o propagador desta maneira (ao invés de se usar a multiplicação de matrizes) para pequenos  $N$ 's, tais como 128. Entretanto, a convergência da soma de Poisson parece aumentar com o aumento de  $N$  e pode, portanto, ser mais indicada em termos computacionais do que calcular matrizes muito grandes!

É interessante observar que no limite oposto, de  $N$  pequeno, os cortes no somatório de Poisson ainda fornecem uma razoável aproximação ao propagador. As Figuras 4.3 e 4.4 comparam estas aproximações com a parte real e imaginária do propagador exato.



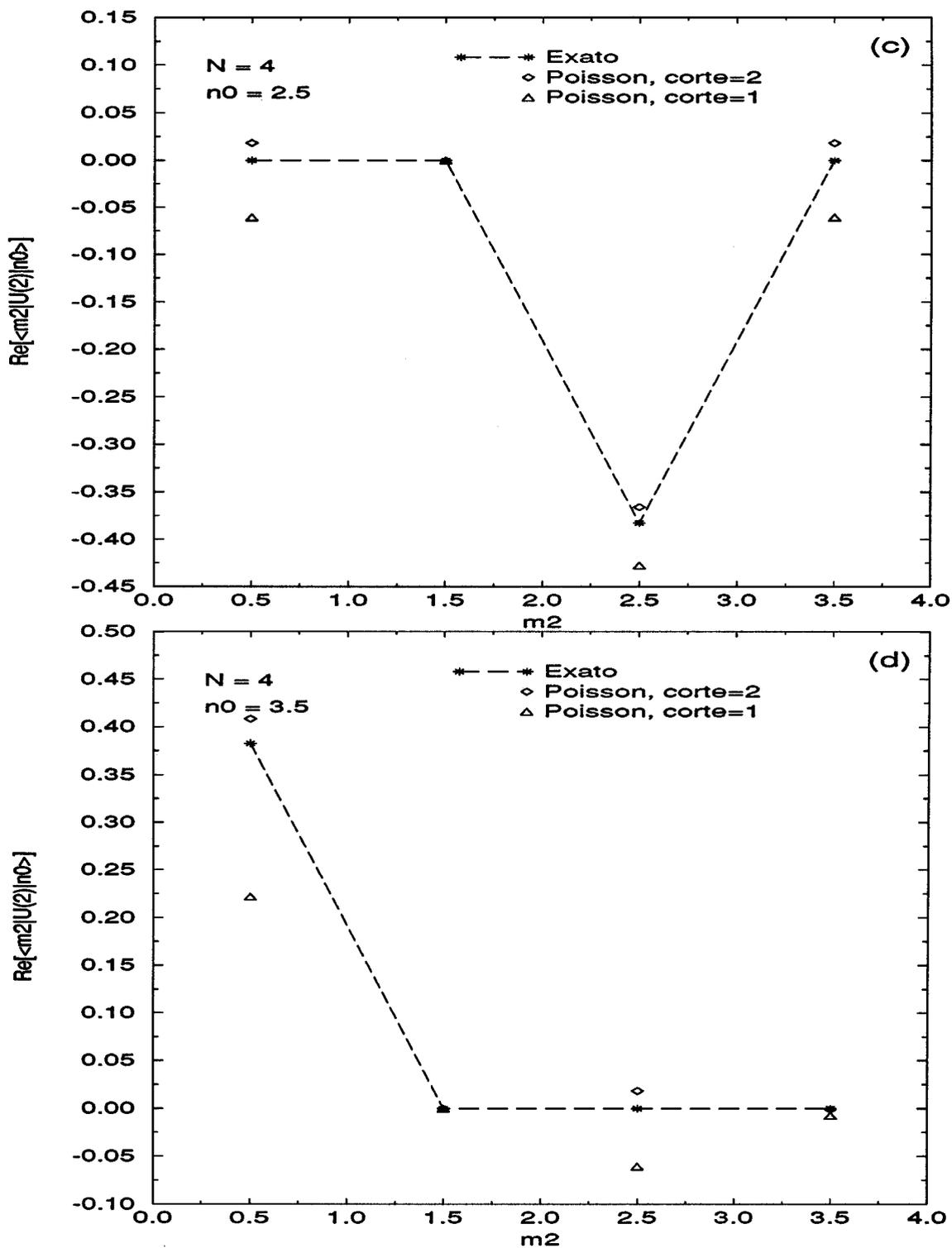
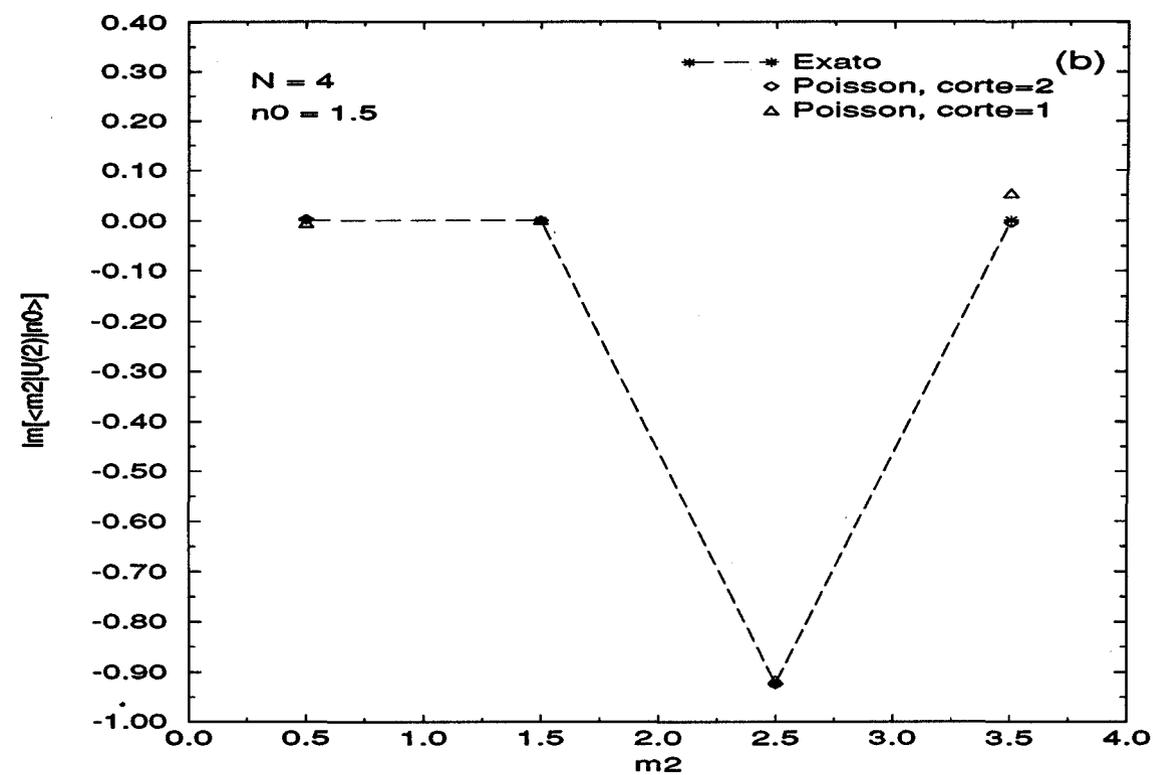
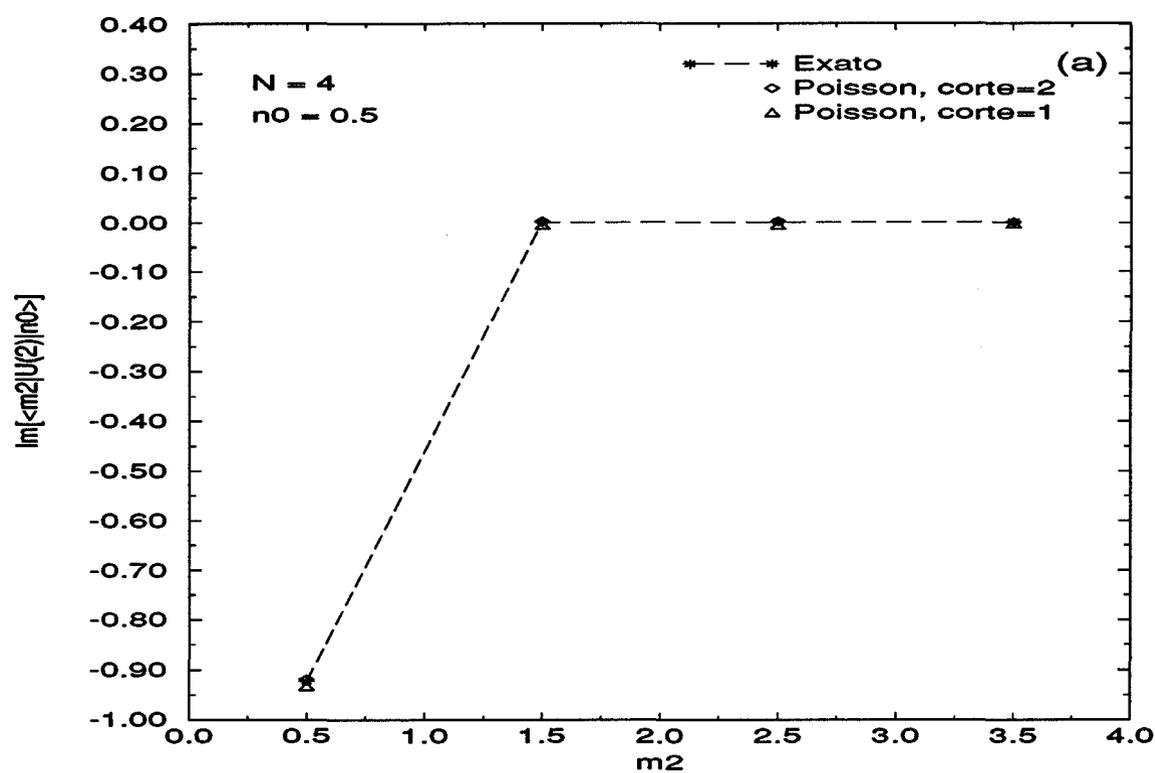


Figura.4.3: A mesma comparação feita na Figura 4.1, da parte real do propagador exato com a soma de Poisson truncada, para o extremo limite não clássico de  $N = 4$ .



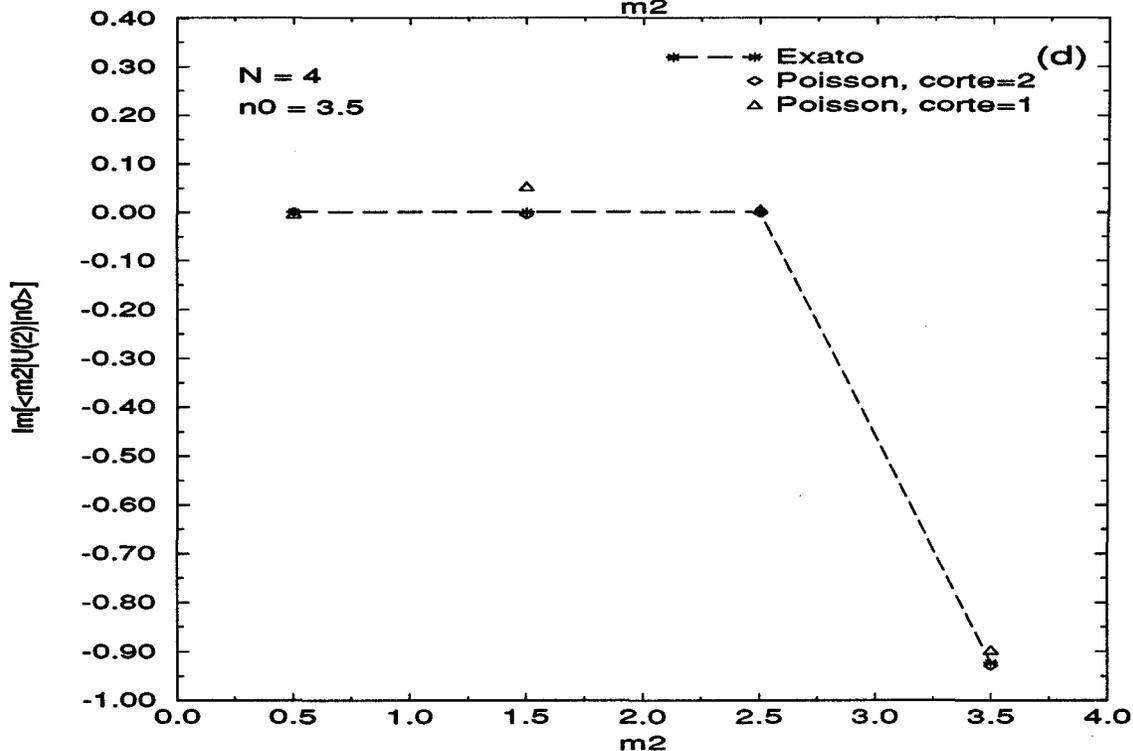
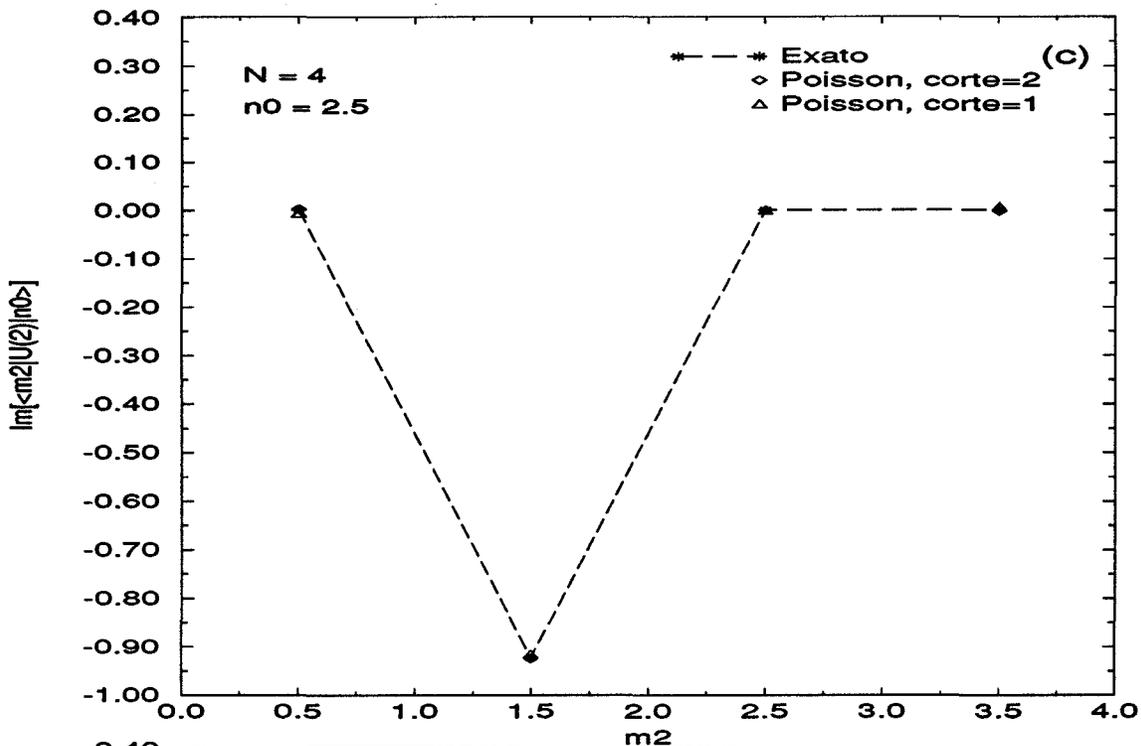


Figura.4.4: Comparação da parte imaginária do propagador exato com a soma de Poisson truncada para  $N = 4$ .

Agora vamos examinar o limite semiclássico,  $\hbar \rightarrow 0$ , que no mapa quântico corresponde a  $N = 1/(2\pi\hbar) \rightarrow \infty$ . A fim de comparar o resultado exato com a aproximação semiclássica usual, consideremos a evolução do mapa clássico. Se dividirmos o espaço de fase do mapa clássico em faixas, como descrito no Capítulo 2, encontraremos as seguintes evoluções permitidas classicamente, com respeito ao par contínuo  $(p, q)$ ,

$$\begin{aligned}
 (\nu = 00 \longrightarrow \mu = 00) &\implies 0 < q < \frac{1}{4} \longrightarrow 0 < p < \frac{1}{4} \\
 (\nu = 01 \longrightarrow \mu = 10) &\implies \frac{1}{4} < q < \frac{1}{2} \longrightarrow \frac{1}{2} < p < \frac{3}{4} \\
 (\nu = 10 \longrightarrow \mu = 01) &\implies \frac{1}{2} < q < \frac{3}{4} \longrightarrow \frac{1}{4} < p < \frac{1}{2} \\
 (\nu = 11 \longrightarrow \mu = 11) &\implies \frac{3}{4} < q < 1 \longrightarrow \frac{3}{4} < p < 1.
 \end{aligned} \tag{4.8}$$

Identificando  $q_0 = (n_0 + 1/2)/N$  e  $p_2 = (m_2 + 1/2)/N$  com as coordenadas clássicas  $q$  e  $p$ , vemos de (4.8) que a propagação ao longo dos caminhos clássicos não pode fornecer todas as possíveis transições  $(n_0 \rightarrow m_2)$  no mapa quântico. Na Figura 4.5 é mostrado esquematicamente quais são as transições permitidas, segundo a evolução clássica. Este tipo de representação é extensivamente usada no belo trabalho de Saraceno e Voros [18], que também mostra o propagador do mapa do padeiro para valores maiores de  $l$ .

Se usarmos a aproximação semiclássica proposta por Ozorio de Almeida e Saraceno [11] para  $l = 2$ , encontraremos justamente o primeiro termo do lado direito da eq. (4.7). Então, a expressão exata para o propagador pode ser escrita como

$$\langle m_2, \mu_2 | U^2 | n_0, \nu_0 \rangle = \langle m_2, \mu_2 | U^2 | n_0, \nu_0 \rangle^{(est.)} + \langle m_2, \mu_2 | U^2 | n_0, \nu_0 \rangle^{(c.q.)}, \tag{4.9}$$

onde  $\langle m_2, \mu_2 | U^2 | n_0, \nu_0 \rangle^{(c.q.)}$  é a correção quântica, escrita em termos das funções  $E_i$ , para o propagador estacionário  $\langle m_2, \mu_2 | U^2 | n_0, \nu_0 \rangle^{(est.)}$  (sendo, portanto, um exemplo do resultado geral obtido no Capítulo 3, eq. (3.11)).

Devemos enfatizar que a aproximação de fase estacionária está relacionada apenas como os termos  $K_1, L_1 = 0$  ou 1 na soma de Poisson. Desta forma, as correções quânticas são, em sua maioria, devidas aos outros termos da série. Com respeito aos cálculos mostrados nas Figs. 4.1 e 4.2, vemos que todos os  $n_0$ 's usados estão na região  $\nu = 00$  da Fig. 4.5. Disto segue que  $\langle m_2, \mu_2 | U^2 | n_0, \nu_0 \rangle^{(est.)}$  pode ser não-nulo apenas no primeiro quarto do intervalo de  $m_2$ . Assim, o quanto o propagador difere de zero nas demais regiões mede diretamente as correções quânticas à aproximação semiclássica. Tais correções parecem ser pequenas, exceto perto das linhas  $p_2 = 1/4, 1/2, 3/4$  e 1 (especialmente desta última).

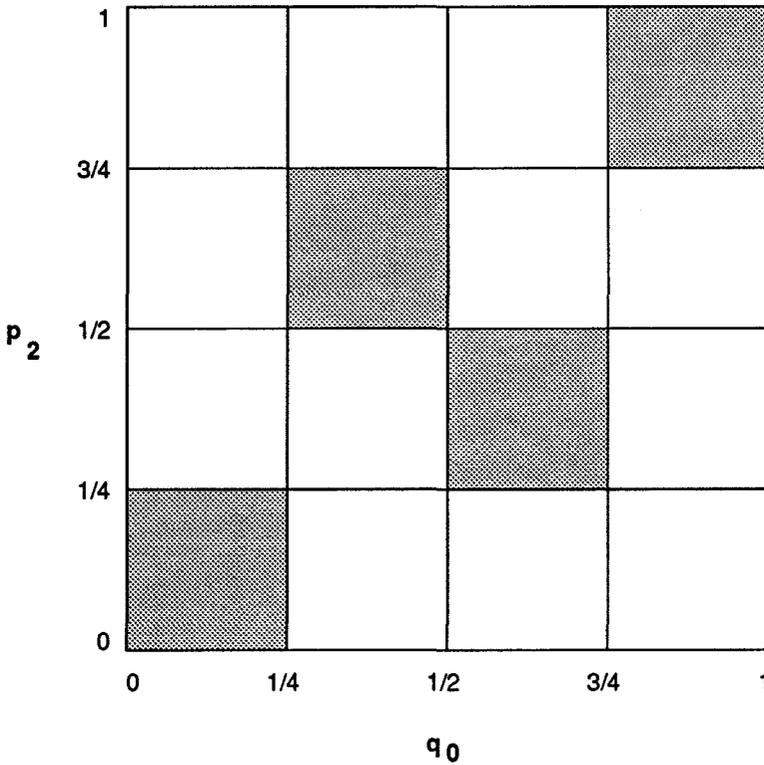
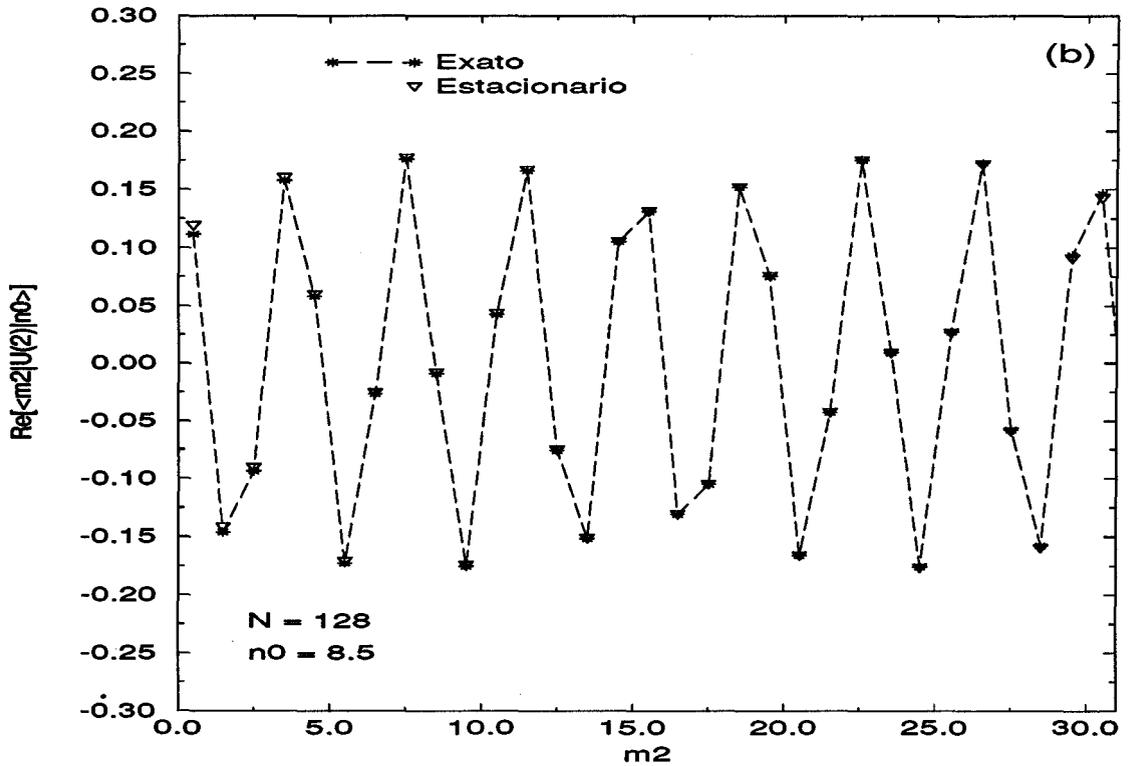
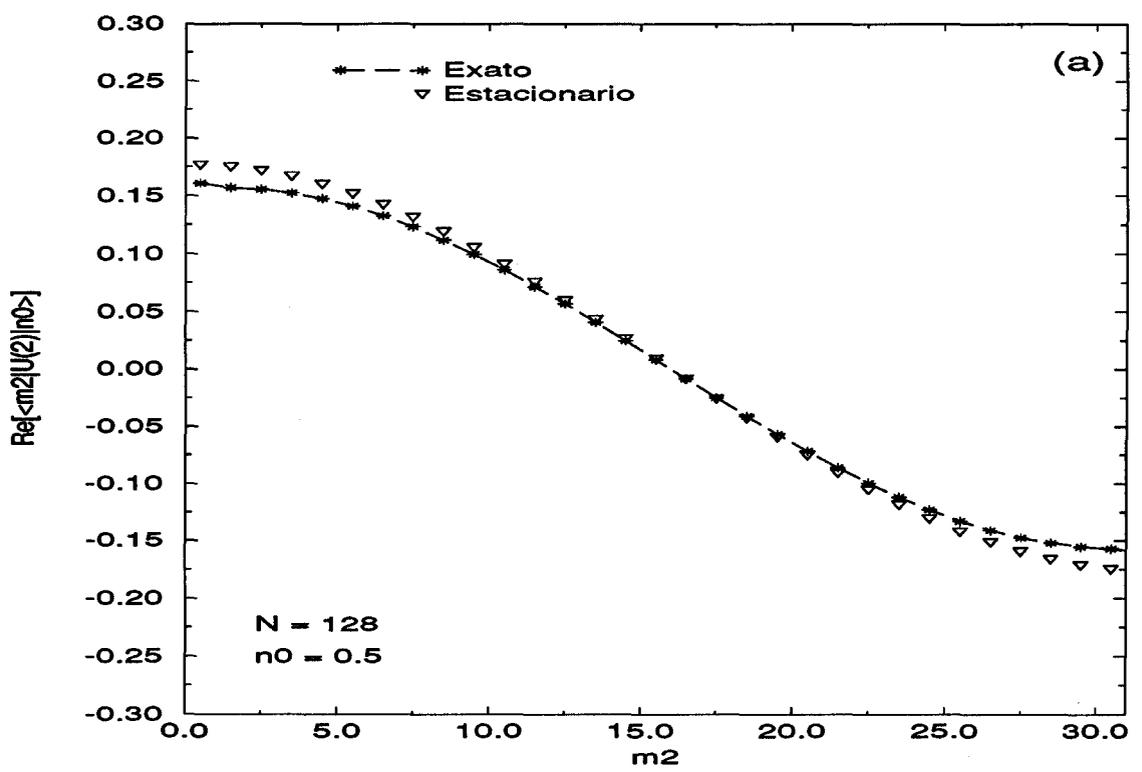


Figura 4.5: Configuração esquemática do propagador  $\langle m_2, \mu_2 | U^2 | n_0, \nu_0 \rangle^{(est.)}$ . Fora da região hachurada, não há propagação na aproximação semiclássica.

Na região onde a aproximação de fase estacionária é não-nula, é de fato visivelmente boa, especialmente quando está bem afastada das bordas do quadrado  $\nu = 00$ . A parte real do propagador para  $N = 128$  é comparada com a simples aproximação semiclássica para diferentes valores de  $n_0$  na Fig. 4.6. Na Fig. 4.7 é mostrada a parte imaginária correspondente. Em ambos os casos, o simples resultado de fase estacionária tem excelente concordância com o comportamento fortemente oscilatório característico desta região.



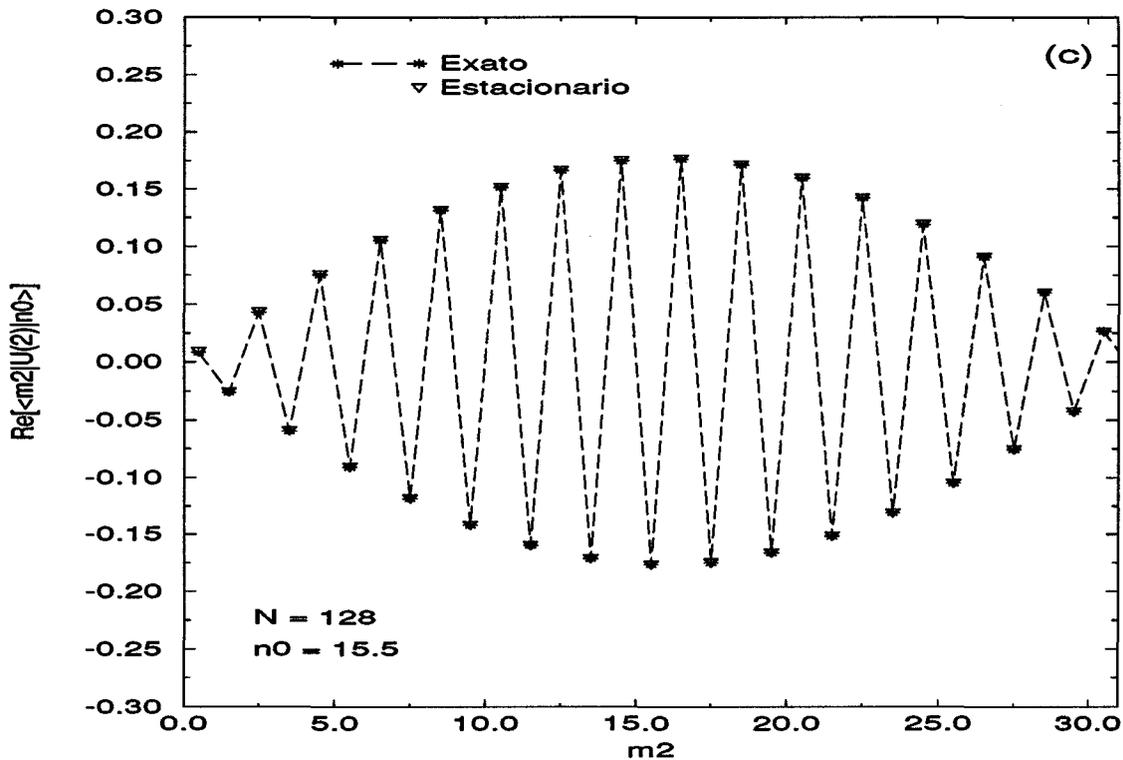
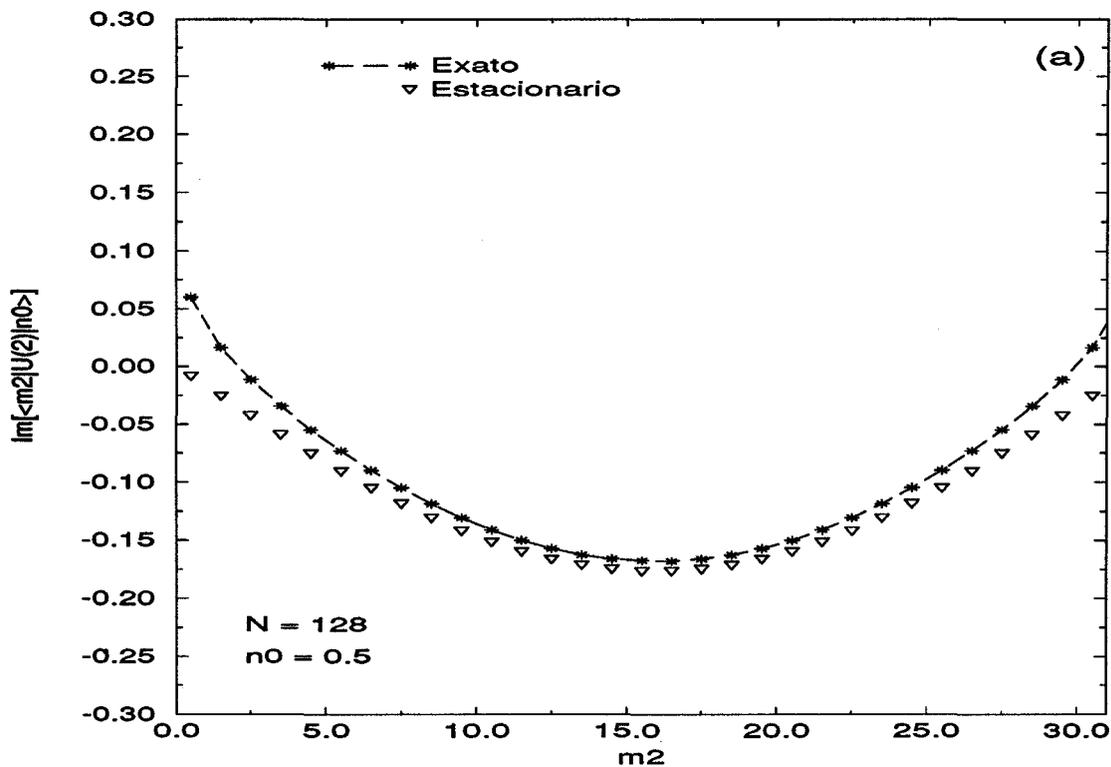


Figura 4.6: A parte real do propagador exato é comparada com a aproximação semiclássica no primeiro quadrado hachurado da Fig. 4.5, sendo  $N = 128$ .



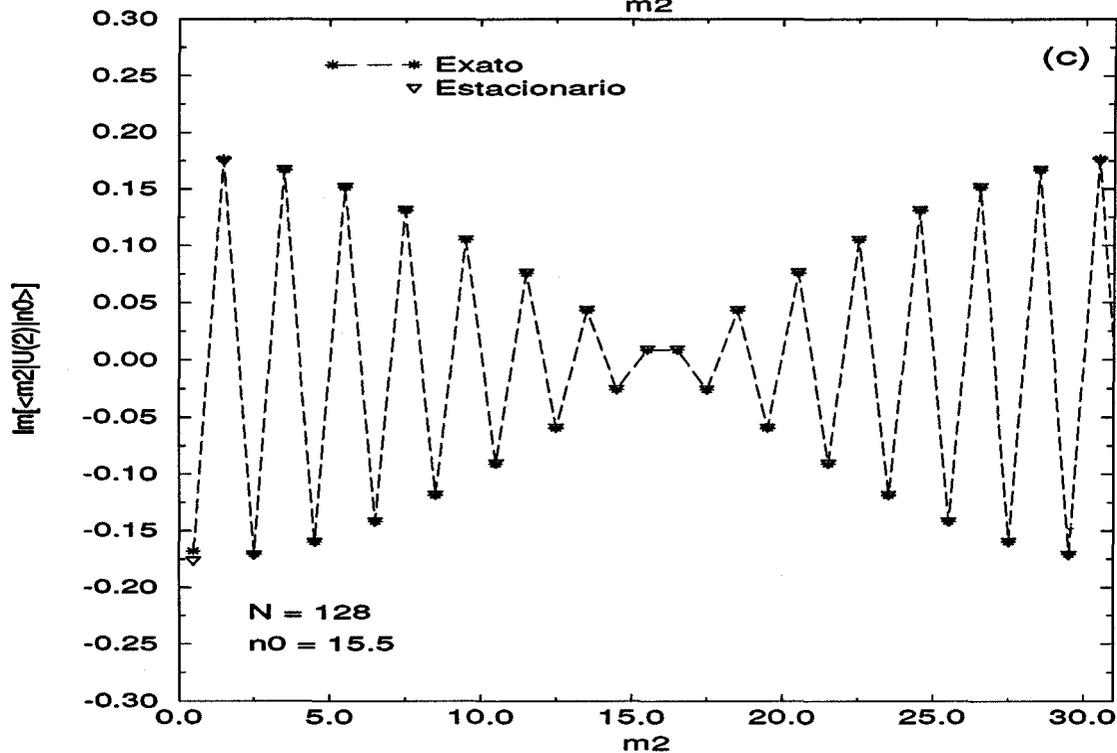
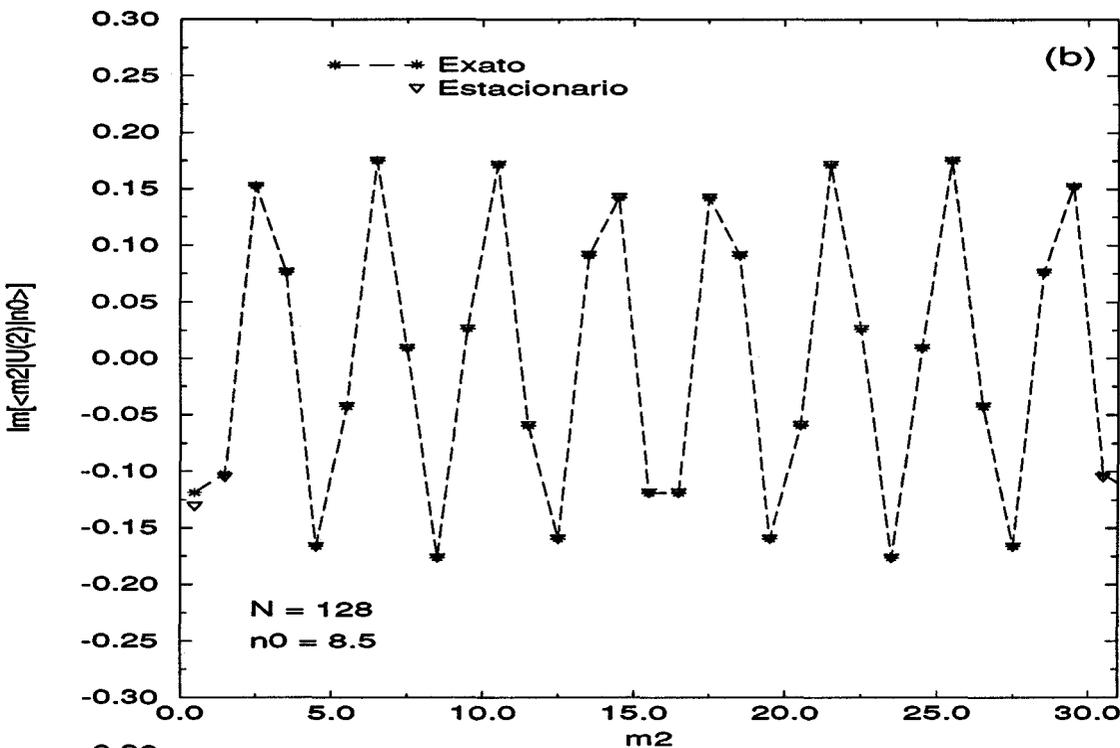


Figura 4.7: A parte imaginária do propagador exato é comparada com a aproximação semi-clássica.

## 4.2 O traço do propagador

De (3.14), temos que para  $l = 2$

$$\text{Tr}(U^2) = 2N^2 \sum \int_0^{\frac{1}{2}} dp_2 dp_1 dq_1 dq_0 \exp[2\pi i N \varphi(p, q, \mu_2, \nu_0, K, L)], \quad (4.10)$$

onde

$$\sum \equiv \sum_{\mu_2, \nu_0=0}^1 \sum_{K_2, K_1, L_1, L_0=-\infty}^{\infty} (-1)^{(K_2+K_1+L_1+L_0)} \quad (4.11)$$

e

$$\begin{aligned} \varphi(p, q, \mu_2, \nu_0, K, L) = & p_2(K_2 + \frac{\nu_0}{2}) + p_1(K_1 + \frac{\mu_2}{2}) + q_1(L_1 + \frac{\nu_0}{2}) + q_0(L_0 + \frac{\mu_2}{2}) \\ & - 2p_2q_1 - 2p_1q_0 + p_1q_1 + p_2q_0. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Com a ajuda de (4.3), a equação acima pode ser integrada sobre  $p_1$  e  $q_0$ , dando

$$\begin{aligned} \text{Tr}(U^2) = & -\frac{N}{2\pi i} \sum \int_0^{\frac{1}{2}} dp_2 dq_1 \exp[\pi i N (p_2 + L_0 + \frac{\mu_2}{2})(q_1 + K_1 + \frac{\mu_2}{2})] \\ & \times \exp\{2\pi i N [p_2(K_2 + \frac{\nu_0}{2}) + q_1(L_1 + \frac{\nu_0}{2}) - 2p_2q_1]\} \\ & \times \sum_{b, a=0}^1 (-1)^{(b+a)} E[-(p_2 + L_0 + \frac{\mu_2}{2} - b), q_1 + K_1 + \frac{\mu_2}{2} - a], \end{aligned} \quad (4.13)$$

com

$$E(\psi, \varphi) = \text{Ei}[\pi i N \psi \varphi] + i\frac{\pi}{2} \xi(\psi) \xi(\varphi). \quad (4.14)$$

Para a integral sobre  $q_1$ , consideramos a relação

$$\int_u^v \exp(\beta x) \text{Ei}(\alpha x) dx = \frac{1}{\beta} \exp(\beta x) \text{Ei}(\alpha x) \Big|_u^v - \frac{1}{\beta} \int_u^v \frac{\exp[(\alpha + \beta)x]}{x} dx. \quad (4.15)$$

Então encontramos, após tediosas mas simples manipulações,

$$\begin{aligned} \text{Tr}(U^2) = & \frac{1}{(2\pi)^2} \sum \sum_{b, a=0}^1 (-1)^{(b+a)} \int_{u_0}^{u_0 + \frac{1}{2}} dp_2 \frac{1}{(-\frac{3}{2}p_2 + L_1 + 2L_0 + \frac{\nu_0}{2} + \mu_2 - \frac{3}{2}b)} \\ & \times \exp[2\pi i N p_2(K_2 + 2K_1 + \frac{\nu_0}{2} + \mu_2 - \frac{3}{2}a)] \\ & \times \left\{ \exp[2\pi i N (-\frac{3}{2}p_2 + L_1 + 2L_0 + \frac{\nu_0}{2} + \mu_2 - \frac{3}{2}b)(K_1 + \frac{\mu_2}{2} - a + \frac{1}{2})] \right. \\ & \left. \times E[-p_2, K_1 + \frac{\mu_2}{2} - a + \frac{1}{2}] \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - \exp[2\pi i N(-\frac{3}{2}p_2 + L_1 + 2L_0 + \frac{\nu_0}{2} + \mu_2 - \frac{3}{2}b)(K_1 + \frac{\mu_2}{2} - a)] \\
& \times E[-p_2, K_1 + \frac{\mu_2}{2} - a] \\
& - E[2(-2p_2 + L_1 + 2L_0 + \frac{\nu_0}{2} + \mu_2 - \frac{3}{2}b), K_1 + \frac{\mu_2}{2} - a + \frac{1}{2}] \\
& + E[2(-2p_2 + L_1 + 2L_0 + \frac{\nu_0}{2} + \mu_2 - \frac{3}{2}b), K_1 + \frac{\mu_2}{2} - a] \}. \quad (4.16)
\end{aligned}$$

com  $u_0 = L_0 + \frac{\mu_2}{2} - b$ . Até onde sabemos, a integral (4.16) não tem forma analítica fechada, portanto temos que resolvê-la numericamente.

Nas Figs. 4.8 e 4.9 mostramos, respectivamente, a parte real e imaginária do traço do propagador para  $N = 4, 8, 16, 32, 64, 128$  e  $256$ . O cálculo exato (multiplicação de matrizes, eq. (3.12)) é comparado com a soma de Poisson com os cortes iguais a 0, 1 e 3. Aqui, corte =  $j$  significa que somente os termos com  $K_2, K_1, L_1, L_0 = -j$  a  $K_2, K_1, L_1, L_0 = j$  são considerados na soma. Assim, para corte = 0, 1 e 3 temos 1, 81 e 2401 integrais a serem resolvidas numericamente. O aumento de  $N$  melhora a convergência da soma de Poisson (para a parte imaginária não há diferenças numéricas sensíveis entre os vários cortes). Então, no limite de  $N$  grande, podemos obter um bom valor para o traço do propagador resolvendo apenas uma única integral!

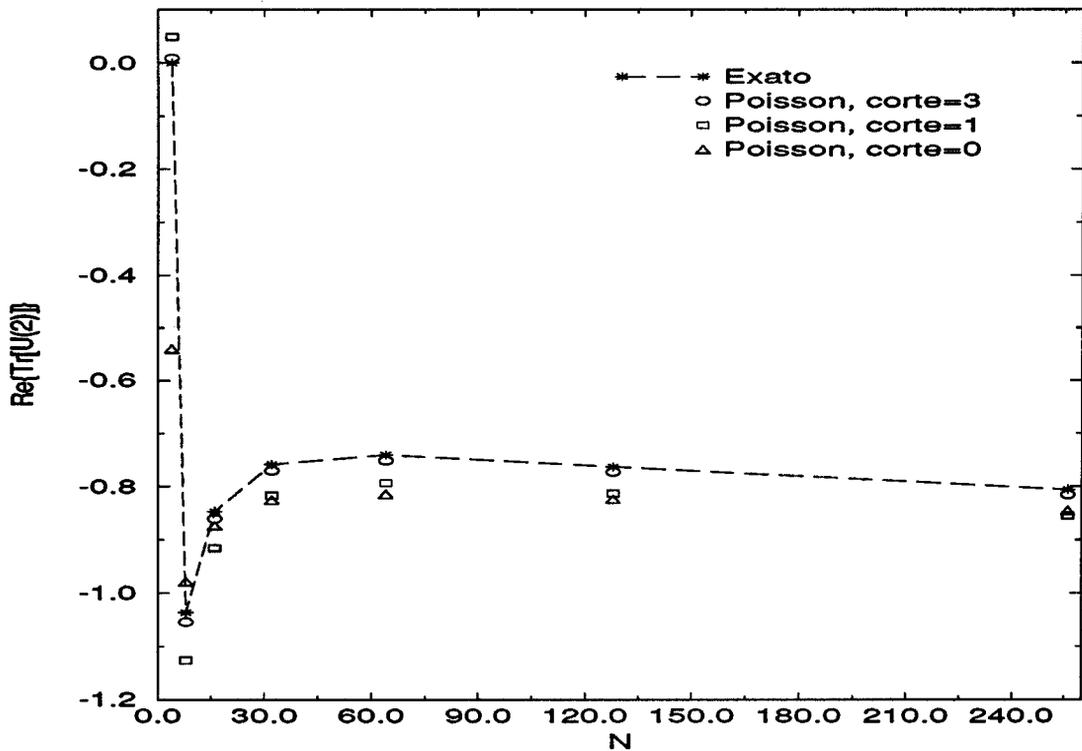


Figura 4.8: A parte real do traço do propagador exato é comparada com vários cortes na soma de Poisson para diferentes valores de  $N$ .

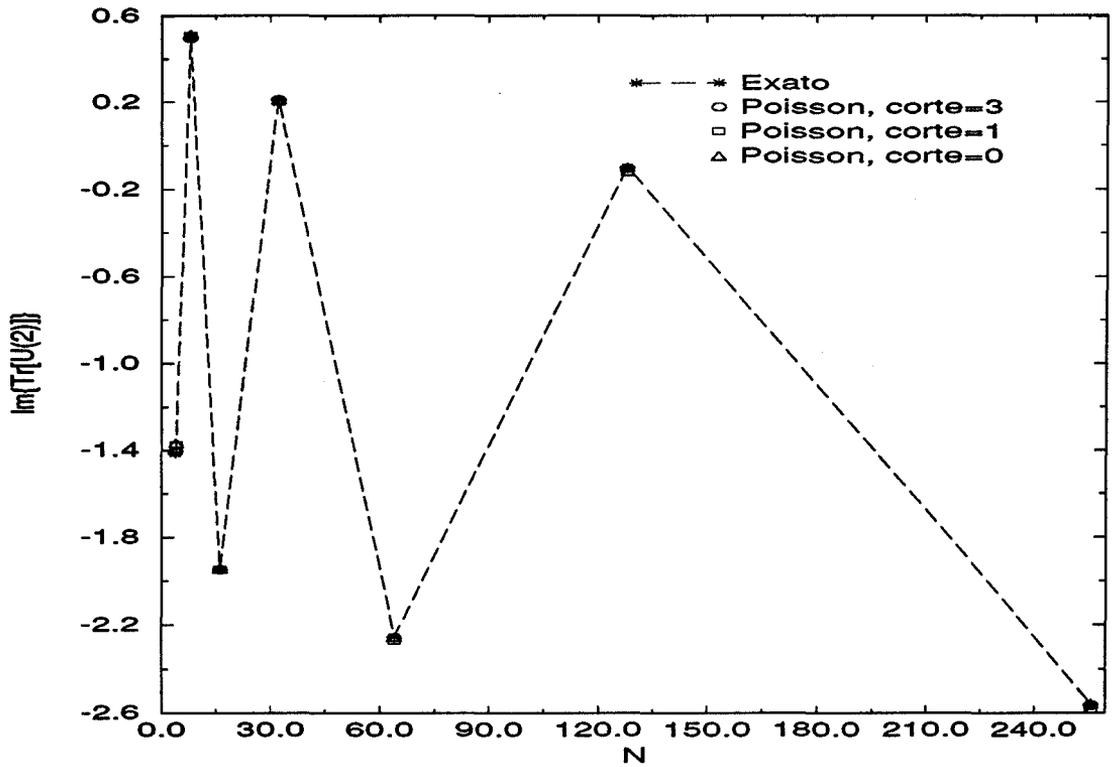


Figura 4.9: A parte imaginária do traço do propagador exato é comparada com vários cortes na soma de Poisson para diferentes valores de  $N$ .

### 4.3 Contribuições Semiclássicas e Puramente Quânticas ao Propagador Exato

No início deste Capítulo fizemos um apanhado geral sobre o propagador exato para  $l = 2$ . Observamos, a convergência da soma de Poisson para diferentes truncamentos, a boa concordância da aproximação semiclássica nas regiões de propagação clássica permitida e o comportamento do propagador para as regiões não-clássicas do espaço de fase. Estas análises foram feitas basicamente através da simples inspeção dos gráficos de  $\langle m_2, \mu_2 | U^2 | n_0, \nu_0 \rangle$ , onde fixamos  $n_0$  e variamos  $m_2$ , considerando diferentes cortes na soma de Poisson. Nesta Seção, porém, queremos discutir como os resultados obtidos graficamente podem ser entendidos, a partir da avaliação direta das correções quânticas ao propagador semiclássico.

Com este propósito, vamos reescrever o propagador exato (4.7) sob a seguinte forma

$$\langle m_2, \mu_2 | U^2 | n_0, \nu_0 \rangle = \frac{2}{\sqrt{N}} \exp[2\pi i N(-4p_2 q_0 + p_2 \mu_2 + q_0 \nu_0)] \{ \delta_{\mu\nu} + W(p_2, q_0) \}, \quad (4.17)$$

onde

$$W(p_2, q_0) = \frac{1}{2\pi i} \sum_{K_1 L_1} (-1)^{K_1 + L_1} (-1)^{\mu_2 + \nu_0} \sum_{b, a=0}^1 (-1)^{b+a} \times \text{Ei}[2\pi i N(-2p_2 + L_1 + \frac{\nu_0}{2} + \frac{b}{2})(-2q_0 + K_1 + \frac{\mu_2}{2} + \frac{a}{2})], \quad (4.18)$$

aqui lembramos que  $p_2 = (m_2 + 1/2)/N$  e  $q_0 = (n_0 + 1/2)/N$ . Fica portanto evidente que  $W(p_2, q_0)$  mede quanto o propagador exato difere da aproximação semiclássica usual.

A fim de estudarmos, para as várias regiões de interesse, o comportamento de  $W(p_2, q_0)$ , vamos introduzir a seguinte aproximação para as funções exponenciais-integrais (ver Apêndice C)

$$\begin{aligned} \text{Ei}[ix] &\approx \frac{\exp[ix]}{ix}, & \text{se } |x| \geq \frac{\pi}{2} \\ \text{Ei}[ix] &\approx \Gamma - \frac{i\pi}{2} + \ln[x] + ix - \frac{x^2}{2}, & \text{se } |x| < \frac{\pi}{2}, \end{aligned} \quad (4.19)$$

com  $\Gamma = 0,577215\dots$  sendo a constante de Euler. Assim, quando o módulo do argumento da função exponencial-integral é grande, esta se comporta como uma função oscilante, cuja amplitude decai com  $1/x$ . Já para argumentos de módulo pequeno, seu comportamento é basicamente logarítmico, divergindo na origem.

O papel de  $x$ , em (4.19), é desempenhado em (4.18) por

$$\phi = 2\pi N(-2p_2 + L_1 + \frac{\nu_0}{2} + \frac{b}{2})(-2q_0 + K_1 + \frac{\mu_2}{2} + \frac{a}{2}). \quad (4.20)$$

Logo, para  $p_2$  e  $q_0$  fixos, são os valores de  $K_1$  e  $L_1$  que determinam a importância da contribuição de cada termo da soma de Poisson para  $W(p_2, q_0)$ , uma vez que  $\phi$  depende diretamente destes valores.

Como exemplo, consideremos o quadrado hachurado no canto esquerdo inferior da Figura 4.5. Quanticamente, para esta região, temos que  $0 < p_2, q_0 < \frac{1}{4}$  e  $\mu_2 = \nu_0 = 0$ , portanto  $-\frac{1}{2} + \frac{1}{N} \leq -2p_2 + \frac{\nu_0}{2}$ ,  $-2q_0 + \frac{\mu_2}{2} \leq -\frac{1}{N}$ . Nestas condições,  $\phi$  pode ser menor que  $\pi/2$ , apenas se  $K_1 = L_1 = 0$ . Então podemos escrever

$$W(p_2, q_0) \approx W_{00}(p_2, q_0) + \frac{1}{2\pi i} \sum_{K_1 L_1 \neq 0} (-1)^{K_1 + L_1} \sum_{b, a=0}^1 (-1)^{b+a} \times \frac{\exp[2\pi i N(-2p_2 + L_1 + \frac{b}{2})(-2q_0 + K_1 + \frac{a}{2})]}{2\pi i N(-2p_2 + L_1 + \frac{b}{2})(-2q_0 + K_1 + \frac{a}{2})}, \quad (4.21)$$

onde o somatório em  $K_1, L_1$  exclui o termo  $K_1 = L_1 = 0$  e

$$W_{00}(p_2, q_0) = \frac{1}{2\pi i} \sum_{b, a=0}^1 (-1)^{b+a} \text{Ei}[2\pi i N(-2p_2 + \frac{b}{2})(-2q_0 + \frac{a}{2})]. \quad (4.22)$$

Notamos aqui que, se um dos quatro termos de  $W_{00}$  tiver o módulo do argumento menor que  $\pi/2$ , os outros três não terão e portanto, só contribuirão com expressões do tipo  $\exp[ix]/(ix)$ .

Tomando agora  $\phi_{q_0} = -2q_0 + a/2$ , vemos que  $|\phi_{q_0}|$  assume seu valor mínimo,  $1/N$ , quando  $q_0$  for  $1/2N$  ( $a = 0$ ) ou  $1/4 - 1/2N$  ( $a = 1$ ). Classicamente isto corresponde a estarmos o mais próximo possível das bordas (linhas)  $q = 0$  ou  $1/4$  do quadrado hachurado considerado na Figura 4.5, o mesmo ocorrendo para  $|\phi_{p_2}|$  ( $\phi_{p_2} = -2p_2 + b/2$ ) com relação às bordas (linhas)  $p = 0$  ou  $1/4$ . Notamos também que mesmo que um dos  $|\phi|$ 's assumam o valor mínimo  $1/N$ , o outro ainda necessitará ser pequeno para que  $|2\pi N \phi_{p_2} \phi_{q_0}| < \pi/2$ . Assim, somente quando estivermos perto dos "cantos clássicos",  $(0,0)$ ,  $(0,1/4)$ ,  $(1/4,0)$  ou  $(1/4,1/4)$  é que teremos para (4.22) uma contribuição do tipo  $\ln[x] + \mathcal{O}[x]$  e portanto, maior que algo que decai como  $1/x$ . Isto explica, então, a ótima concordância entre o propagador semiclassical e o exato vista nas Figuras 4.6 (b)-(c) e 4.7 (b)-(c), uma vez que, para estes casos, estamos afastados dos referidos "cantos". Para as Figuras 4.6 (a) e 4.7 (a), notamos uma discrepância, ainda que pequena, entre o exato e o semiclassical para valores de  $p_2$  próximos a 0 e  $1/4$ . Observamos entretanto que  $n_0 = 0$  nestas Figuras, implicando em  $\phi_{q_0} = 1/N$  (se  $a = 0$ ). Assim, esta pequena discrepância é esperada, pois neste caso estamos (para  $p_2 \approx 0$  ou  $p_2 \approx 1/4$ ) perto de um "canto".

Para quantificarmos as contribuições de  $W_{00}$  ao propagador exato, vamos considerar  $m_2 = n_2 = 0$ . Então

$$W_{00} \left( \frac{1}{2N}, \frac{1}{2N} \right) \approx \frac{1}{2\pi i} \left\{ \frac{\exp[2\pi i N (\frac{1}{2} - \frac{1}{N})^2]}{2\pi i N (\frac{1}{2} - \frac{1}{N})^2} - \frac{\exp[2\pi i (\frac{1}{2} - \frac{1}{N})]}{\pi i (\frac{1}{2} - \frac{1}{N})} \right. \\ \left. + \Gamma + \ln \left[ \frac{2\pi}{N} \right] - \frac{i\pi}{2} + \frac{2\pi i}{N} - \frac{4\pi^2}{N^2} \right\}, \quad (4.23)$$

que para  $N = 128$  resulta em  $W_{00} \approx -0,24 + 0,38i$ ; desprezando-se os termos exponenciais. Assim, inserindo este valor de  $W_{00}$  no lugar de  $W$  em (4.17), obtemos uma correção muito boa ao semiclássico para o ponto  $m_2 = n_0 = 0$  das Figuras 4.6 (a) e 4.7 (a). O mesmo podendo ser feito para todos os outros pontos onde haja discrepância.

Podemos agora estender este tipo de análise à região onde o termo semiclássico é nulo. Consideremos então  $0 < q_0 < 1/4$  ( $\nu_0 = 0$ ) e  $p_2 > 1/4$ . Obviamente aqui os valores de  $K_1$  e  $L_1$  para os quais há maior contribuição às correções quânticas não são necessariamente os mesmos que os da região anteriormente discutida. A Tabela 4.1 mostra, para  $0 < q_0 < 1/4$ , quais são estes valores de  $K_1$  e  $L_1$ , de acordo com a proximidade que  $p_2$  e  $q_0$  estejam das bordas (linhas) 0, 1/4, 3/4 e 1 da Figura 4.5.

Região	Valor de $K_1$	Valor de $L_1$
$0 < p_2 < 1/4$	$K_1 = 0$	$L_1 = 0$
$1/4 < p_2 < 1/2$	$K_1 = 0$	$p_2 \approx 1/4, L_1 = 0$ $p_2 \approx 1/2, L_1 = 1$
$1/2 < p_2 < 3/4$	$q_0 \approx 0, K_1 = -1$ $q_0 \approx 1/4, K_1 = 0$	$L_1 = 1$
$3/4 < p_2 < 1$	$q_0 \approx 0, K_1 = -1$ $q_0 \approx 1/4, K_1 = 0$	$p_2 \approx 3/4, L_1 = 1$ $p_2 \approx 1, L_1 = 2$

Tabela 4.1

Face a esses resultados, podemos entender alguns dos comportamentos observados nas Figuras 4.1 e 4.2,

(i) Descontinuidade do propagador em  $p_2 \approx 1/4, 1/2$  e  $3/4$ : Primeiramente, notamos que para a maior contribuição à correção quântica, temos o fator  $(-1)^{K_1+L_1+\mu_2+\nu_0}$ , que pode ou não mudar de sinal quando  $p_2$  cruza uma das referidas linhas (comprovamos isto através de um rápido exame da Tabela 4.1). A descontinuidade na borda 1/4 é evidentemente devida à anulação do termo semiclássico para  $p_2 > 1/4$ . Agora, se tomamos em (4.18), a função  $Ei$  correspondente à maior contribuição, verificamos que seu argumento é o mesmo, porém, de sinal invertido, em cada um dos dois lados de  $p_2 \approx 1/4, 1/2$  e  $3/4$ . Como a parte imaginária de  $Ei$  é uma função ímpar, temos, então, que as outras descontinuidades são oriundas justamente destas mudanças de sinais.

(ii) Diferenças na amplitude dos propagadores para as regiões não-clássicas das Figuras 4.1 e 4.2 (a) com relação às Figuras 4.1 e 4.2 (b)-(c): Para as Figuras (a),  $n_0 = 0$ , estando assim perto de uma borda, já para as Figuras (b) e (c), os  $n_0$ 's são tais que ficam afastados de bordas. Para os casos (a), temos, então, contribuições do tipo  $\ln[x] + \dots$  para um maior número de valores de  $m_2$ , do que para os casos (b) e (c). Assim, é de se esperar diferenças nos valores das amplitudes do propagador, de acordo com a proximidade que  $n_0$  esteja de uma borda.

(iii) Discrepância entre o exato e a soma de Poisson com corte=1 para valores grandes de  $m_2$ : Vemos da Tabela 4.1, que para  $0 < q_0 < 1/4$  e  $p_2 \approx 1$  ( $m_2$  próximo a  $N - 1$ ), o termo de maior contribuição a  $W(p_2, q_0)$  vem de  $L_1 = 2$ . Para corte=1, este termo não é computado, sendo portanto o motivo das diferenças observadas para a região  $p_2 > 3/4$ . Como para corte=2,  $L_1 = 2$  é considerado, temos, então, que a convergência deste truncamento da soma de Poisson funciona muito bem em todas as regiões.

Todos estes resultados são válidos para quaisquer valores de  $N$  ( $N \geq 4$ ). Para  $N = 4$  em particular, os comportamentos (i) e (ii) não têm muito sentido, porém (iii) continua verdadeiro, sendo inclusive observado nas Figuras 4.3 e 4.4.

Notamos que, para o termo de maior contribuição a  $W(p_2, q_0)$ , temos algo do tipo  $\ln[2\pi/N]$ , que para  $N$  finito é sempre finito. Podemos pensar que, com o aumento de  $N$ , esta correção se torne importante comparada ao termo semiclássico. Na verdade isto não é observado pois devemos ter em mente que, por exemplo, para  $N = 128$ ,  $\ln[2\pi/N] = -3.01$ , ao passo que para  $N = 1024$  (portanto uma ordem de grandeza maior),  $\ln[2\pi/N] = -5.09$ , o que não é um aumento tão significativo, considerando-se o rápido crescimento linear de  $N$ . Assim, a maior contribuição à soma de Poisson parece não ter uma dependência em  $N$  tão drástica, a ponto de torná-la comparável ao termo semiclássico usual. As Figuras 4.10 e 4.11 comparam, respectivamente, a parte real e imaginária do propagador exato com o semiclássico (na região  $\mu_2 = \nu_0 = 00$ ) para  $N = 1024$ , exemplificando então o não comprometimento da aproximação semiclássica devido a possíveis divergências logarítmicas.

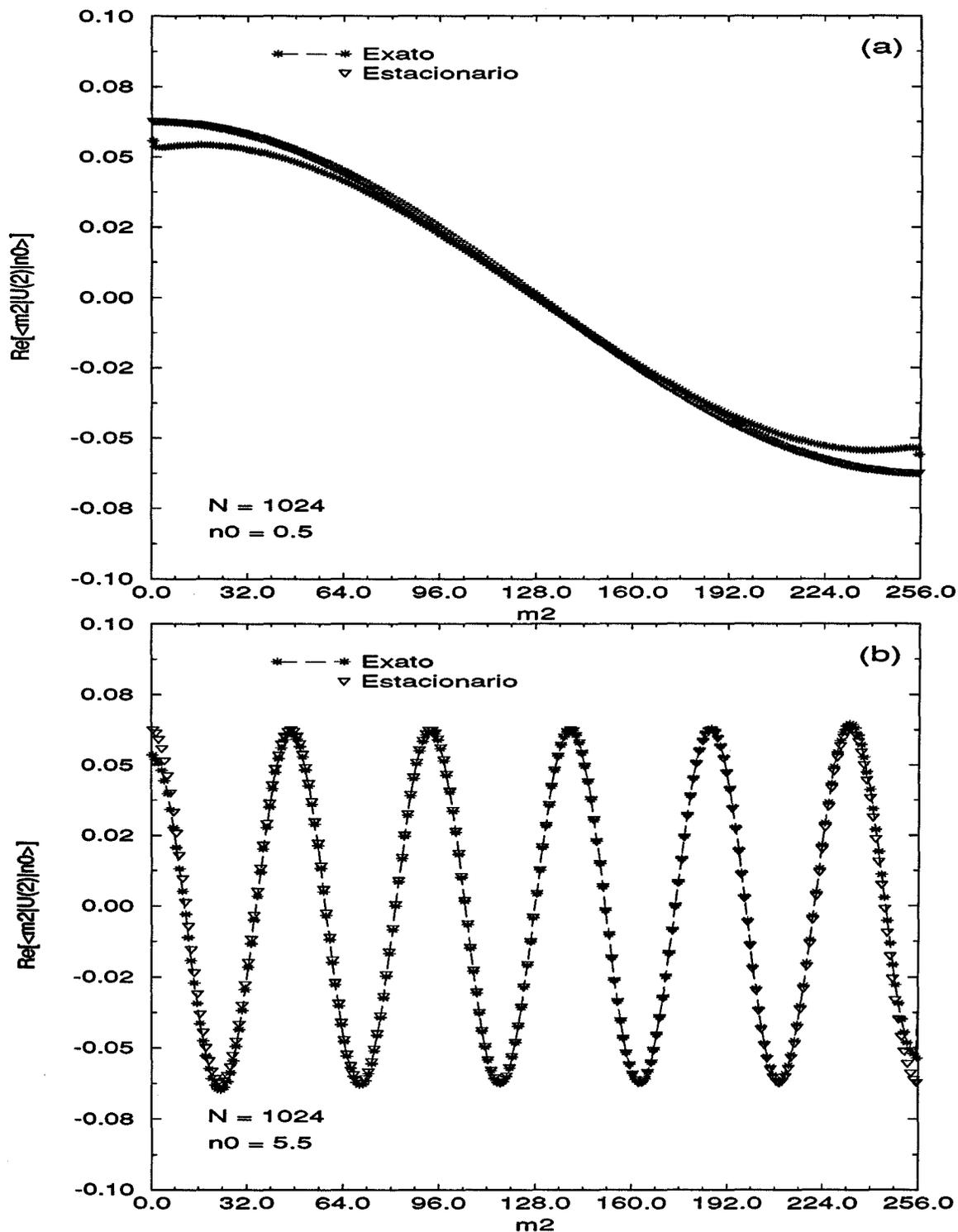


Figura 4.10: A parte real do propagador exato é comparada com a aproximação semiclassical no primeiro quadrado hachurado da Fig. 4.5, sendo  $N = 1024$ .

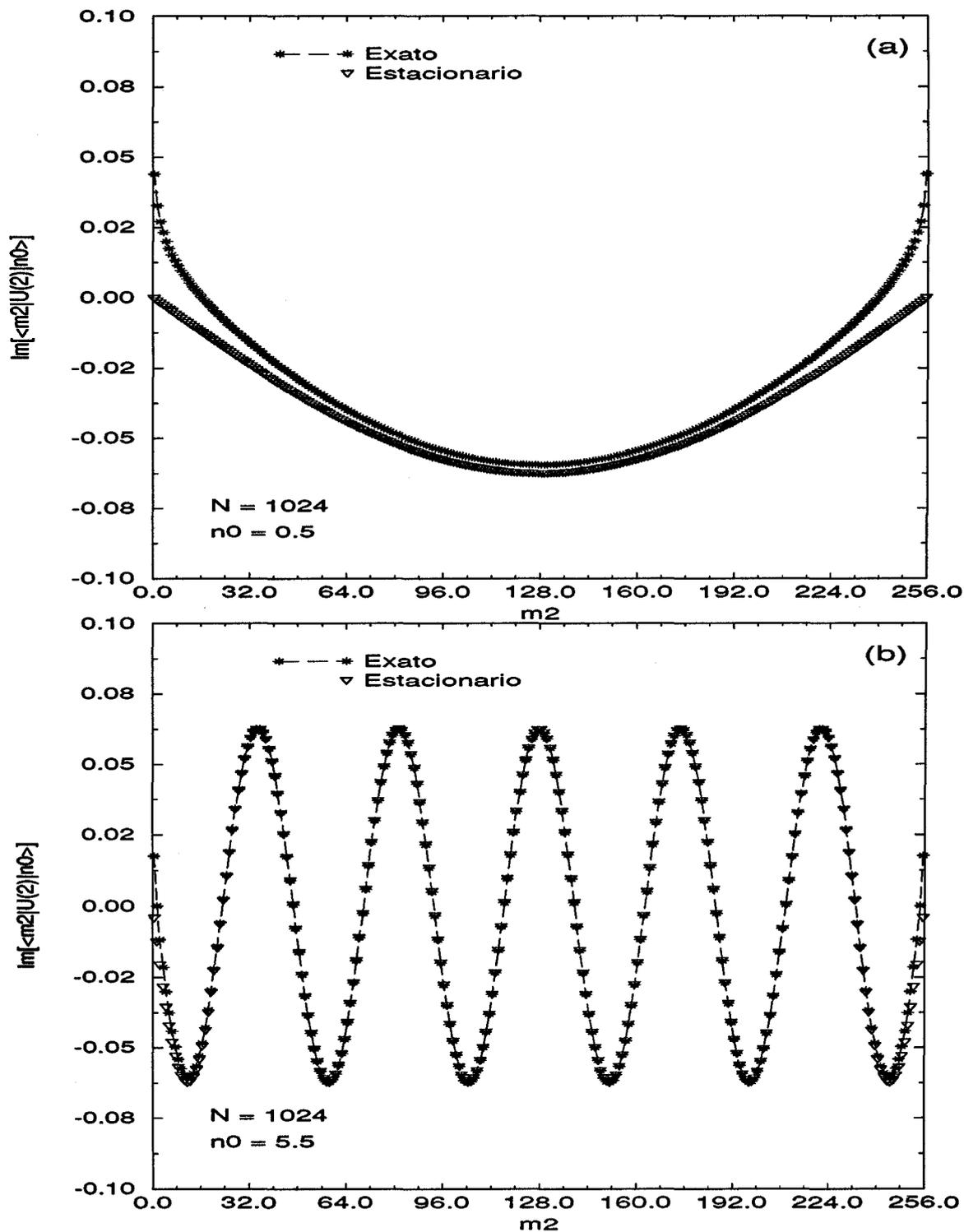


Figura 4.11: As mesmas comparações feitas na Figura 4.10, só que para a parte imaginária do propagador.

Os pontos discutidos até aqui nos sugerem a seguinte possibilidade: ao invés de fazermos cortes no somatório de Poisson, tomando termos que variem de  $-j$  a  $j$ , escolhemos para cada par  $(m_2, n_0)$  fixo, os valores de  $K_1$  e  $L_1$  correspondentes à contribuição máxima para  $W(p_2, q_0)$ , e calculamos a soma de Poisson tomando apenas estes termos. Podemos dizer, então, que temos corte = m.c. (m.c. - maior contribuição) para tal truncamento. Desta forma, no cálculo do propagador, para cada ponto  $m_2, n_0$ , temos uma escolha particular de  $K_1$  e  $L_1$ , que fornece a m.c.. Por exemplo, se  $0 < q_0 < 1/4$ , os valores a serem considerados devem ser os mostrados na Tabela 4.1. Assim temos 1 termo no truncamento se  $0 < p_2 < 1/4$  ou  $1/2 < p_2 < 3/4$  e 2 termos se  $1/4 < p_2 < 1/2$  ou  $3/4 < p_2 < 1$ . As Figuras 4.12 e 4.13 mostram resultados para este tipo de corte, que são realmente muito bons levando-se em conta os poucos termos considerados!

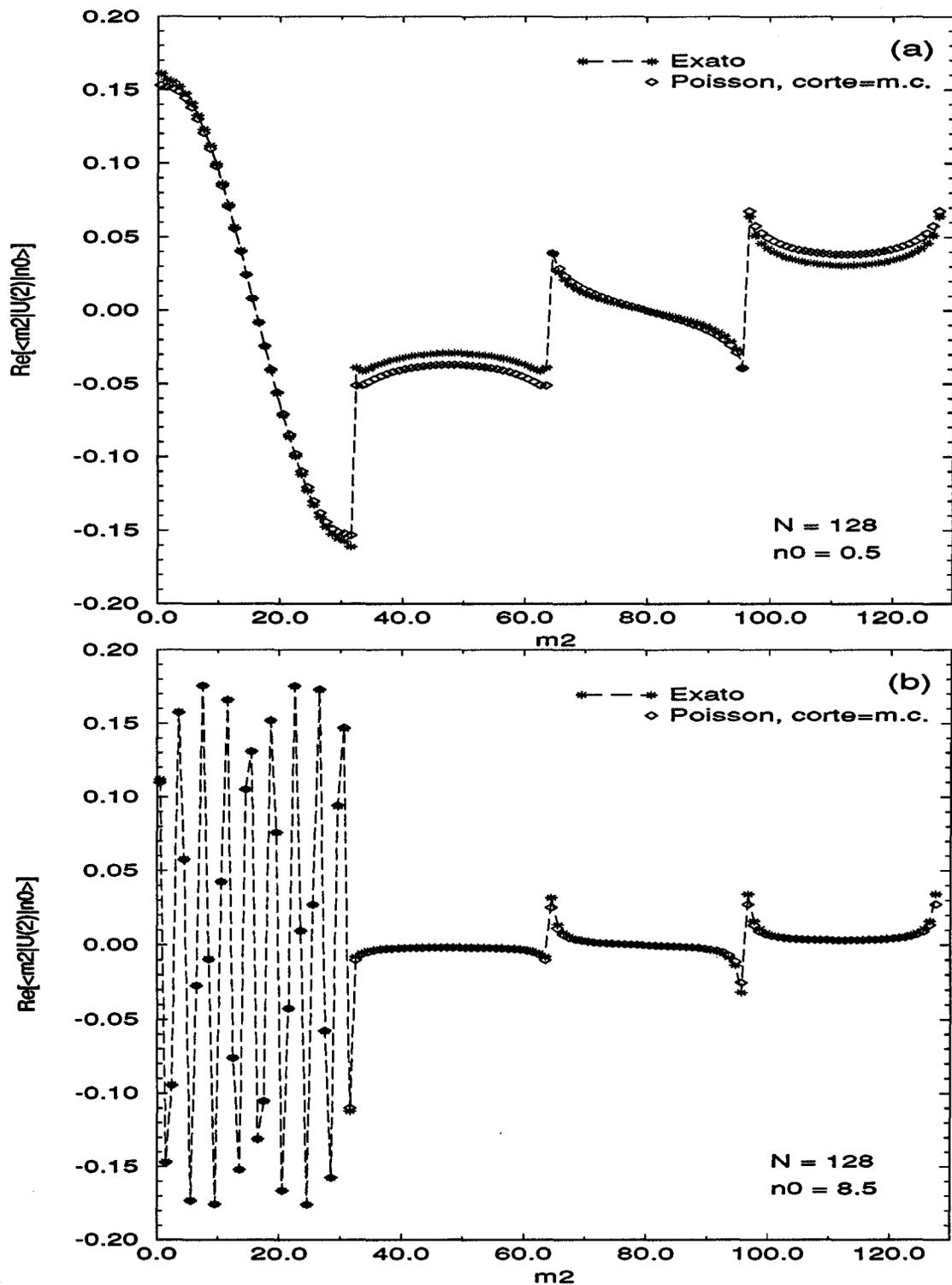


Figura 4.12: Comparação da parte real do propagador exato com a soma de Poisson para corte=m.c., sendo  $N=128$ .

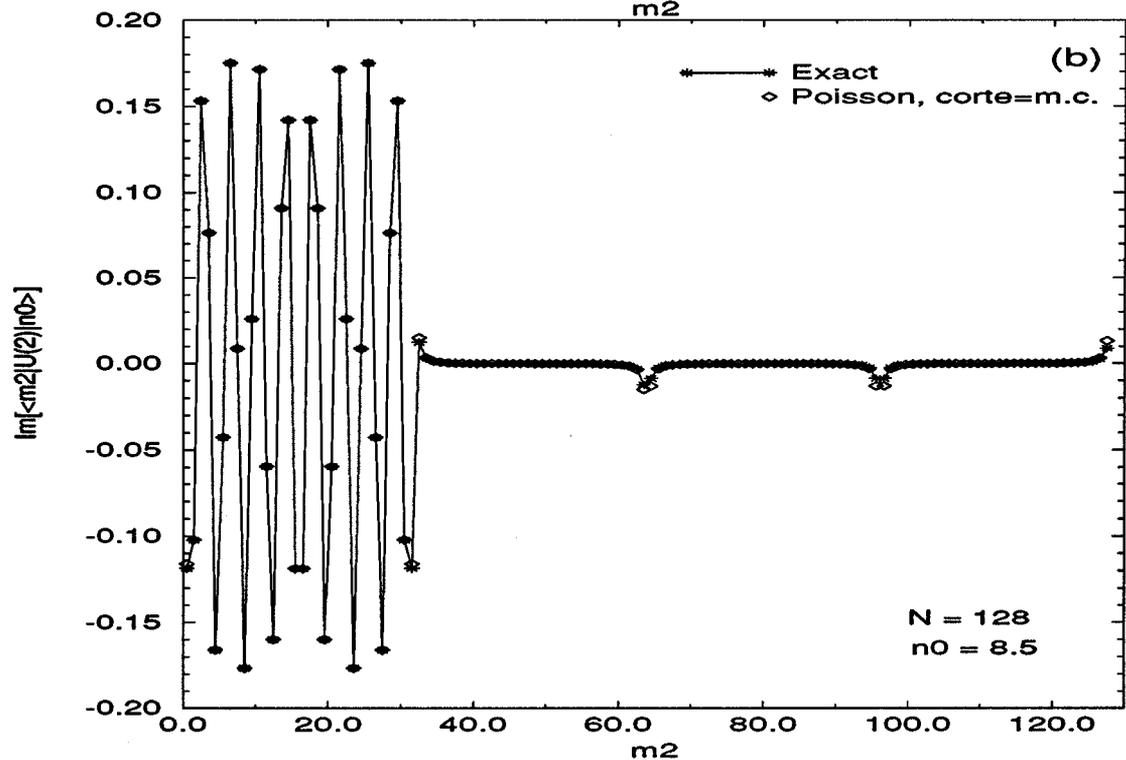
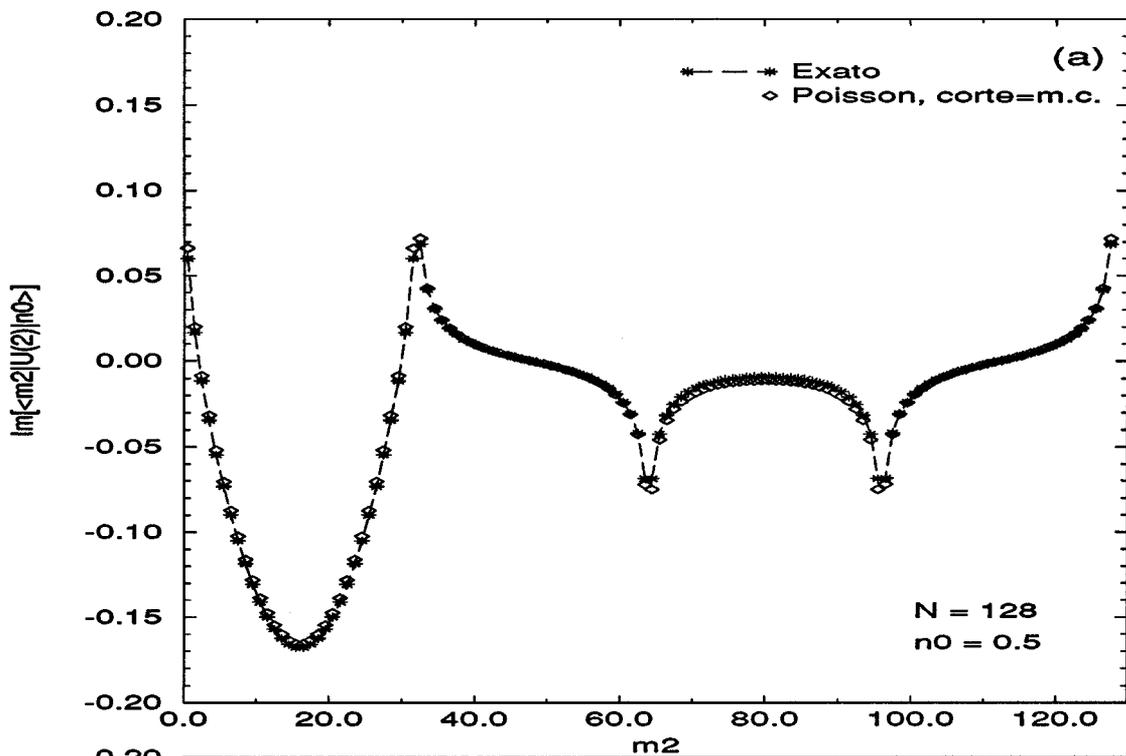


Figura 4.13: As mesmas comparações feitas na Figura 4.12, só que para a parte imaginária do propagador.

## 4.4 Uma Expressão Alternativa para o Propagador

Podemos reescrever a expressão (4.7), que fornece o propagador exato para  $l = 2$ , em uma forma diferente. Para tal, notamos que a eq. (4.1) é basicamente uma soma do seguinte tipo de integral

$$J = \int_0^{\frac{1}{2}} dy \int_0^{\frac{1}{2}} dx \exp[i\lambda(xy + \beta y + \alpha x)], \quad (4.24)$$

que pode ser escrita como

$$J = \exp[-i\lambda\beta\alpha] \left\{ \left[ \int_0^{\alpha+\frac{1}{2}} dy \int_0^{\beta+\frac{1}{2}} dx + \int_0^{\alpha} dy \int_0^{\beta} dx - \int_0^{\alpha+\frac{1}{2}} dy \int_0^{\beta} dx - \int_0^{\alpha} dy \int_0^{\beta+\frac{1}{2}} dx \right] \exp[i\lambda y x] \right\}, \quad (4.25)$$

ou ainda

$$J = \frac{\exp[-i\lambda\beta\alpha]}{i\lambda} \sum_{b,a=0}^1 (-1)^{b+a} \mathcal{I}[\lambda(\alpha + \frac{b}{2})(\beta + \frac{a}{2})], \quad (4.26)$$

com

$$\mathcal{I}[x] = \int_0^x dt \frac{(\exp[it] - 1)}{t}. \quad (4.27)$$

Desta forma, nosso propagador exato é também dado por

$$\begin{aligned} \langle m_2, \mu_2 | U^2 | n_0, \nu_0 \rangle &= \frac{2}{\sqrt{N}} \exp[2\pi i N(-4p_2 q_0 + p_2 \mu_2 + q_0 \nu_0)] \\ &\times \frac{1}{2\pi i} \sum_{K_1 L_1} (-1)^{K_1+L_1} (-1)^{\mu_2+\nu_0} \\ &\times \left\{ \mathcal{I}[2\pi N(-2p_2 + L_1 + \frac{\nu_0}{2} + \frac{1}{2})(-2q_0 + K_1 + \frac{\mu_2}{2} + \frac{1}{2})] \right. \\ &+ \mathcal{I}[2\pi N(-2p_2 + L_1 + \frac{\nu_0}{2})(-2q_0 + K_1 + \frac{\mu_2}{2})] \\ &- \mathcal{I}[2\pi N(-2p_2 + L_1 + \frac{\nu_0}{2} + \frac{1}{2})(-2q_0 + K_1 + \frac{\mu_2}{2})] \\ &\left. - \mathcal{I}[2\pi N(-2p_2 + L_1 + \frac{\nu_0}{2})(-2q_0 + K_1 + \frac{\mu_2}{2} + \frac{1}{2})] \right\}. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Se introduzirmos agora a seguinte aproximação para as funções  $\mathcal{I}$  (ver Apêndice C),

$$\begin{aligned} \mathcal{I}[x] &\approx ix - \frac{x^2}{2}, & \text{se } |x| < \frac{\pi}{2} \\ \mathcal{I}[x] &\approx \frac{\exp[ix]}{ix} - \Gamma - \ln[|x|] + \frac{i\pi}{2}\xi[x], & \text{se } |x| \geq \frac{\pi}{2}, \end{aligned} \quad (4.29)$$

podemos então mostrar que (4.28), com o auxílio de (4.29), recupera todos os resultados obtidos na Seção anterior.

A escolha feita neste Capítulo, de se estudar o comportamento do propagador exato, escrevendo-o em termos de funções  $E_i$ , ao invés de funções  $\mathcal{I}$ , justifica-se, uma vez que em (4.7) distingüimos imediatamente a contribuição semiclássica da contribuição puramente quântica, o que não podemos fazer em (4.28). Já para  $l > 2$ , a obtenção explícita das correções quânticas, para propagadores escritos na forma (3.11), é extremamente complicada. Notamos também, que (4.24) é uma espécie de elemento fundamental das expressões gerais do propagador (3.8) e de seu traço (3.14), o que nos possibilita usar as funções  $\mathcal{I}$  como base para os cálculos do caso geral para um número  $l$  arbitrário de iteradas do mapa. É a isto que nos dedicaremos no Capítulo a seguir.

# Capítulo 5

## O Caso Geral $l$

A não comutabilidade, em geral, dos limites  $\hbar \rightarrow 0$  e  $t \rightarrow \infty$  (para um exemplo ver Apêndice A), pode impor restrições à validade da aproximação semiclássica para tempos grandes [25], sendo então um dos grandes desafios no estudo da chamada caologia quântica. Recentemente entretanto, alguns autores [26, 27] têm considerado a possibilidade de se obter bons resultados semiclássicos, mesmo para tais tempos grandes. Neste sentido, um dos maiores interesses no mapa do padeiro quântico está justamente no acompanhamento de sua dinâmica para um número arbitrário  $l$  de iteradas e a partir disto, entender e prever para quais tempos  $t^*$  a aproximação semiclássica perde a validade.

No Capítulo anterior, onde discutimos os resultados para o caso particular de  $l = 2$ , já pudemos perceber a dificuldade da análise, tanto do propagador quanto de seu traço. No entanto, por termos sido capazes de desenvolver os cálculos analiticamente, ganhamos suficiente experiência a nos possibilitar discutir e entender vários aspectos do comportamento do caso geral  $l$ , mesmo sem podermos resolver as eqs. (3.8) e (3.14) exatamente.

Este Capítulo está dividido basicamente em duas partes, a primeira trata do propagador, onde enfocamos três pontos: os critérios para truncamento do somatório de Poisson, a aproximação semiclássica com possíveis correções de borda e finalmente, o comportamento do propagador na região do espaço de fase aonde a propagação é classicamente permitida. A segunda parte considera o traço do propagador, onde ao invés de desenvolvermos uma aproximação para a expressão exata, tentamos “melhorar” o semiclássico e com isso, analisar o que acontece para tempos maiores e menores que o “log-time”.

Porém, antes de propriamente discutirmos tanto o propagador quanto o seu traço, vamos apresentar na próxima Seção, o que chamaremos de aproximação “borda-estacionária”, a qual nos será muito útil na realização das tarefas aqui mencionadas.

## 5.1 Aproximação Borda-Estacionária

De forma geral, como salientamos anteriormente, as sucessivas integrais que aparecem em (3.8) e (3.14), não podem ser resolvidas exatamente. Além disso, encontramos pontos estacionários, dentro das regiões de integração, apenas para alguns conjuntos de valores dos parâmetros  $K$ 's,  $L$ 's e  $\nu$ 's. Porém, se estivermos interessados no limite semiclássico, são justamente com estes conjuntos que devemos nos preocupar. Então aqui, para tais valores dos parâmetros, vamos apresentar um método analítico aproximado, que considere explicitamente efeitos de borda e que nos permita resolver as integrais múltiplas das expressões do propagador e de seu traço.

No método de fase estacionária usual, integrais do tipo

$$f(\lambda) = \int_{\alpha}^{\beta} dt g(t) \exp[i\lambda s(t)], \quad (5.1)$$

podem ser resolvidas aproximadamente, para grandes valores do parâmetro  $\lambda$ . Assim, se  $s(t)$  é duplamente diferenciável e existe  $\alpha < \tau < \beta$ , tal que  $s'(\tau) = 0$  (ou seja,  $s(t)$  tem ponto estacionário interno à região de integração) podemos escrever para (5.1)

$$f(\lambda) \approx \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda s''(\tau)}} \exp[i\lambda s(\tau) + \frac{i\pi}{4}]. \quad (5.2)$$

No processo de dedução da fórmula acima, em um dos passos da aproximação muda-se o intervalo de integração, extendendo-o de  $(\alpha, \beta)$  para  $(-\infty, +\infty)$  (veja detalhes na referência [28]). Desta forma, eventuais efeitos de borda são negligenciados no método de fase estacionária (é interessante observar que estes efeitos dão contribuições de ordem  $\mathcal{O}(1/\lambda)$ ).

Nossa intenção é justamente obter uma aproximação que considere apenas as contribuições dos pontos estacionários, mas de forma a levar em conta o tamanho finito do espaço de fase. Para tal, retomemos as eqs. (3.8) e (3.14), que podem ser escritas da seguinte forma

$$W = \sum G_W \int_0^{\frac{1}{2}} \prod_r dp_r \int_0^{\frac{1}{2}} \prod_k dq_k \exp[2\pi i N \sum_j \varphi_j], \quad (5.3)$$

onde  $W$  denota genericamente o propagador ou o seu traço e

$$\varphi_j = C_j p_j q_{j-1} + B_j p_j + A_{j-1} q_{j-1}, \quad (5.4)$$

com  $C_j$ ,  $B_j$  e  $A_{j-1}$  podendo depender dos parâmetros e dos outros  $p$ 's e  $q$ 's. Notamos que a eq. (5.3) é basicamente composta por termos do tipo

$$T_j = \int_0^{\frac{1}{2}} dp_j \int_0^{\frac{1}{2}} dq_{j-1} \exp[2\pi i N \varphi_j], \quad (5.5)$$

que integrado em  $dp_j dq_{j-1}$  fornece

$$T_j = g_j \exp[2\pi i N \psi_j] I_j, \quad (5.6)$$

sendo

$$I_j = \mathcal{I}[i f_j^{11}] + \mathcal{I}[i f_j^{00}] - \mathcal{I}[i f_j^{10}] - \mathcal{I}[i f_j^{01}] \quad (5.7)$$

com  $g_j$  constante e  $\psi_j$  e os  $f$ 's dependentes de  $p_{j-1}$  e  $q_j$ , bem como dos  $K$ 's,  $L$ 's e  $\nu$ 's.

Para o próximo passo no cálculo, teríamos que resolver

$$T_{j+1} = \int_0^{\frac{1}{2}} dp_{j+1} \int_0^{\frac{1}{2}} dq_j \exp[2\pi i N (\varphi_{j+1} + \psi_j)] I_j(p_{j-1}, q_j) \quad (5.8)$$

e assim por diante; sendo que tais sucessivas etapas de integração, até onde sabemos, não podem ser resolvidas exatamente.

Consideremos agora  $p_{j-1}^{(est.)}$  e  $q_j^{(est.)}$ , determinados através de

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial(\varphi_{j+1} + \psi_j)}{\partial p_{j-1}} \right|_{q_j^{(est.)}} &= 0 \\ \left. \frac{\partial(\varphi_{j+1} + \psi_j)}{\partial q_j} \right|_{p_{j-1}^{(est.)}} &= 0. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Se os parâmetros  $K$ 's,  $L$ 's e  $\nu$ 's forem tais que tenhamos  $0 \leq p_{j-1}^{(est.)}, q_j^{(est.)} \leq 1/2$  e se  $N$  for um número grande, então a maior contribuição à (5.8), vem da integração sobre a região hachurada ao longo das linhas  $p_{j-1} = p_{j-1}^{(est.)}$  e  $q_j = q_j^{(est.)}$ , mostrada na Figura 5.1. Na região hachurada podemos então aproximar

$$I_j(p_{j-1}, q_j) \approx I_j^{(est.)} = I_j(p_{j-1}^{(est.)}, q_j^{(est.)}). \quad (5.10)$$

Entretanto, devido a pouca contribuição da região não-hachurada à integral, não introduzimos um erro muito significativo se também extendemos (5.10) a todo o quadrado da Figura 5.1. Assim

$$T_{j+1} \approx I_j^{(est.)} \int_0^{\frac{1}{2}} dp_{j+1} \int_0^{\frac{1}{2}} dq_j \exp[2\pi i N (\varphi_{j+1} + \psi_j)], \quad (5.11)$$

ou

$$T_{j+1} \approx g_{j+1} \exp[2\pi i N \psi_{j+1}] I_j^{(est.)} I_{j+1}. \quad (5.12)$$

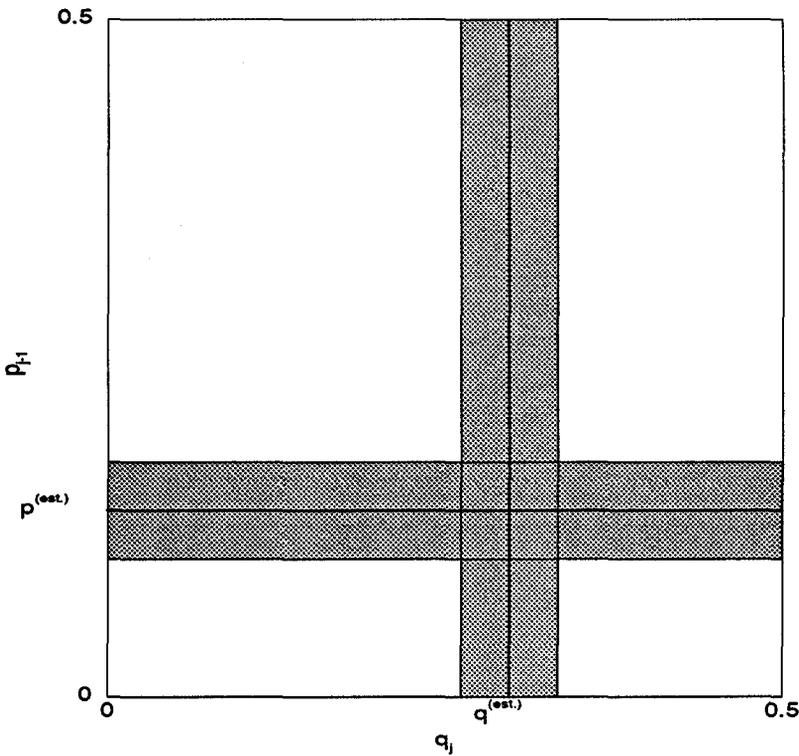


Figura 5.1: ‘Espaço de variáveis’ de  $I_j$  na eq. (5.8). A maior contribuição à integral vem da região hachurada ao longo das linhas  $p^{(est.)}$  e  $q^{(est.)}$ .

Podemos agora aplicar sucessivamente estes procedimentos, chegando a uma expressão final para  $W$ , dada por alguma coisa do tipo

$$W \approx \sum_{(est.)} G_W^{(est.)} \exp[2\pi i N \psi^{(est.)}] \prod_k I_k^{(est.)}, \quad (5.13)$$

onde  $\sum_{(est.)}$  indica que só estamos somando sobre os parâmetros que permitem termos pontos estacionários para as sucessivas fases que aparecem nas integrais. Como veremos mais adiante, estes valores dos parâmetros coincidem exatamente com os valores dos parâmetros da aproximação semiclássica usual. Neste caso, para o propagador, o método só é aplicável nas regiões onde a aproximação semiclássica também o seja.

Chamamos a eq. (5.13) de aproximação borda-estacionária pois, embora os cálculos tenham sido feitos considerando-se apenas os pontos estacionários, também contém informação sobre o tamanho limitado do espaço de fase via o comportamento dos  $I$ 's (através das funções  $\mathcal{I}$ ).

## 5.2 O Propagador

### 5.2.1 Truncamento da Soma de Poisson

Aqui, vamos discutir o truncamento do somatório de Poisson, para o caso geral  $l$ . Faremos isto através da analogia com o que foi feito para  $l = 2$ , onde “procuramos” as maiores contribuições (m.c.), e a partir delas definimos um corte=m.c..

Ficará evidente logo a seguir, que com o aumento de  $l$ , se torna cada vez mais trabalhoso encontrar os parâmetros que fornecem as m.c.. Assim, é mais conveniente tratarmos dois casos específicos,  $l = 3$  e  $l = 4$ , e a partir deles discutir o procedimento geral. Salientamos também, que a construção de corte=m.c. se justifica, uma vez que isto reduz drasticamente o número de termos a serem somados; por exemplo, se tomássemos simplesmente corte=1, teríamos que calcular, já considerando a soma sobre as órbitas simbólicas  $\sum_{\nu}$ , 162 termos na soma de Poisson para o caso  $l = 3$  e 2916 termos para o caso  $l = 4$ !

Para  $l = 3$ , a eq. (3.8) fornece

$$\begin{aligned} \langle m_3, \mu_3 | U^3 | n_0, \nu_0 \rangle &= (2N)^{\frac{3}{2}} (-1)^{\mu_3 + \nu_0} \sum_{\nu_1=0}^1 (i)^{N\nu_1(\nu_0 + \mu_3)} \sum_{K_2 K_1 L_2 L_1} (-1)^{K_2 + K_1 + L_2 + L_1} \\ &\quad \times W_3, \end{aligned} \quad (5.14)$$

onde

$$\begin{aligned} W_3 &= \int_0^{\frac{1}{2}} dp_2 dp_1 dq_2 dq_1 \exp \left\{ 2\pi i N \left[ p_2 q_2 + p_1 q_1 - 2p_2 q_1 + p_2 \left( K_2 + \frac{\mu_3}{2} \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + p_1 \left( -2q_0 + K_1 + \frac{\nu_1}{2} \right) + q_2 \left( -2p_3 + L_2 + \frac{\nu_1}{2} \right) + q_1 \left( L_1 + \frac{\nu_0}{2} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (5.15)$$

Da integração em  $p_2 q_1$ , temos

$$W_3 = -\frac{1}{4\pi i N} \int_0^{\frac{1}{2}} dp_1 dq_2 \exp[2\pi i N \psi_3(p_1, q_2)] I(p_1, q_2), \quad (5.16)$$

sendo

$$\psi_3(p_1, q_2) = p_1 \left( -2q_0 + K_1 + \frac{\nu_1}{2} \right) + q_2 \left( -2p_3 + L_2 + \frac{\nu_1}{2} \right) + \frac{1}{2} \left( p_1 + L_1 + \frac{\nu_0}{2} \right) \left( q_2 + K_2 + \frac{\mu_3}{2} \right) \quad (5.17)$$

e

$$I(p_1, q_2) = \sum_{b, a=0}^1 (-1)^{b+a} \mathcal{I} \left[ -\pi N \left( p_1 + L_1 + \frac{\nu_0}{2} - b \right) \left( q_2 + K_2 + \frac{\mu_3}{2} - a \right) \right]. \quad (5.18)$$

Lembramos que para o caso  $l = 2$ , as maiores contribuições vêm dos parâmetros que tornam pequenos os módulos dos argumentos das funções  $Ei$  na eq. (4.17) (ou

equivalentemente, das funções  $\mathcal{I}$  na eq. (4.28)). Observando a eq. (3.8), vemos que em suas sucessivas integrações, vão sendo originadas funções  $\mathcal{I}$  multiplicadas por exponenciais complexas. Desta forma, seguindo a mesma argumentação dada no final do Capítulo anterior, os valores dos parâmetros das m.c., para o caso geral, são justamente os que tornam pequenos os argumentos destas sucessivas funções  $\mathcal{I}$ .

Com isto em mente, consideremos agora a eq. (5.18), onde os argumentos das funções  $\mathcal{I}$  podem ser escritos como  $-\pi N \phi_{p_1} \phi_{q_2}$ , sendo

$$\begin{aligned}\phi_{p_1} &= p_1 + L_1 + \frac{\nu_0}{2} - b \\ \phi_{q_2} &= q_2 + K_2 + \frac{\mu_3}{2} - a.\end{aligned}\tag{5.19}$$

Aqui, tanto  $p_1$  quanto  $q_2$  (que são variáveis de integração) variam de 0 a  $1/2$ . Portanto, nossos parâmetros devem ser tais, que  $\phi_{p_1}$  e  $\phi_{q_2}$  se tornem pequenos em torno de algum par  $\tilde{p}_1 \tilde{q}_2$ , pertencente a estes intervalos. Uma rápida análise de (5.19), mostra que isto é obtido se,  $L_1 = -\nu_0$  ou  $1 - \nu_0$  com  $\tilde{p}_1 = \nu_0/2$  e  $K_2 = -\mu_3$  ou  $1 - \mu_3$  com  $\tilde{q}_2 = \mu_3/2$ .

Resta-nos agora, determinar  $K_1$  e  $L_2$ . Consideremos então a eq. (5.16), onde encontramos uma exponencial oscilante de argumento  $\psi_3(p_1, q_2, K, L, \nu)$ . Para cada conjunto de valores dos  $K$ 's,  $L$ 's e  $\nu$ 's, temos um  $\psi_3$  diferente. Certamente que de todas estas fases possíveis, as que darão maior contribuição à integral (5.16), serão justamente aquelas cujas derivadas,  $\partial\psi_3/\partial p_1$  e  $\partial\psi_3/\partial q_2$ , estejam o mais próximo possível de zero, sendo portanto, algo "parecido" a um ponto estacionário. Queremos então

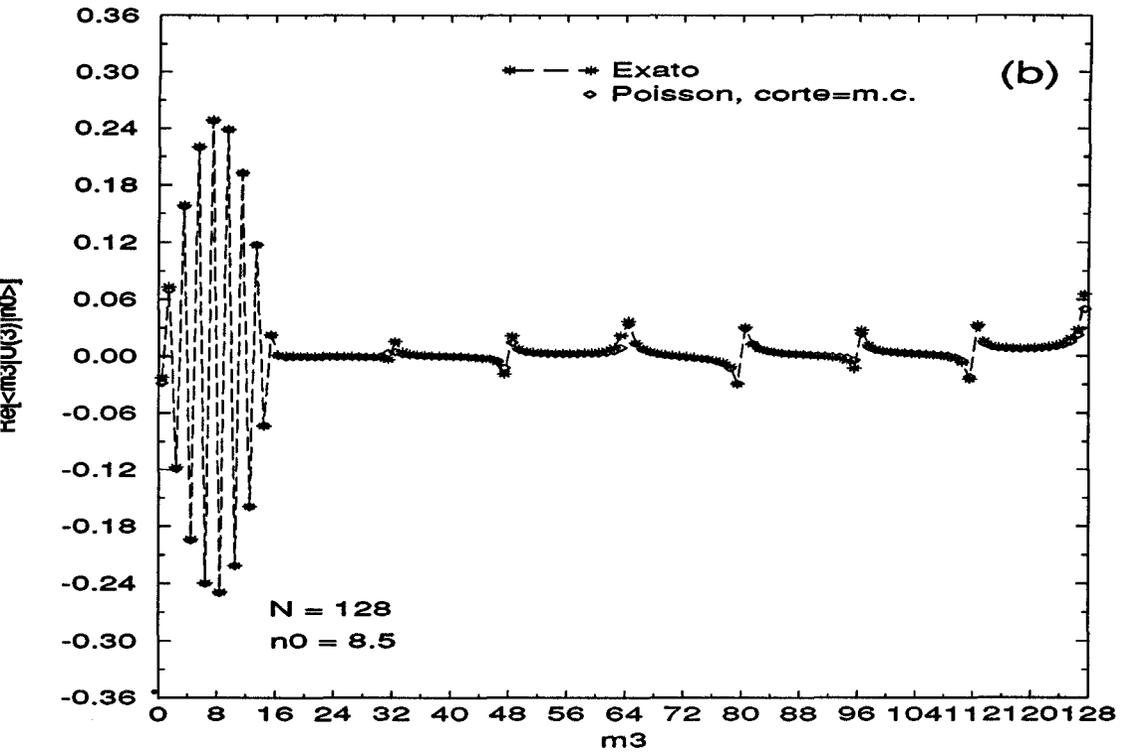
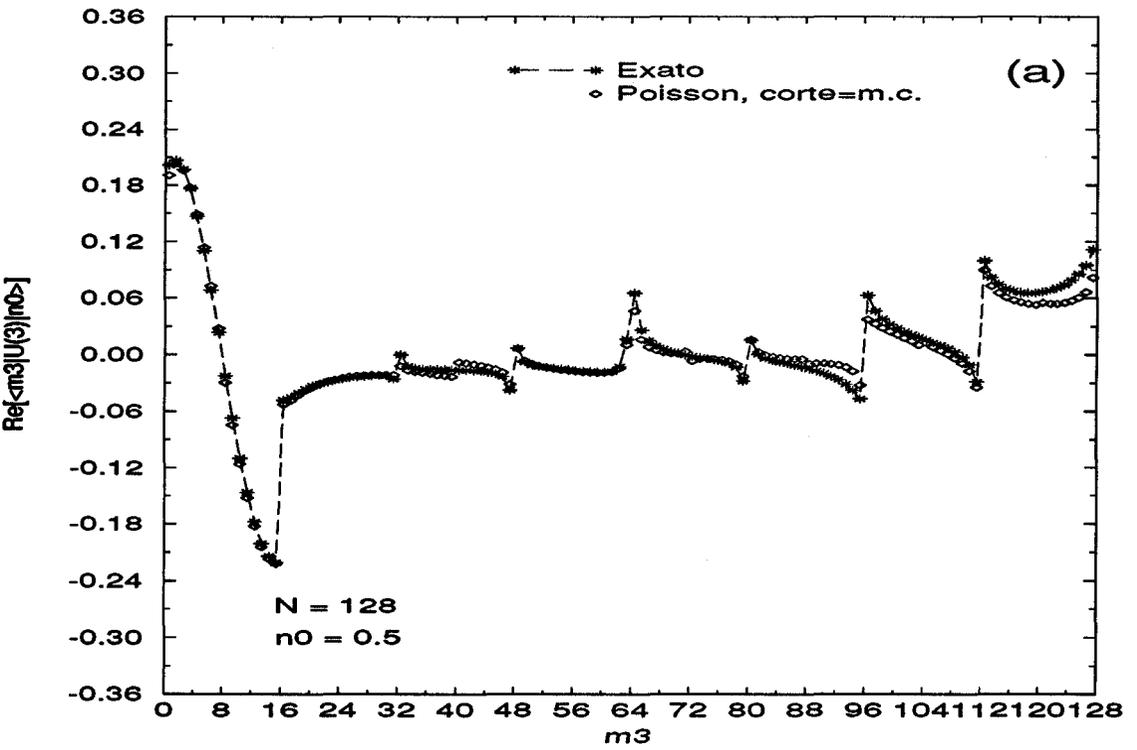
$$\begin{aligned}\frac{\partial\psi_3(p_1, \bar{q}_2)}{\partial p_1} &\approx 0 \\ \frac{\partial\psi_3(\bar{p}_1, q_2)}{\partial q_2} &\approx 0,\end{aligned}\tag{5.20}$$

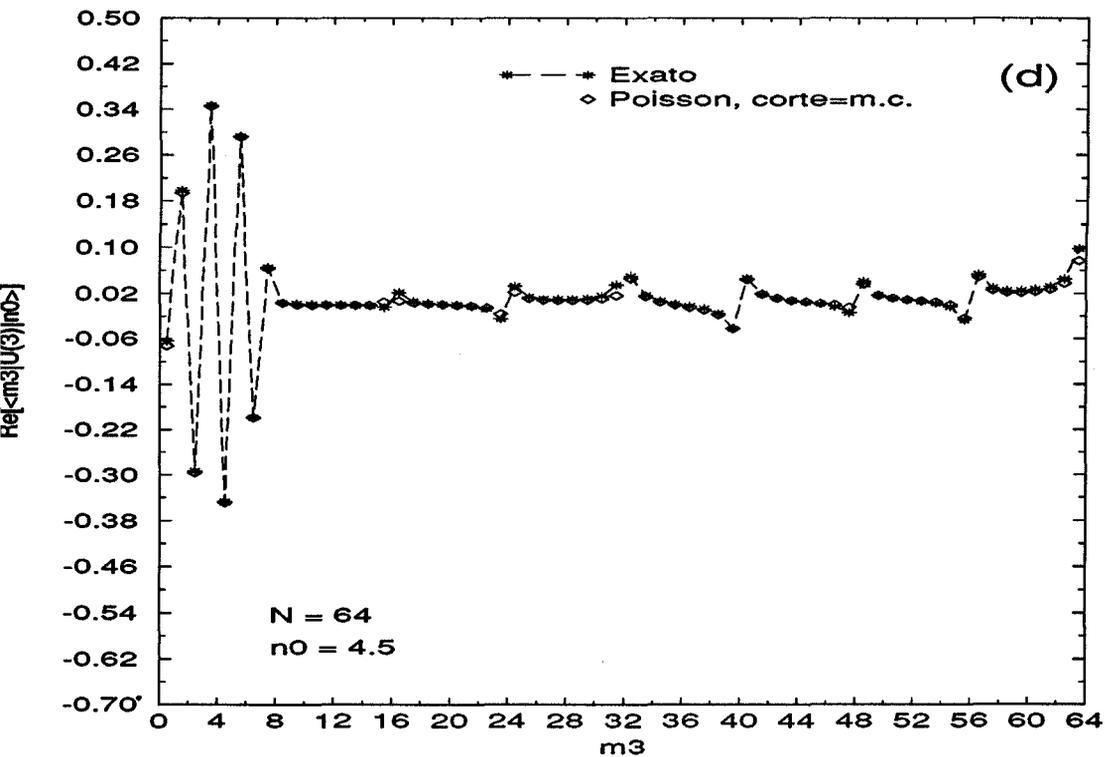
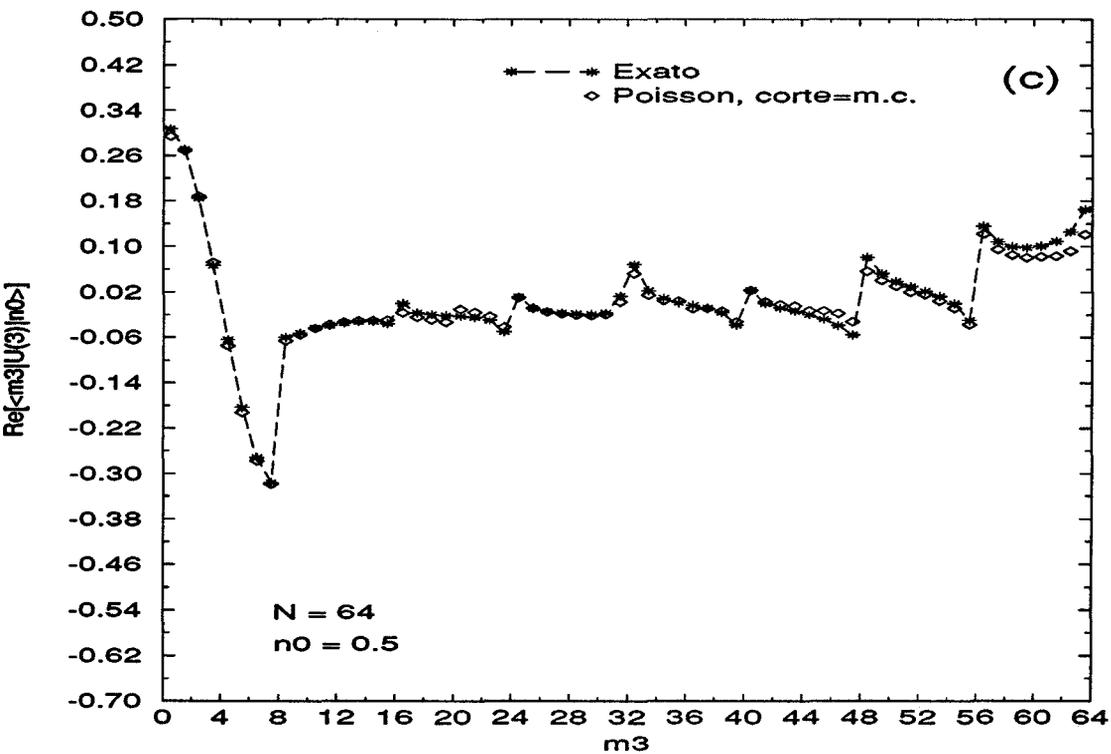
com  $\bar{p}_1$  e  $\bar{q}_2$  compreendidos no intervalo  $[0, 1/2]$ . Em (5.20), já devemos supor que os valores de  $K_2$  e  $L_1$  sejam os deduzidos anteriormente. Além disso, para garantir a consistência na escolha de todos os parâmetros, devemos exigir que  $\tilde{p}_1 = \bar{p}_1$  e  $\tilde{q}_2 = \bar{q}_2$ . Observando-se esta imposições, é fácil verificar de (5.20) que, para  $\nu_0 = 0$  e  $q_0$  pequeno,  $K_1 = -\nu_1$ , e  $L_2 = -\mu_3$  ou  $1 - \mu_3$  se  $0 < 2p_3 - \mu_3 < 1/2$  e  $L_2 = \mu_3$  ou  $1 + \mu_3$  se  $1/2 < 2p_3 - \mu_3 < 1$ .

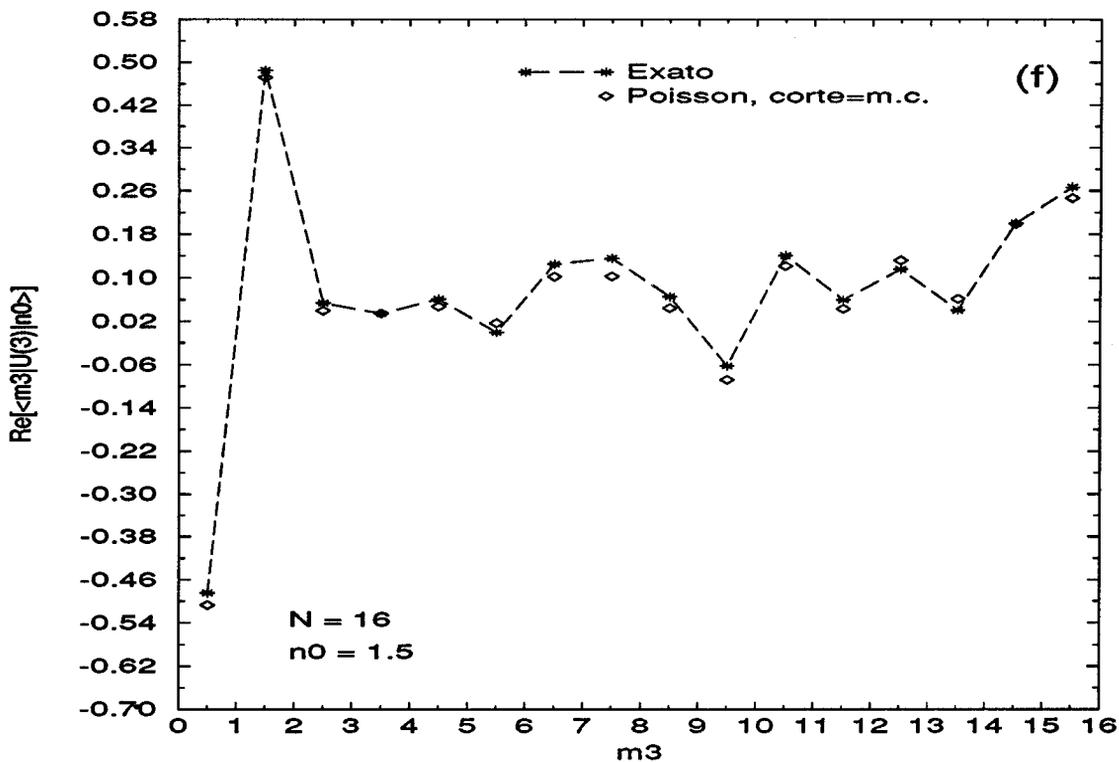
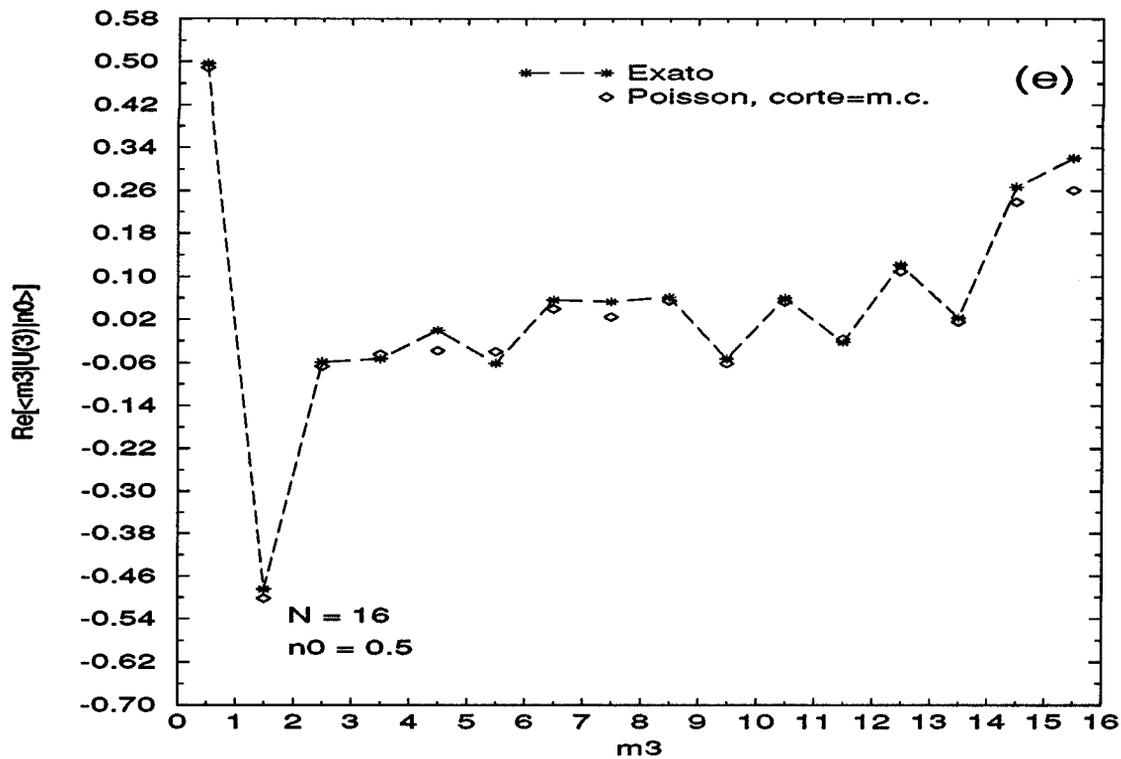
Os resultados numéricos do truncamento, para estes valores dos parâmetros, se mostram muito bons se  $p_3 < 1/2$ , mas para  $p_3 > 1/2$ , obtemos bons resultados apenas se variamos  $L_1$  de  $-1$  a  $0$ , ao invés de  $0$  a  $1$ . Isto nos sugere que  $L_1$  deva assumir os valores  $-\mu_3$  e  $1 - \mu_3$  e não  $-\nu_0$  e  $1 - \nu_0$ , avaliados em nossa dedução das m.c..

Finalmente, para  $l = 3$ , corte=m.c. (com  $q_0$  pequeno) significa somar sobre  $\nu_1 = 0, 1$ ; fazer  $K_1 = -\nu_1$ ; somar sobre  $K_2$  e  $L_1 = -\mu_3, 1 - \mu_3$ ; e somar sobre

$L_2 = -\mu_3, 1 - \mu_3$  se  $0 < 2p_3 - \mu_3 < 1/2$  e  $L_2 = \mu_3, 1 + \mu_3$  se  $1/2 < 2p_3 - \mu_3 < 1$ . Desta forma, para cada ponto do propagador, devemos calcular 16 termos para corte=m.c., um número bem menor que os 162 termos necessários para corte=1. Nas Figuras 5.2 e 5.3 mostramos, respectivamente, a parte real e imaginária do propagador exato, comparado ao truncado com corte=m.c., para vários valores de  $N$  e  $n_0$ . Na obtenção dos gráficos de corte=m.c., integramos a eq. (5.14) analiticamente nas variáveis  $p_1$ ,  $q_1$  e  $q_2$  e numericamente na variável  $p_2$  (neste cálculo numérico, usamos, para as funções  $\mathcal{I}$ , a aproximação (4.29)).







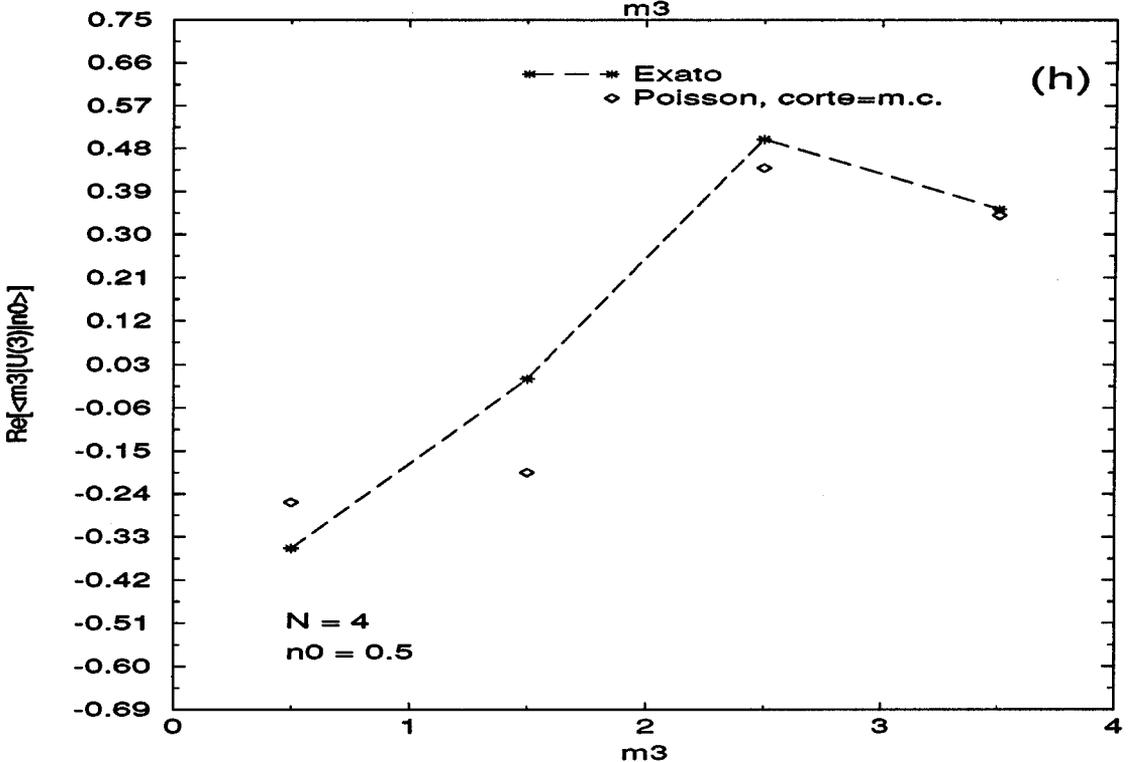
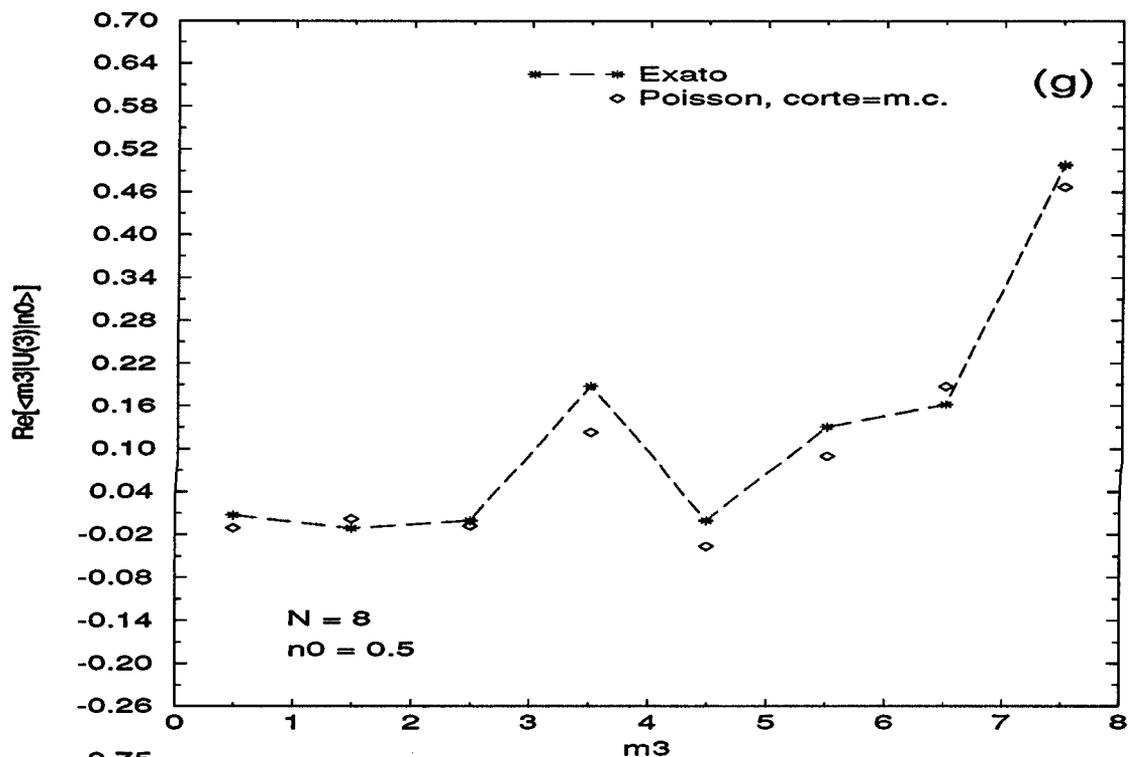
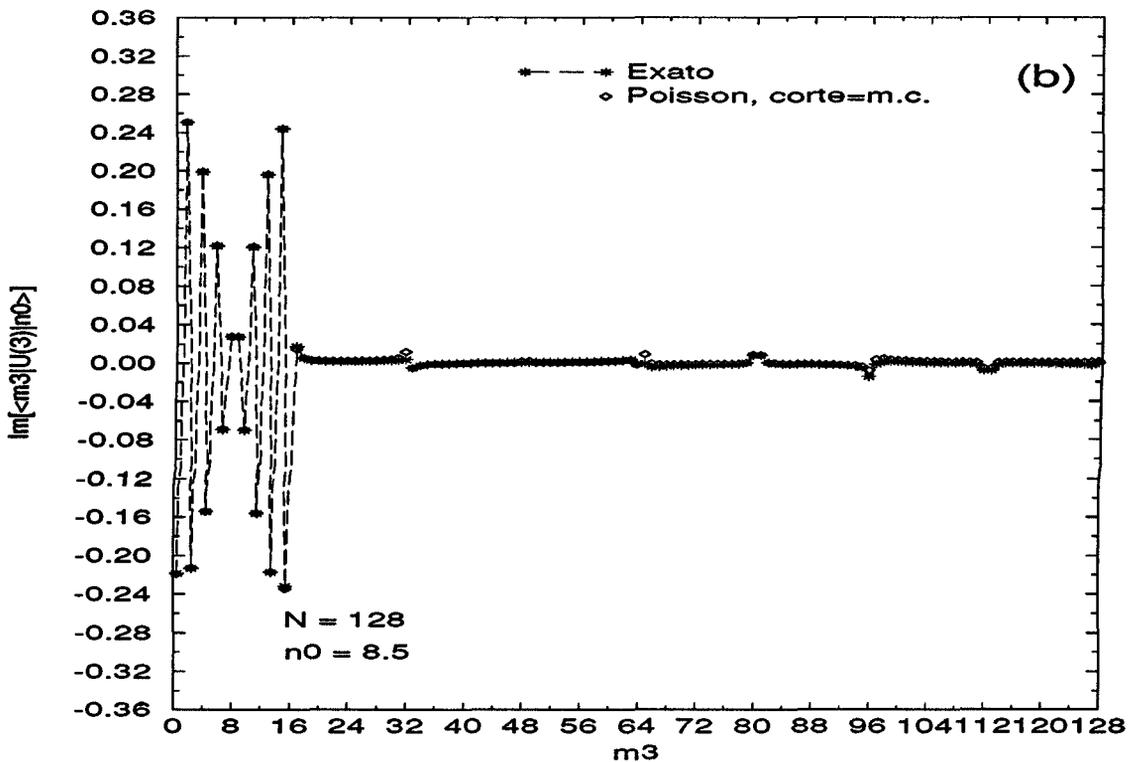
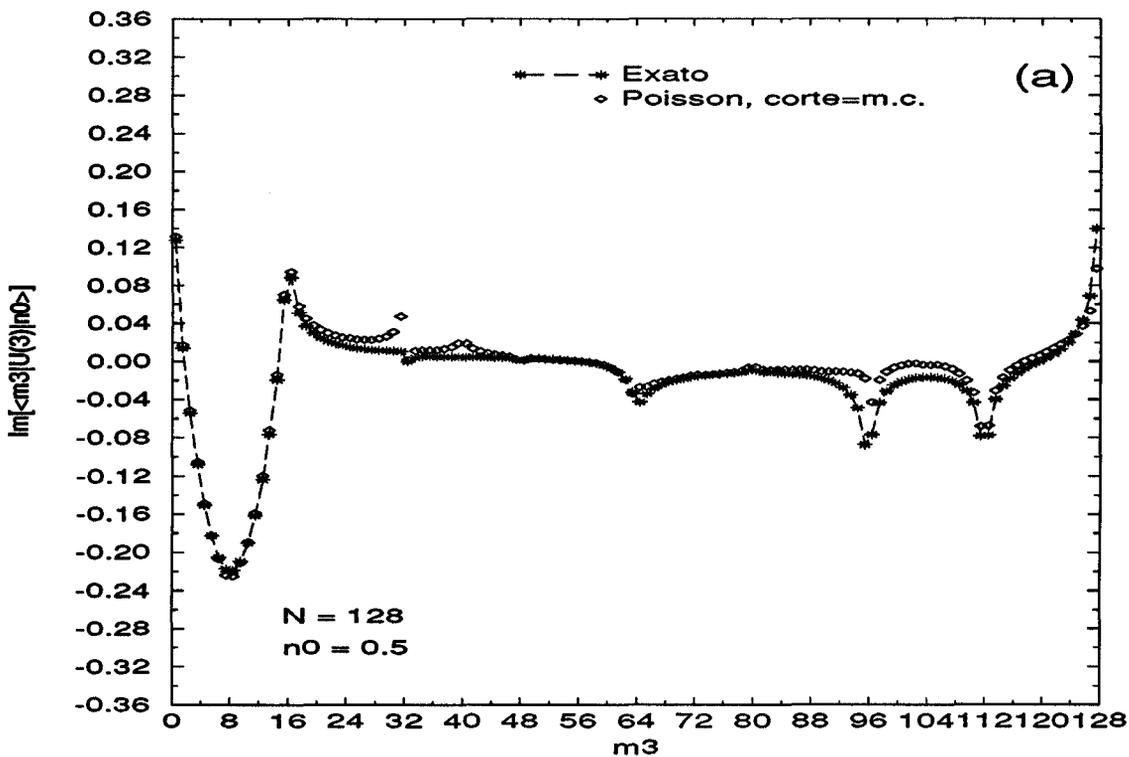
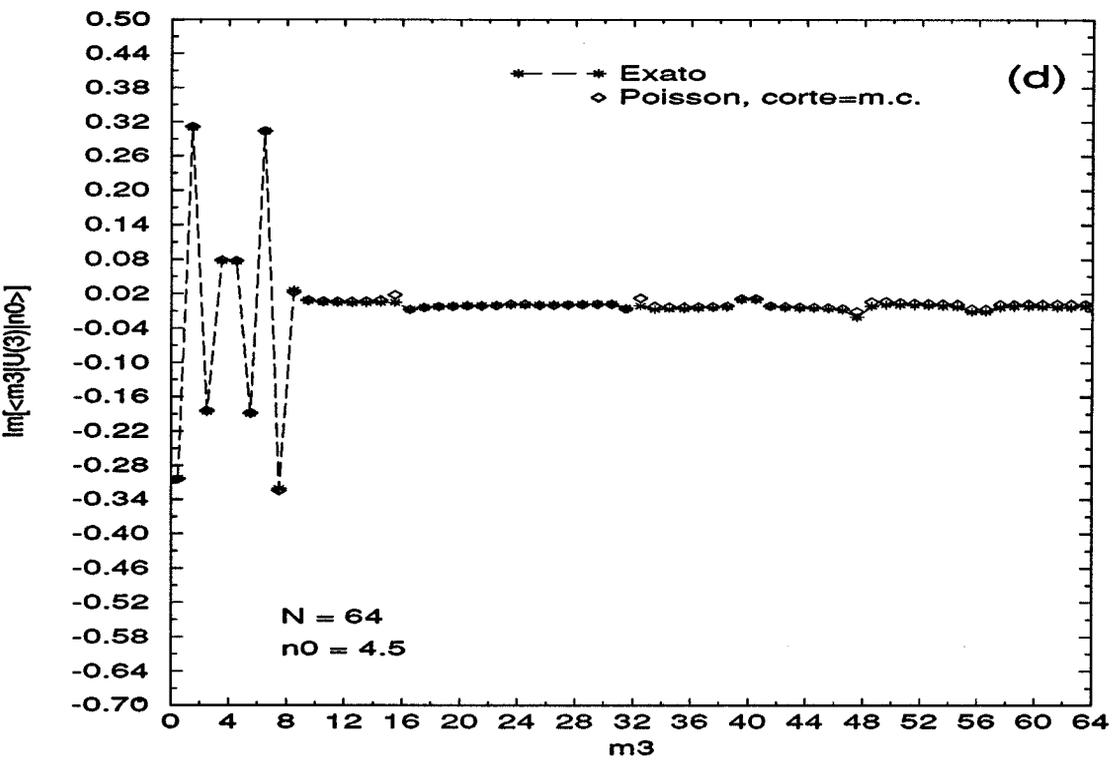
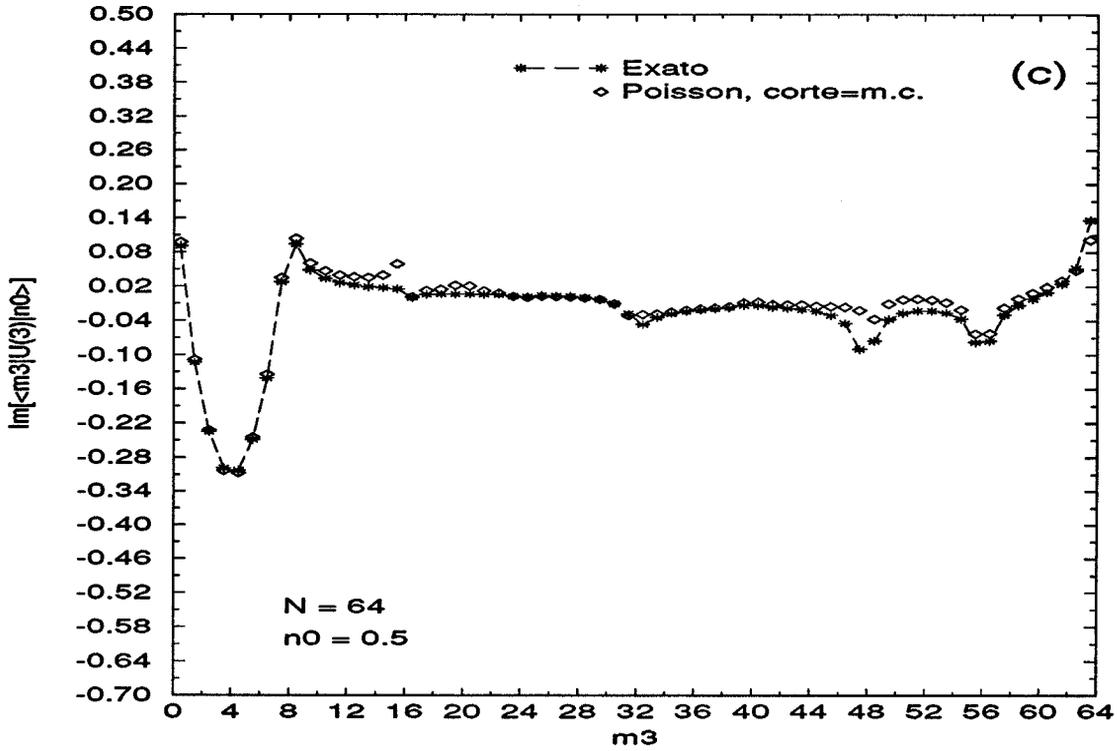
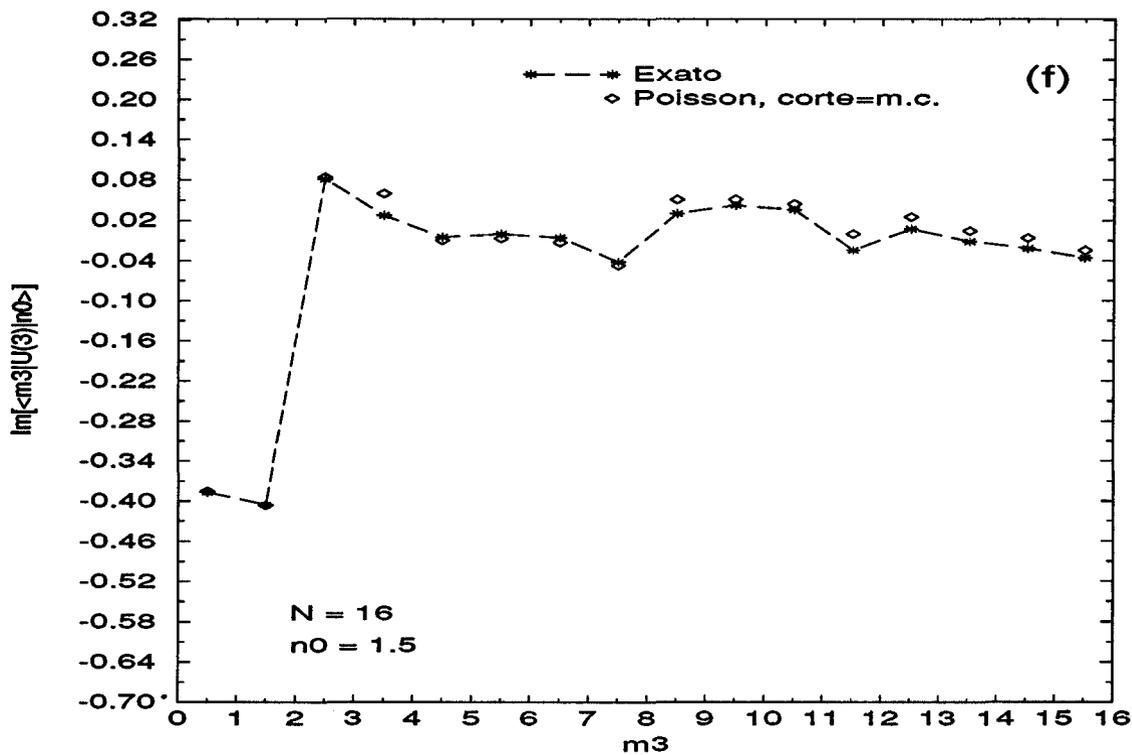
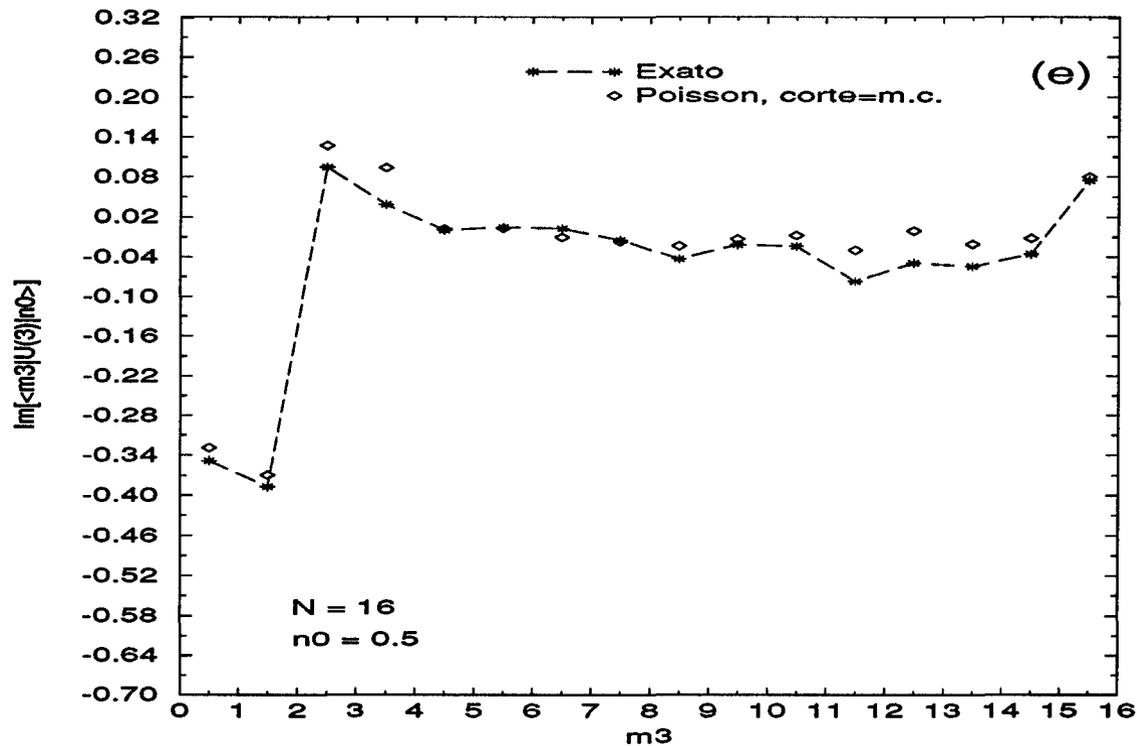


Figura 5.2: Comparação entre a parte real do propagador exato ( $l = 3$ ) e a soma de Poisson com corte=m.c., considerando-se vários valores de  $N$  e  $n_0$ .







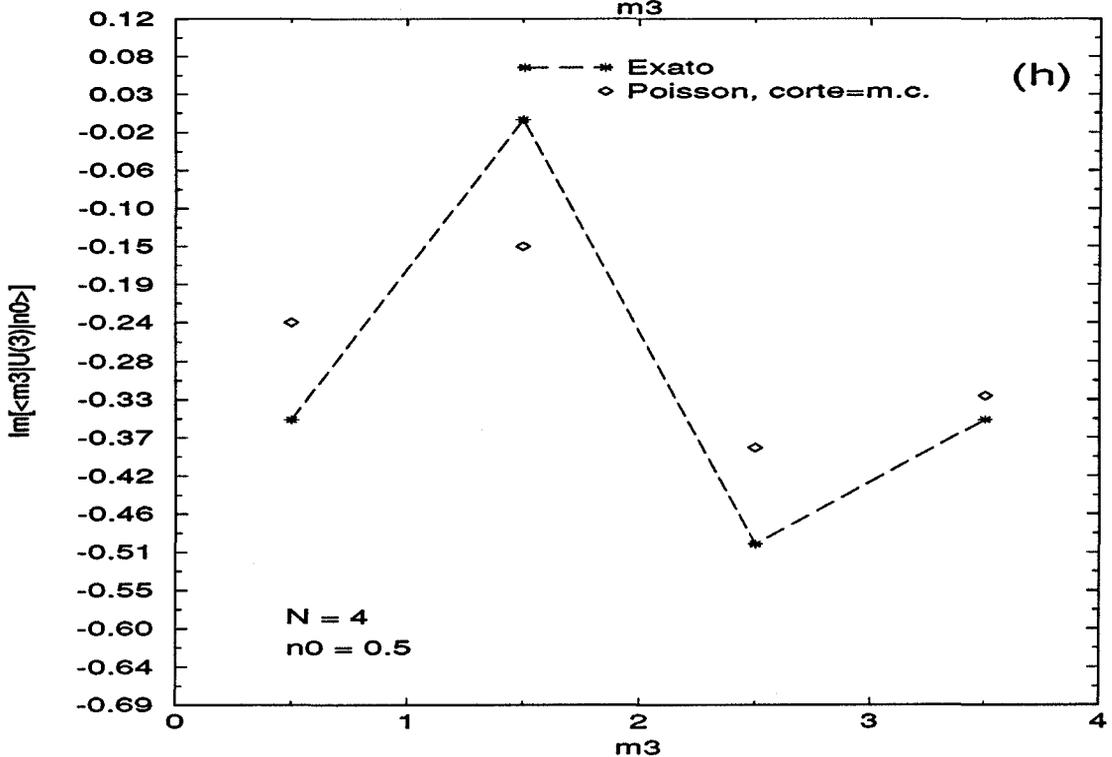
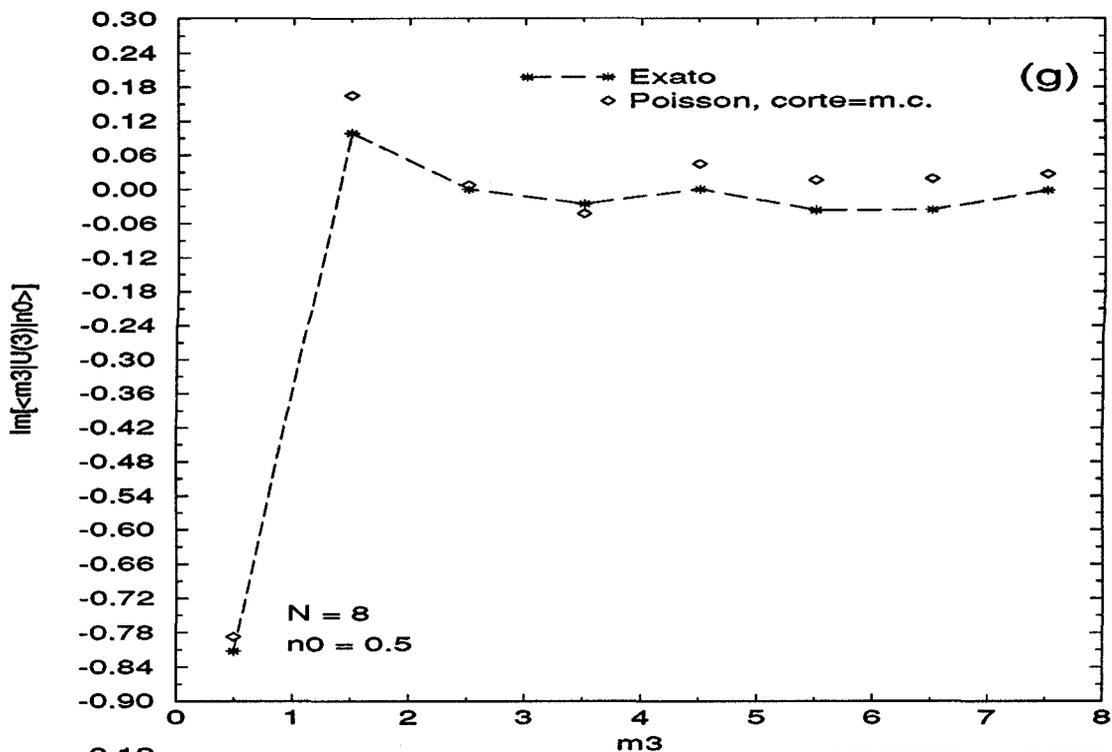


Figura 5.3: As mesmas comparações da Figura 5.2 para a parte imaginária do propagador.

Agora, passemos para o caso de quatro iterações. Da eq. (3.8), sendo  $l = 4$ , temos

$$\begin{aligned} \langle m_4, \mu_4 | U^4 | n_0, \nu_0 \rangle &= (2N)^2 \sqrt{N} (-1)^{\mu_4 + \nu_0} \sum_{\nu_2, \nu_1=0}^1 (i)^{N(\nu_0 \nu_1 + \nu_1 \nu_2 + \nu_2 \mu_4)} \sum_{K_3 K_2 K_1 L_3 L_2 L_1} \\ &\times (-1)^{K_3 + K_2 + K_1 + L_3 + L_2 + L_1} W_4, \end{aligned} \quad (5.21)$$

com

$$\begin{aligned} W_4 &= \int_0^{\frac{1}{2}} dp_3 dp_2 dp_1 dq_3 dq_2 dq_1 \exp \left\{ 2\pi i N \left[ p_3 q_3 + p_2 q_2 + p_1 q_1 - 2p_3 q_2 - 2p_2 q_1 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + p_3 \left( K_3 + \frac{\mu_4}{2} \right) + p_2 \left( K_2 + \frac{\nu_2}{2} \right) + p_1 \left( -2q_0 + K_1 + \frac{\nu_1}{2} \right) \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + q_3 \left( -2p_4 + L_3 + \frac{\nu_2}{2} \right) + q_2 \left( L_2 + \frac{\nu_1}{2} \right) + q_1 \left( L_1 + \frac{\nu_0}{2} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (5.22)$$

Integrando  $W_4$  em  $p_2 q_1$  e  $p_3 q_3$ , chegamos a

$$W_4 = \frac{1}{8\pi^2 N^2} \int_0^{\frac{1}{2}} dp_1 dq_2 \exp[2\pi i N \psi_4(p_1, q_2)] I_{(1)}(p_1, q_2) I_{(2)}(q_2), \quad (5.23)$$

onde

$$\begin{aligned} \psi_4(p_1, q_2) &= p_1 \left( -2q_0 + K_1 + \frac{\nu_1}{2} \right) + q_2 \left( L_2 + \frac{\nu_1}{2} \right) + \frac{1}{2} (p_1 + L_1 + \frac{\nu_0}{2}) (q_2 + K_2 + \frac{\nu_2}{2}) \\ &\quad - \left( -2p_4 + L_3 + \frac{\nu_2}{2} \right) \left( -2q_2 + K_3 + \frac{\mu_4}{2} \right), \end{aligned} \quad (5.24)$$

$$I_{(1)}(p_1, q_2) = \sum_{b,a=0}^1 (-1)^{b+a} \mathcal{I} \left[ -\pi N \left( p_1 + L_1 + \frac{\nu_0}{2} - b \right) \left( q_2 + K_2 + \frac{\nu_2}{2} - a \right) \right] \quad (5.25)$$

e

$$I_{(2)}(q_2) = \sum_{d,c=0}^1 (-1)^{d+c} \mathcal{I} \left[ 2\pi N \left( -2q_2 + K_3 + \frac{\mu_4}{2} + \frac{d}{2} \right) \left( -2p_4 + L_3 + \frac{\nu_2}{2} + \frac{c}{2} \right) \right]. \quad (5.26)$$

Procedemos agora, de forma similar ao feito para o caso  $l = 3$ . Os argumentos das funções  $\mathcal{I}$  em (5.25) e (5.26) podem ser escritos, respectivamente, como  $-\pi N \phi_{p_1}^{(1)} \phi_{q_2}^{(1)}$  e  $2\pi N \phi_{q_2}^{(2)} \phi_{p_4}^{(2)}$  com

$$\begin{aligned} \phi_{p_1}^{(1)} &= p_1 + L_1 + \frac{\nu_0}{2} - b \\ \phi_{q_2}^{(1)} &= q_2 + K_2 + \frac{\nu_2}{2} - a \end{aligned} \quad (5.27)$$

e

$$\begin{aligned} \phi_{q_2}^{(2)} &= -2q_2 + K_3 + \frac{\mu_4}{2} + \frac{d}{2} \\ \phi_{p_4}^{(2)} &= -2p_4 + L_3 + \frac{\nu_2}{2} + \frac{c}{2}, \end{aligned} \quad (5.28)$$

com as variáveis de integração,  $p_1$  e  $q_2$ , variando de 0 a  $1/2$ . Novamente, procuramos os valores para os parâmetros, que tornem pequenos os  $\phi$ 's. Assim, encontramos;  $K_3 = -\mu_4$  ou  $1 - \mu_4$  para  $\tilde{q}_2$  sendo 0 ou  $1/2$ ;  $K_2 = -\nu_2$  ou  $1 - \nu_2$  para  $\tilde{q}_2 = \nu_2/2$ ;  $L_3 = \mu_4 - 1$  ou  $\mu_4$  se  $0 < 2p_4 - \mu_4 < 1/2$  e  $L_3 = \mu_4$  ou  $\mu_4 + 1$  se  $1/2 < 2p_4 - \mu_4 < 1$ ; e  $L_1 = -\nu_0$  ou  $1 - \nu_0$  para  $\tilde{p}_1 = \nu_0/2$ .

$K_1$  e  $L_2$  são determinados, ao impormos

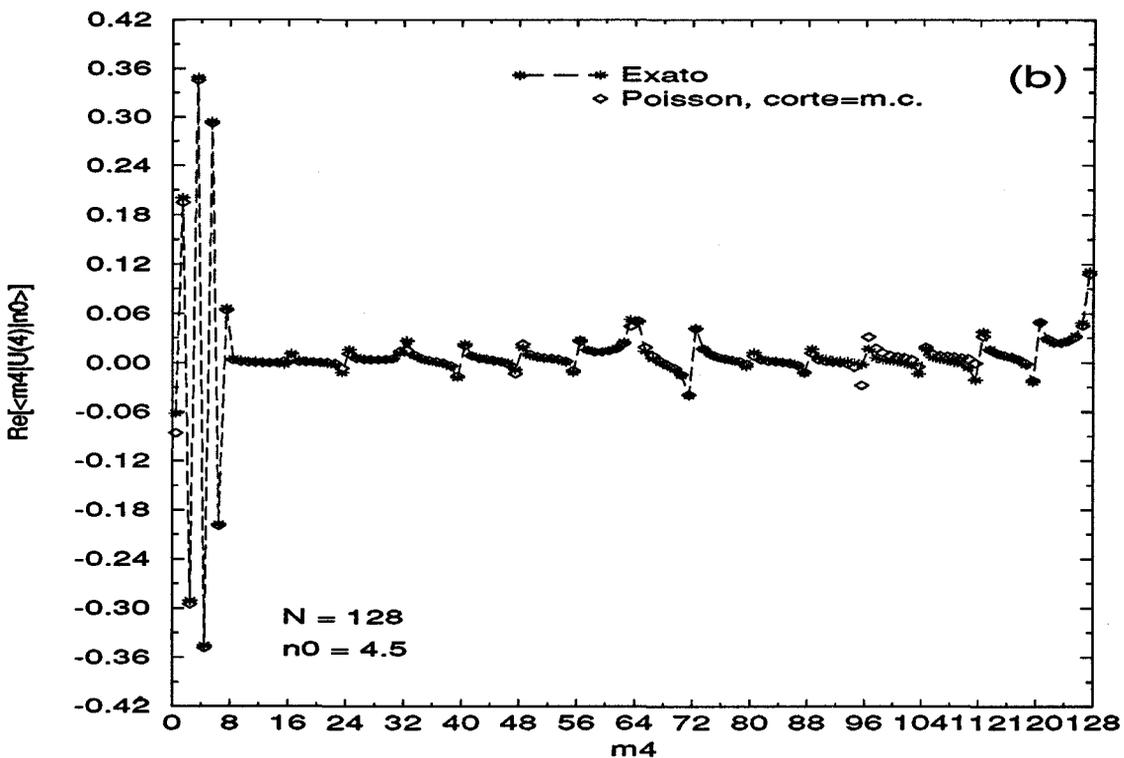
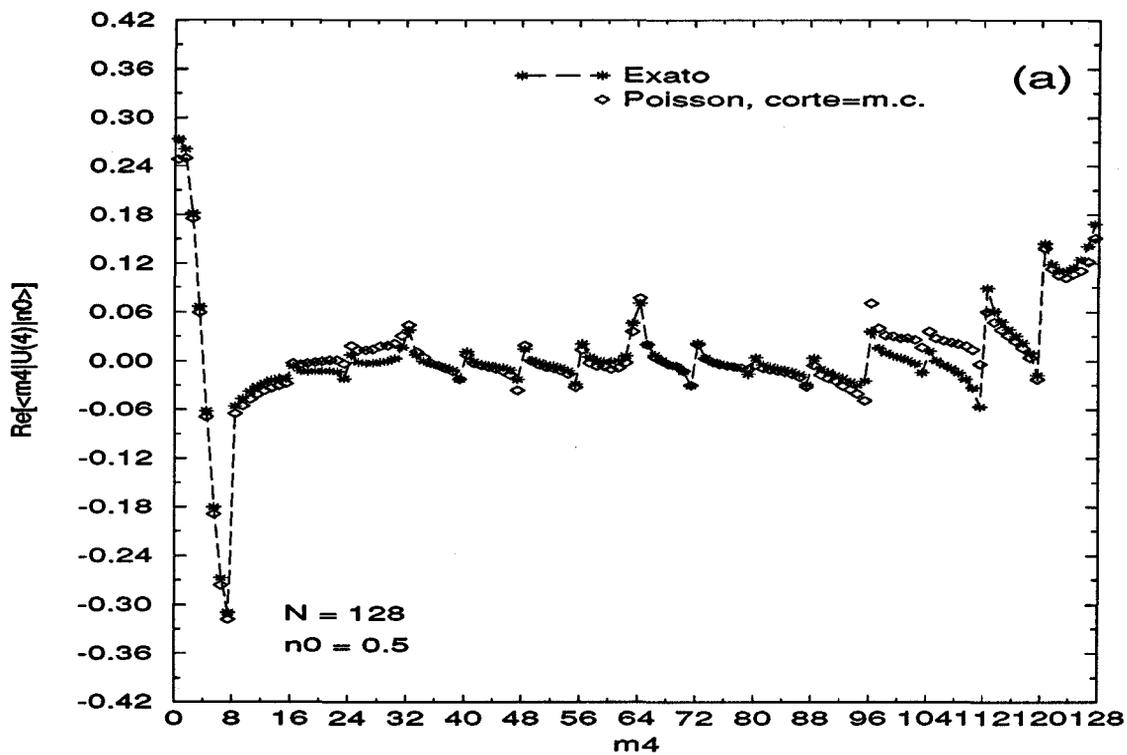
$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi_4(p_1, \bar{q}_2)}{\partial p_1} &\approx 0 \\ \frac{\partial \psi_4(\bar{p}_1, q_2)}{\partial q_2} &\approx 0, \end{aligned} \quad (5.29)$$

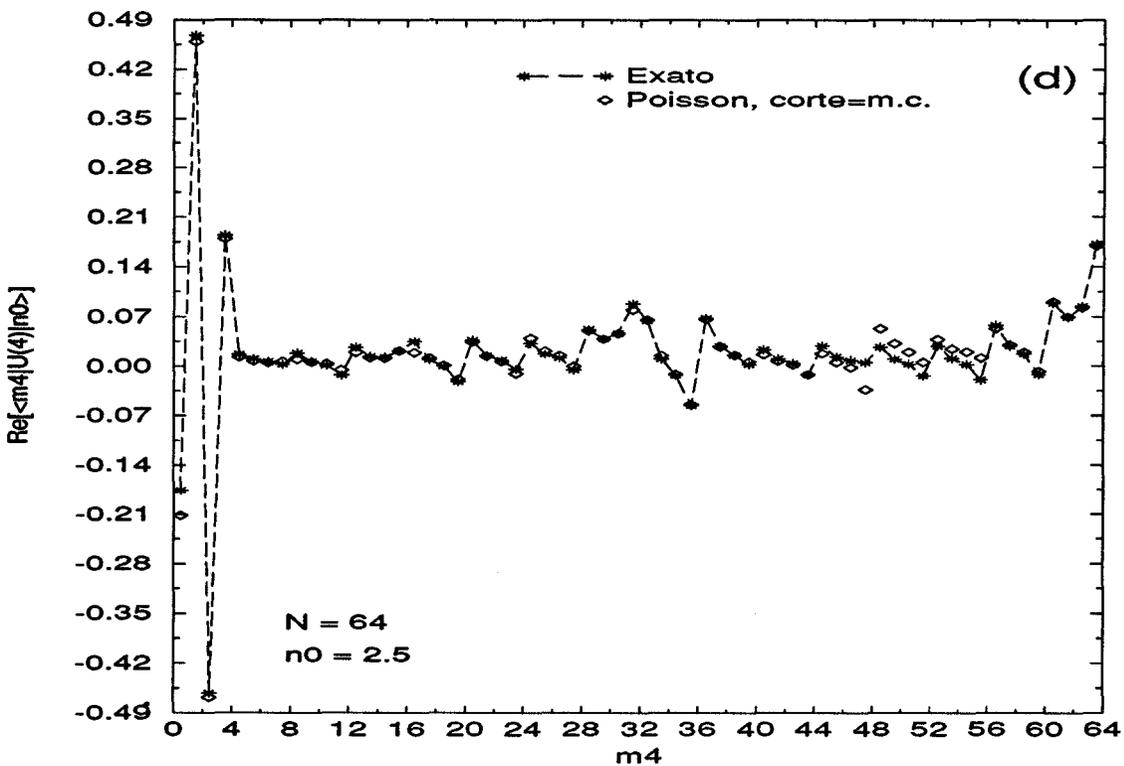
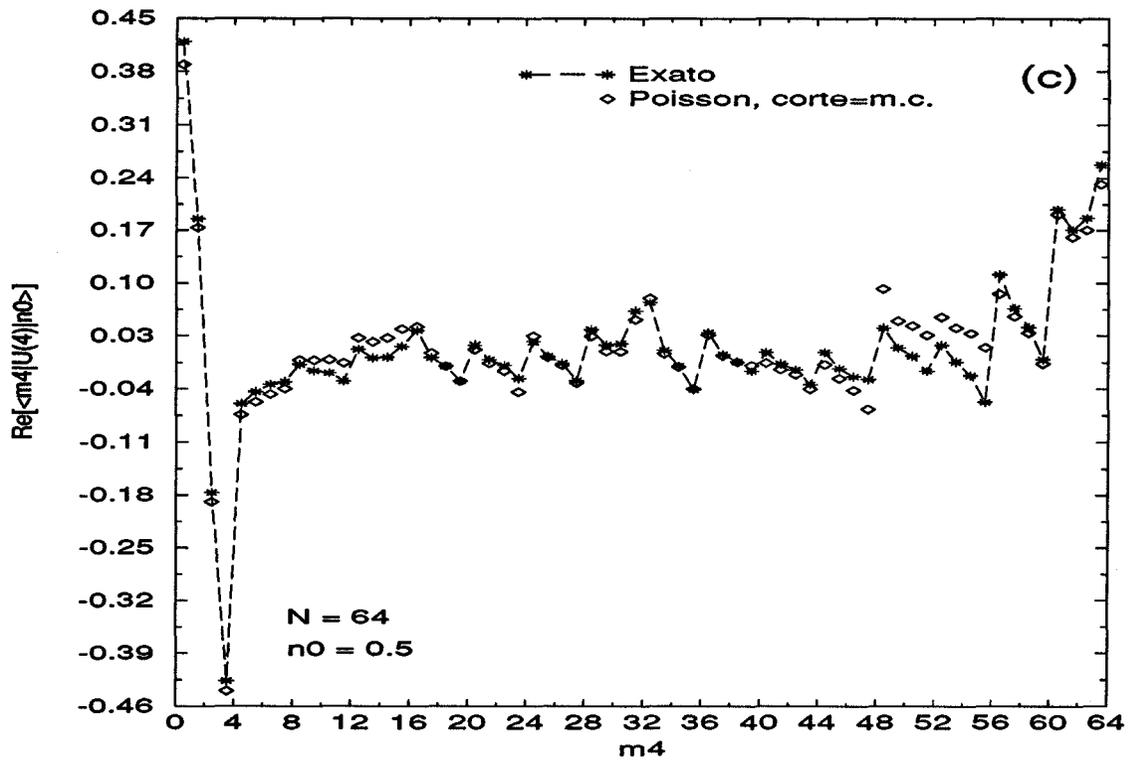
ou ainda (considerando  $q_0 \approx 0$ )

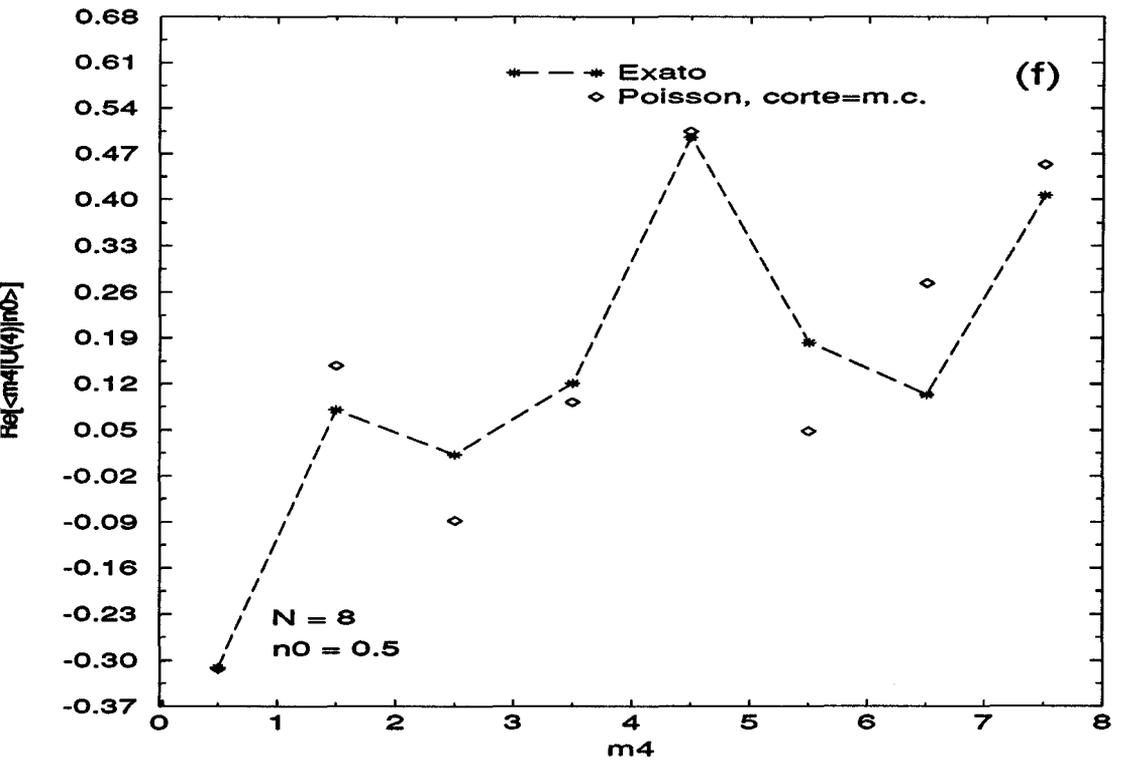
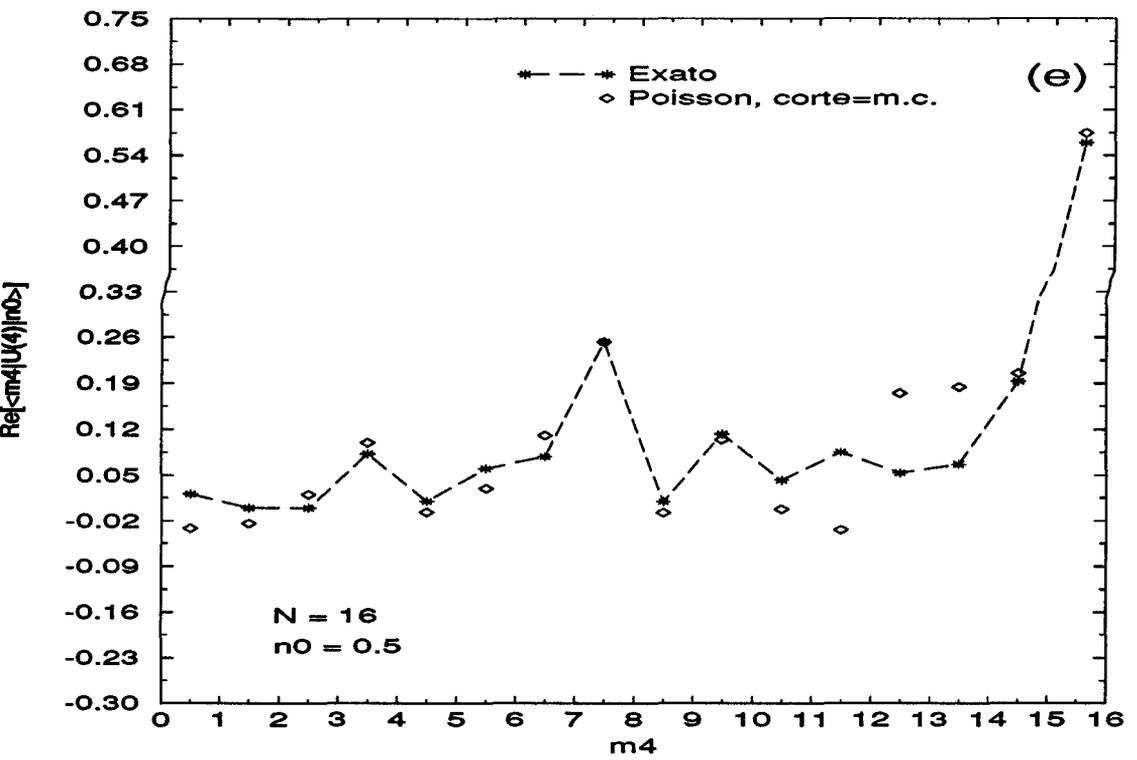
$$\begin{aligned} L_2 + \frac{\nu_1}{2} + \frac{1}{2}(\bar{p}_1 + L_1 + \frac{\nu_0}{2}) + 2(-2p_4 + L_3 + \frac{\nu_2}{2}) &\approx 0 \\ K_1 + \frac{\nu_1}{2} + \frac{1}{2}(\bar{q}_2 + K_2 + \frac{\nu_2}{2}) &\approx 0. \end{aligned} \quad (5.30)$$

Colocando agora em (5.30) os valores de m.c. dos outros  $K$ 's e  $L$ 's e fazendo também  $\bar{p}_1 = \tilde{p}_1$  e  $\bar{q}_2 = \tilde{q}_2$ , encontramos que  $K_1 = -\nu_1$  e que  $L_2$  deve variar de  $-(\nu_1 + \nu_2)$  a  $-(\nu_1 + \nu_2) + 3$  se  $0 < 2p_4 - \mu_4 < 1/2$  e de  $-(\nu_1 + \nu_2 + 1)$  a  $-(\nu_1 + \nu_2 + 1) + 3$  se  $1/2 < 2p_4 - \mu_4 < 1$ . Por fim, os resultados numéricos mostram mais uma vez, que  $L_1$  deve assumir os valores  $-\mu_3$  e  $1 - \mu_3$  ao invés de  $-\nu_0$  e  $1 - \nu_0$ .

Corte=m.c., para  $l = 4$ , fica então definido como a soma sobre os valores dos parâmetros deduzidos acima. Neste caso, estamos calculando 256 termos, uma ordem de grandeza menor caso fizéssemos corte=1. As Figuras 5.4 e 5.5, mostram a parte real e imaginária do propagador exato, comparado à soma de Poisson truncada, com corte=m.c., para vários valores de  $N$  e  $n_0$ . Para estes gráficos de corte=m.c., integramos  $W_4$  na eq. (5.24), analiticamente em  $p_1$  e numericamente em  $q_2$  (no cálculo numérico, usamos, para as funções  $\mathcal{I}$ , a aproximação (4.29)).







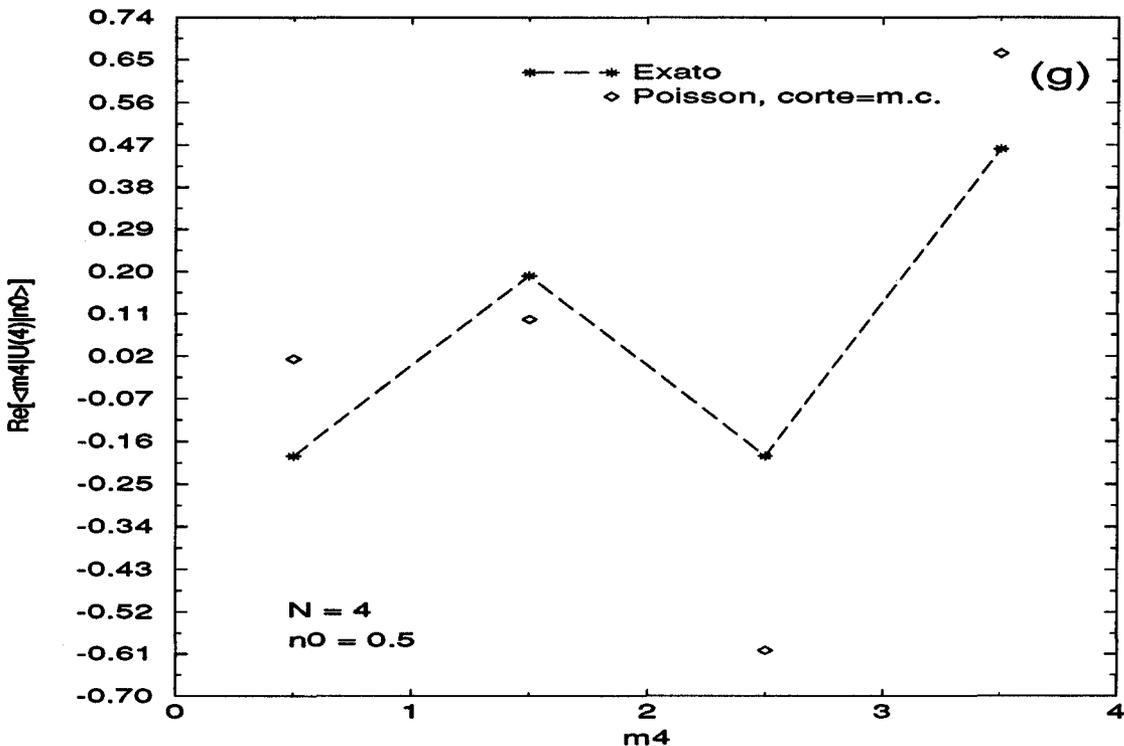
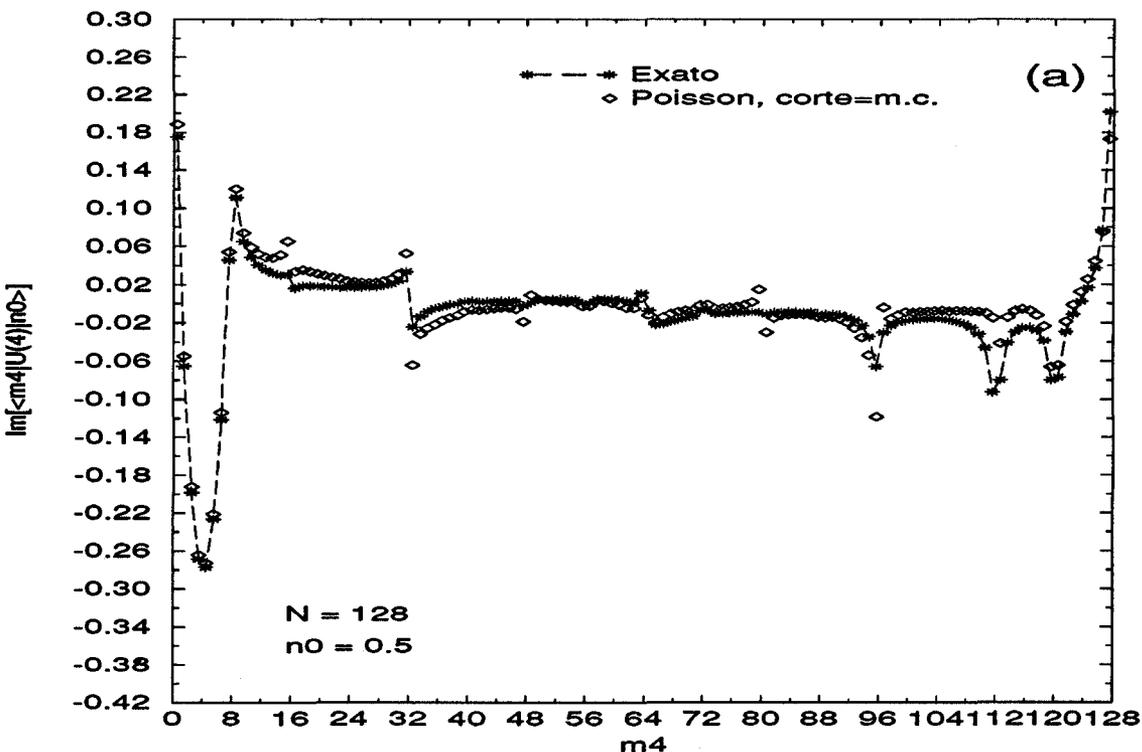
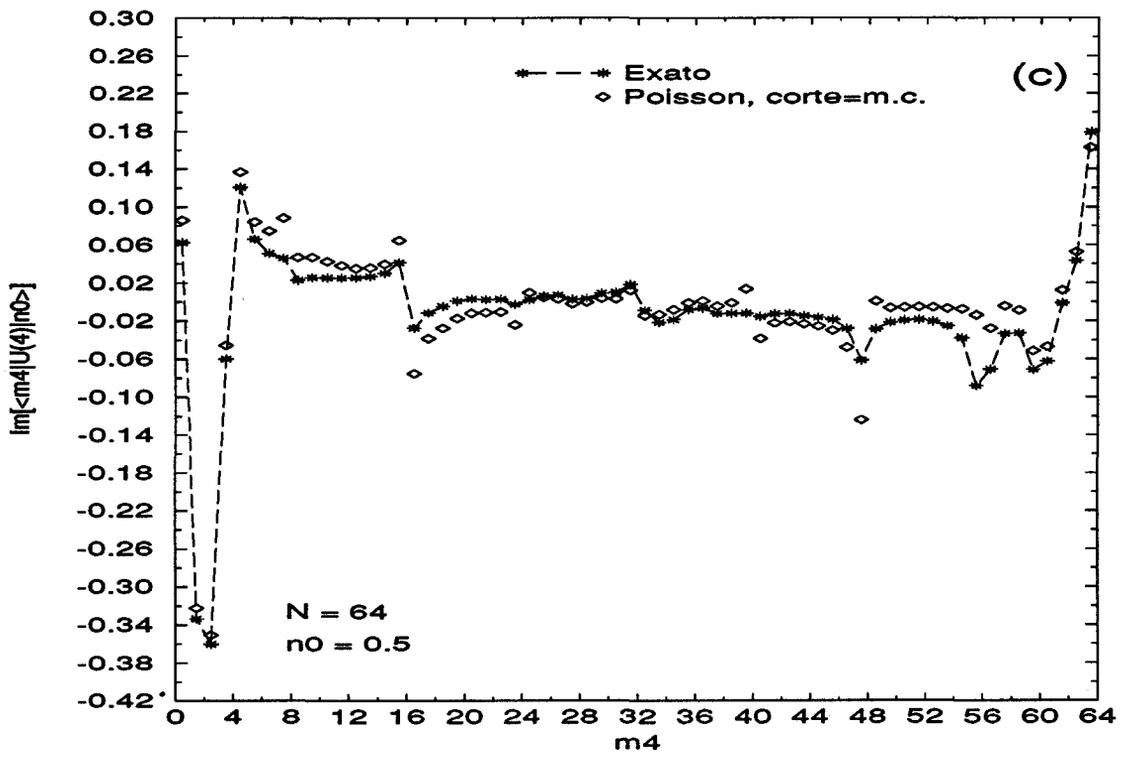
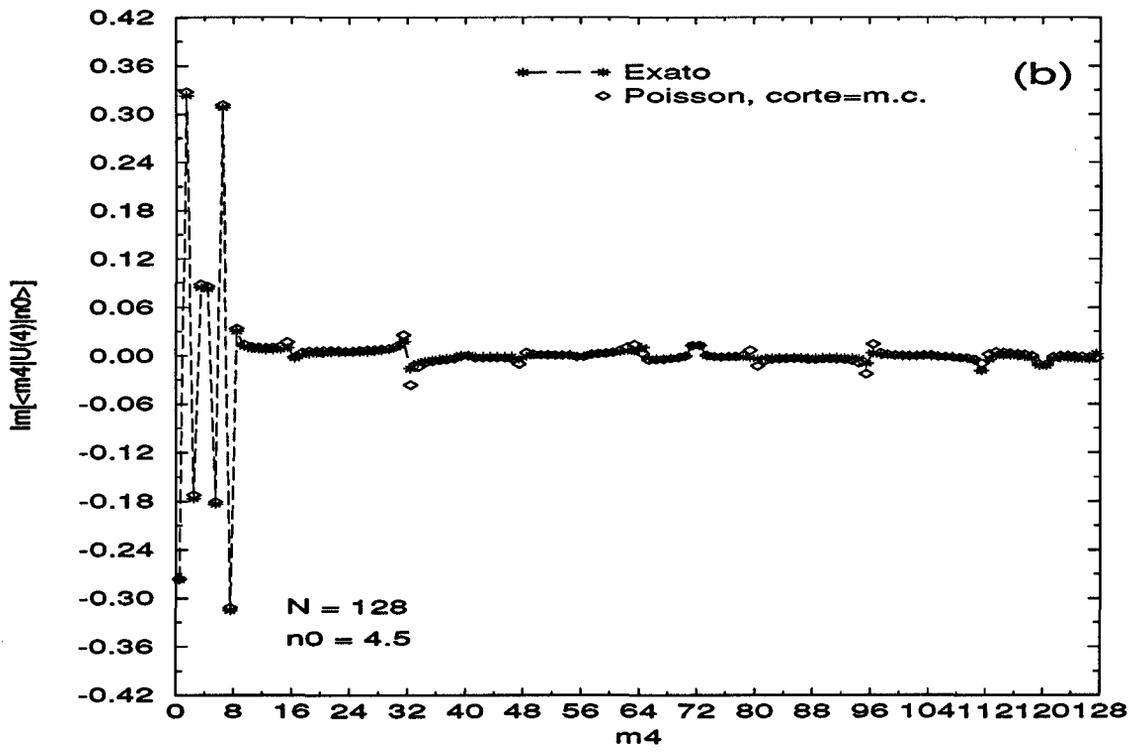
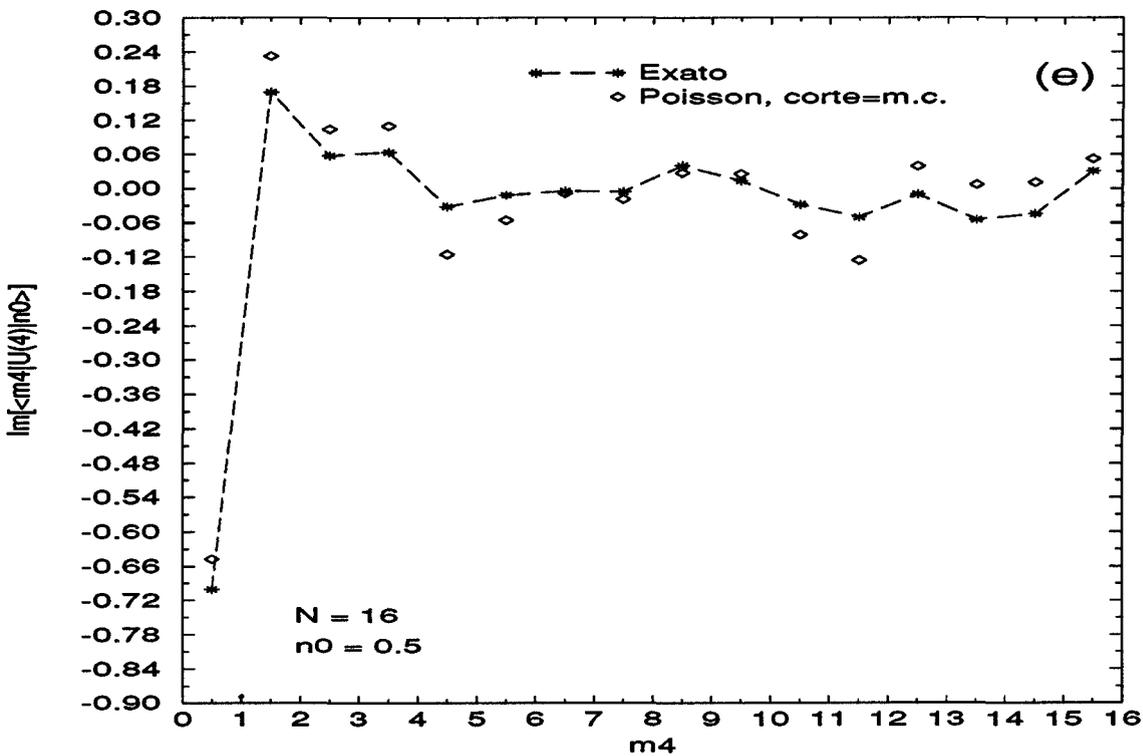
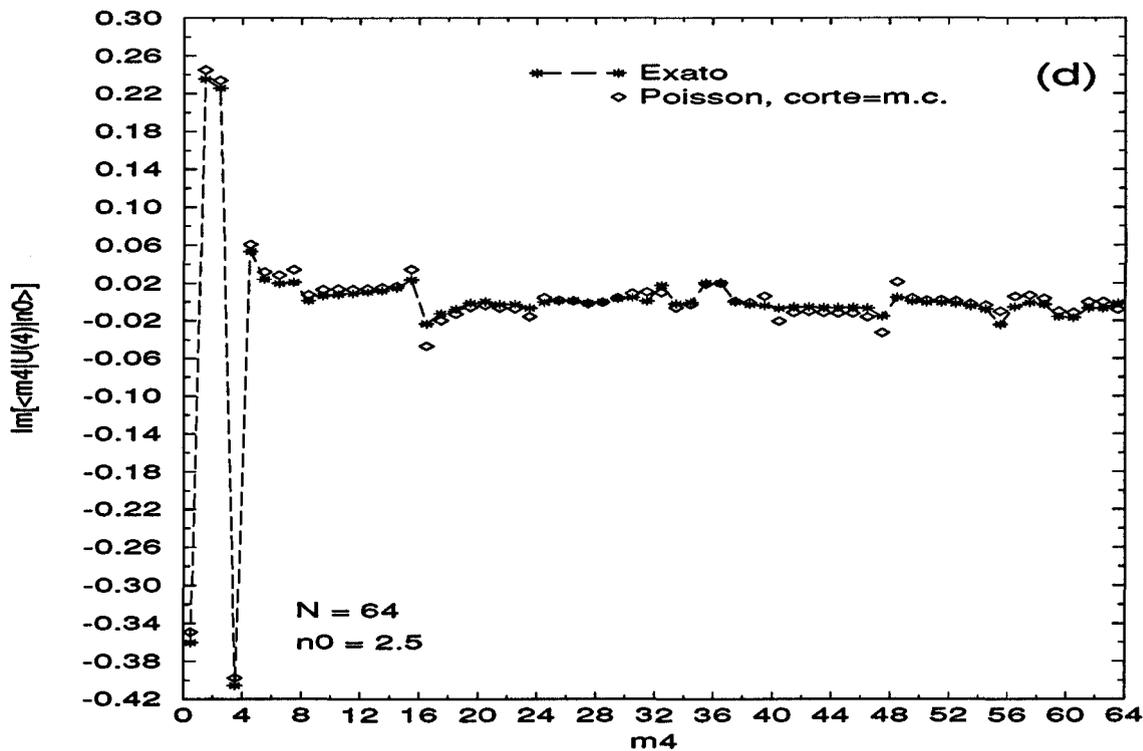


Figura 5.4: Comparação entre a parte real do propagador exato ( $l = 4$ ) e a soma de Poisson com corte=m.c., considerando-se vários valores de  $N$  e  $n_0$ .







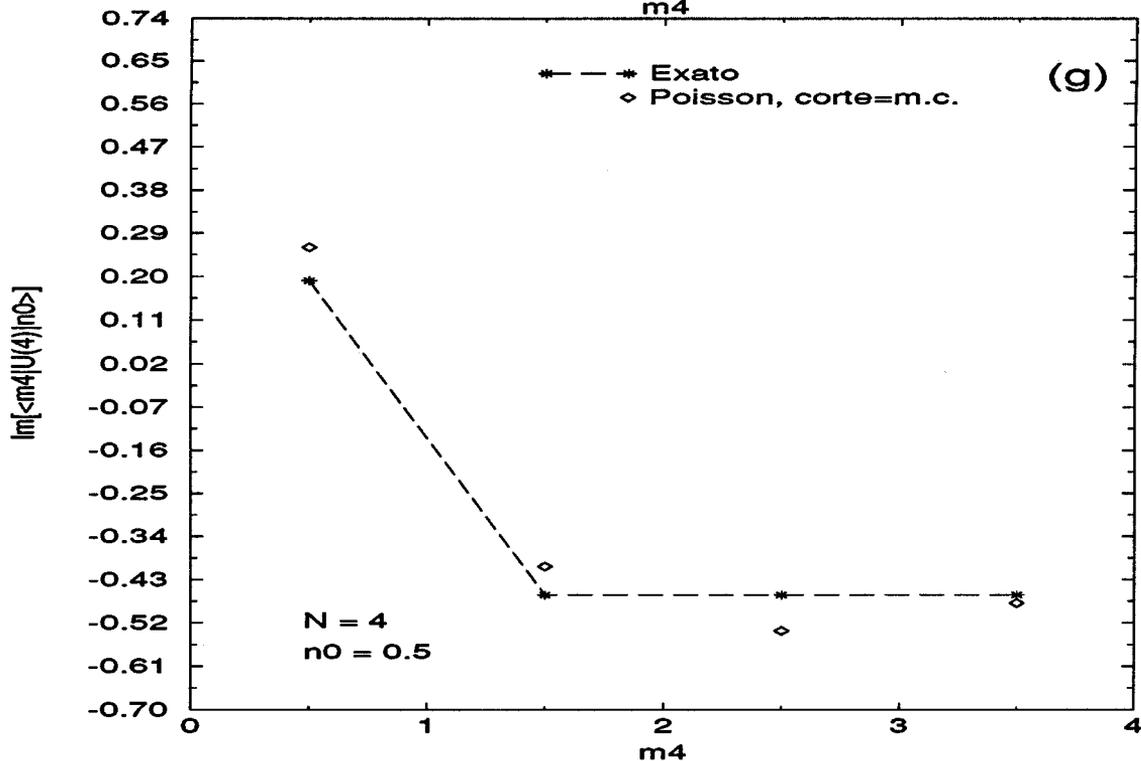
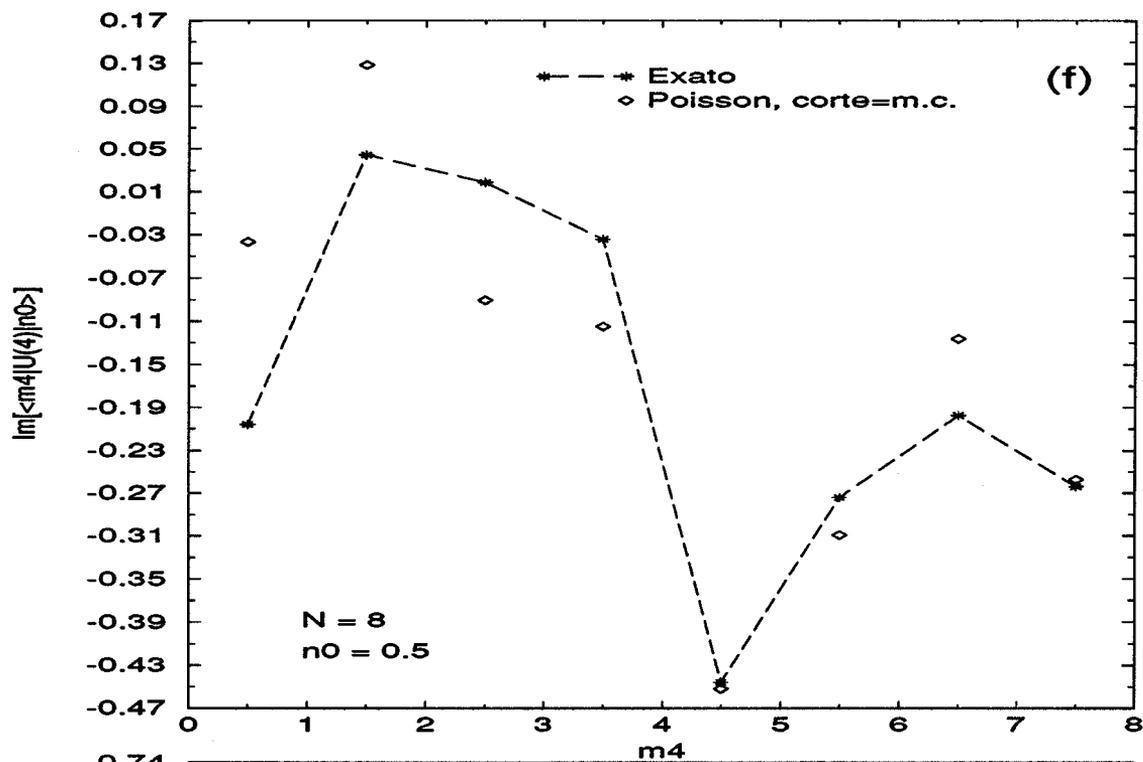


Figura 5.5: As mesmas comparações da Figura 5.4 para a parte imaginária do propagador.

Nas Figuras 5.2 a 5.5, observamos que a melhor ou pior concordância entre o propagador exato e a soma de Poisson truncada, depende basicamente de  $n_0$  e  $N$ .

Verificamos dos gráficos que a medida que  $n_0$  se afasta do valor  $n_0 = 0$  (para um  $N$  fixo), temos uma melhora no resultado do propagador truncado. Isto simplesmente reflete o fato de precisarmos de um maior número de termos na soma de Poisson, à medida que nos aproximamos de uma descontinuidade ou “borda” do mapa; característica esta anteriormente encontrada para o caso  $l = 2$ .

Também observamos que, com a diminuição de  $N$ , corte=m.c. começa a dar piores resultados. Os parâmetros de m.c. são encontrados a partir da imposição de que os argumentos das funções  $\mathcal{I}$ , basicamente na forma  $\pi N\phi$ , sejam pequenos. Ora, quando  $N$  vai decrescendo, os argumentos das  $\mathcal{I}$ 's vão se tornando menores como um todo. Portanto, a diferença entre os termos de m.c. e o restante da soma de Poisson começa a diminuir, e assim, torna-se necessário considerar mais termos no truncamento.

A convergência do propagador truncado, com relação a  $n_0$  e  $N$ , é mais sensível para  $l = 4$  do que para  $l = 3$ . Isto é facilmente entendido, se lembrarmos que a dependência de  $l = 4$  com relação às funções  $\mathcal{I}$  é maior do que a de  $l = 3$ , pois das eqs. (5.16) e (5.23), vemos que  $W_4$  depende do produto de duas funções  $I$ , ao passo que  $W_3$  depende apenas de uma função  $I$  (com  $I$  sendo, basicamente, a soma de quatro funções  $\mathcal{I}$ ).

*Por último, mencionamos que, embora para  $l$ 's grandes corte=m.c. possa não ter interesse prático (pois teríamos um número muito grande de termos para somar), ainda tem interesse teórico pois mostra que, mesmo nas regiões não-clássicas, existem conjuntos de ações mais importantes que as demais, sendo as responsáveis pelas maiores contribuições ao propagador (a exemplo do que acontece nas regiões de propagação clássica, com relação às ações clássicas). A interpretação destas ações, bem como o estudo da relação (se houver) com as ações clássicas, seria uma boa proposta de trabalho futuro.*

## 5.2.2 Correções ao Propagador Semiclássico

Passemos agora, a nos concentrar nas regiões do espaço de fase do mapa quântico, onde a aproximação semiclássica seja definida.

Vimos no Capítulo 2 que, em termos da quantização semiclássica de Ozorio de Almeida e Saraceno, estas regiões correspondem a intersecções na dinâmica de faixas do espaço de fase clássico. Porém, tal quantização perde o sentido, quando estas faixas se tornam tão estreitas, a medida que  $l$  aumenta, a ponto de serem mais “finas” que o espaçamento entre dois estados quânticos sucessivos. Já em nossa redução da aproximação semiclássica, não precisamos lançar mão deste artifício. A definição das regiões de validade da aproximação semiclássica surge unicamente de uma imposição matemática formal, oriunda dos valores que  $p_l$  e  $q_0$  devem assumir (ver Apêndice A).

Nesta Seção, vamos comparar o propagador exato com Poisson (corte=m.c.), borda-estacionário e estacionário. Em todos estes 3 casos, os valores assumidos para os parâmetros  $K$ 's e  $L$ 's são os mesmos deduzidos no Apêndice A, correspondentes às condições necessárias para termos regiões com fase estacionária, e sendo dados por,  $K_1 = \nu_0$ ,  $L_{l-1} = \mu_l$  e  $K_j = L_{j-1} = 0$  ( $j = 2, \dots, l-1$ ). Quanto aos  $\nu$ 's das órbitas simbólicas, podem assumir quaisquer dos dois valores 0 ou 1, mas uma escolha particular para o conjunto dos  $\nu_j$ 's ( $j = 1, \dots, l-1$ ), define univocamente em qual região do espaço de fase quântico, temos a condição de fase estacionária. Portanto, para uma região particular, não temos mais uma soma sobre os  $\nu$ 's, mas sim um conjunto de valores bem determinado (de acordo com a região).

Novamente, vamos estudar casos particulares  $l = 3, 4$  e  $5$ ; os quais são suficientes para nos dar uma idéia geral do comportamento de um  $l$  qualquer. Inicialmente, precisamos obter a aproximação borda-estacionária. Assim, passaremos agora, para estes 3 casos, a desenvolver o método apresentado na Seção 5.1. Nas expressões que aparecerão de agora em diante, já serão considerados os valores estacionários para os  $K$ 's e  $L$ 's, serão também suprimidas as somas sobre os  $\nu$ 's (uma vez que estaremos considerando uma única região específica).

### (1) Caso $l = 3$

O propagador, para  $l = 3$ , é dado por (5.14), sendo  $W_3$  dado por (5.16). Definindo  $\psi_3^{(b.e.)}$  como a função  $\psi_3$  em (5.16) com os  $K$ 's e  $L$ 's estacionários, temos

$$\psi_3^{(b.e.)}(p_1, q_2) = p_1(-2q_0 + \frac{\nu_1}{2} + \nu_0) + q_2(-2p_3 + \mu_3 + \frac{\nu_1}{2}) + \frac{1}{2}(p_1 + \frac{\nu_0}{2})(q_2 + \frac{\mu_3}{2}). \quad (5.31)$$

Se agora, igualamos a zero as derivadas parciais de  $\psi_3^{(b.e.)}$  com relação a  $p_1$  e  $q_2$ , encontramos

$$\begin{aligned} p_1^{(est.)} &= 4p_3 - 2\mu_3 - \nu_1 - \frac{\nu_0}{2} \\ q_2^{(est.)} &= 4q_0 - \frac{\mu_3}{2} - \nu_1 - 2\nu_0. \end{aligned} \quad (5.32)$$

Assim, escrevemos

$$W_3^{(b.e.)} \approx -\frac{1}{4\pi i N} I_{(1)}^{(b.e.)} \int_0^{\frac{1}{2}} dp_1 dq_2 \exp[2\pi i N \psi_3^{(b.e.)}(p_1, q_2)], \quad (5.33)$$

com

$$I_{(1)}^{(b.e.)} = \sum_{b,a=0}^1 (-1)^{b+a} \mathcal{I}[-\pi N(p_1^{(est.)} + \frac{\nu_0}{2} - b)(q_2^{(est.)} + \frac{\mu_3}{2} - a)]. \quad (5.34)$$

A integral em (5.33) é facilmente resolvida e chegamos então a

$$\begin{aligned} \langle m_3, \mu_3 | U^3 | n_0, \nu_0 \rangle^{(b.e.)} &= \frac{1}{\sqrt{2N\pi^2}} (i)^{N\nu_1(\nu_0 + \mu_3)} \exp[\pi i N(-p_1^{(est.)} q_2^{(est.)} + \frac{\mu_3 \nu_0}{4})] \\ &\times I_{(1)}^{(b.e.)} I_{(2)}^{(b.e.)}, \end{aligned} \quad (5.35)$$

sendo

$$I_{(2)}^{(b.e.)} = \sum_{b,a=0}^1 (-1)^{b+a} \mathcal{I}[\pi N(p_1^{(est.)} - \frac{b}{2})(q_2^{(est.)} - \frac{a}{2})]. \quad (5.36)$$

(2) Caso  $l = 4$

Para  $l = 4$ , temos o propagador dado (5.21) com  $W_4$  dado por (5.22). Integrando  $W_4^{(b.e.)}$  (que é  $W_4$  com os  $K$ 's e  $L$ 's estacionários) com relação a  $p_2 e q_1$ , encontramos

$$W_4^{(b.e.)} = -\frac{1}{4\pi i N} \int_0^{\frac{1}{2}} dp_3 dp_1 dq_3 dq_2 \exp[2\pi i N \varphi_1^{(b.e.)}] J_{(1)}(p_1, q_2), \quad (5.37)$$

onde

$$\begin{aligned} \varphi_1^{(b.e.)} = & p_3 q_3 - 2p_3 q_2 + p_3 \frac{\mu_4}{2} + p_1(-2q_0 + \frac{\nu_1}{2} + \nu_0) \\ & + q_3(-2p_4 + \mu_4 + \frac{\nu_2}{2}) + q_2 \frac{\nu_1}{2} + \frac{1}{2}(p_1 + \frac{\nu_0}{2})(q_2 + \frac{\nu_2}{2}) \end{aligned} \quad (5.38)$$

e

$$J_{(1)}(p_1, q_2) = \sum_{b,a=0}^1 (-1)^{b+a} \mathcal{I}[-\pi N(p_1 + \frac{\nu_0}{2} - b)(q_2 + \frac{\nu_2}{2} - a)]. \quad (5.39)$$

Impondo

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial \varphi_1^{(b.e.)}}{\partial p_1} \right|_{q_2^{(est.)}} &= 0 \\ \left. \frac{\partial \varphi_1^{(b.e.)}}{\partial q_2} \right|_{p_1^{(est.)}} &= 0, \end{aligned} \quad (5.40)$$

encontramos

$$\begin{aligned} p_1^{(est.)} &= 8p_4 - 4\mu_4 - 2\nu_2 - \nu_1 - \frac{\nu_0}{2} \\ q_2^{(est.)} &= 4q_0 - \frac{\nu_2}{2} - \nu_1 - 2\nu_0. \end{aligned} \quad (5.41)$$

Agora em (5.37), aproximando  $J_{(1)}(p_1, q_2)$  por  $J_{(1)}^{(b.e.)} = J_{(1)}(p_1^{(est.)}, q_2^{(est.)})$  e integrando em  $p_3 q_2$ , chegamos a

$$W_4^{(b.e.)} \approx -\frac{1}{(4\pi N)^2} J_{(1)}^{(b.e.)} \int_0^{\frac{1}{2}} dp_1 dq_3 \exp[2\pi i N \varphi_2^{(b.e.)}] J_{(2)}(p_1, q_3), \quad (5.42)$$

sendo

$$\begin{aligned} \varphi_2^{(b.e.)} = & \frac{1}{4} p_1 q_3 + p_1 (-2q_0 + \frac{\mu_4}{8} + \frac{\nu_2}{4} + \frac{\nu_1}{2} + \nu_0) + \\ & + q_3 (-2p_4 + \mu_4 + \frac{\nu_2}{2} + \frac{\nu_1}{4} + \frac{\nu_0}{8}) + \frac{1}{8} (\nu_0 \nu_2 + \nu_1 \mu_4 + \frac{\mu_4 \nu_0}{2}) \end{aligned} \quad (5.43)$$

e

$$J_{(2)}(p_1, q_3) = \sum_{b,a=0}^1 (-1)^{b+a} \mathcal{I}[-\pi N (\frac{p_1}{2} + \frac{\nu_1}{2} + \frac{\nu_0}{4} - b)(q_3 + \frac{\mu_4}{2} - a)]. \quad (5.44)$$

Igualando a zero a derivada parcial de  $\varphi_2^{(b.e.)}$  em relação a  $p_1$ , encontramos  $q_3^{(est.)}$ ,

$$q_3^{(est.)} = 8q_0 - \frac{\mu_4}{2} - \nu_2 - 2\nu_1 - 4\nu_0. \quad (5.45)$$

Finalmente, substituindo em (5.42)  $J_{(2)}(p_1, q_3)$  por  $J_2^{(b.e.)} = J_{(2)}(p_1^{(est.)}, q_3^{(est.)})$  e integrando em  $p_1 q_3$ , chegamos ao seguinte propagador aproximado

$$\begin{aligned} \langle m_4, \mu_4 | U^4 | n_0, \nu_0 \rangle^{(b.e.)} = & \frac{i}{2\sqrt{N}\pi^3} (i)^{N(\nu_0 \nu_1 + \nu_1 \nu_2 + \nu_2 \mu_4)} \exp[\frac{\pi i N}{2} (-p_1^{(est.)} q_3^{(est.)} + \\ & + \frac{\mu_4 \nu_1}{2} + \frac{\nu_2 \nu_0}{2} + \frac{\mu_4 \nu_0}{4})] J_{(1)}^{(b.e.)} J_{(2)}^{(b.e.)} J_{(3)}^{(b.e.)}, \end{aligned} \quad (5.46)$$

com

$$J_{(3)}^{(b.e.)} = \sum_{b,a=0}^1 (-1)^{b+a} \mathcal{I}[\frac{\pi N}{4} (p_1^{(est.)} - \frac{b}{2})(q_3^{(est.)} - \frac{a}{2})]. \quad (5.47)$$

### (3) Caso $l = 5$

Para o caso  $l = 5$ , o procedimento para o cálculo da aproximação borda-estacionária é o mesmo usado para  $l = 3$  e  $l = 4$ . Temos também que calcular o propagador exato, para podermos fazer o truncamento do somatório de Poisson com corte=m.c.. Nos dois casos, os cálculos são muito extensos, porisso apresentaremos apenas os resultados finais.

O propagador exato (a menos de duas integrais), com os  $K$ 's e  $L$ 's estacionários e sem o somatório sobre as órbitas simbólicas, será chamado de propagador m.c., sendo dado por

$$\begin{aligned} \langle m_5, \mu_5 | U^5 | n_0, \nu_0 \rangle^{(m.c.)} = & \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{N}(2\pi)^4} (i)^{N(\nu_0 \nu_1 + \nu_1 \nu_2 + \nu_2 \nu_3 + \nu_3 \mu_5)} \int_0^{\frac{1}{2}} dp_3 dp_1 \\ & \times \exp \left[ 2\pi i N \left( p_3 \left( \frac{\mu_5}{4} + \frac{\nu_3}{2} \right) + p_1 \left( -2q_0 + \frac{\nu_2}{4} + \frac{\nu_1}{2} + \nu_0 \right) \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{\nu_2}{8} (\mu_5 + \nu_0) \right) \right] \left( -2p_5 + \frac{p_3 + 2\mu_5 + \nu_3 + \frac{\nu_2}{2}}{2} \right)^{-1} \\ & \times \left( -2p_3 + \frac{p_1 + \nu_1 + \frac{\nu_0}{2}}{2} \right)^{-1} W_5, \end{aligned} \quad (5.48)$$

onde

$$\begin{aligned}
 W_5 = & \sum_{d,c=0}^1 (-1)^{d+c} \left\{ \exp \left[ \frac{\pi i N d}{2} \left( -4p_5 + p_3 + 2\mu_5 + \nu_3 + \frac{\nu_2}{2} \right) \right] F_{(1)}(d/2) \right. \\
 & - \exp \left[ -\pi i N \left( \frac{\mu_5}{2} - d \right) \left( -4p_5 + p_3 + 2\mu_5 + \nu_3 + \frac{\nu_2}{2} \right) \right] F_{(2)}(d) \left. \right\} \\
 & \times \left\{ \exp \left[ \frac{\pi i N c}{2} \left( -4p_3 + p_1 + \nu_1 + \frac{\nu_0}{2} \right) \right] F_{(3)}(c/2) \right. \\
 & - \exp \left[ -\pi i N \left( \frac{\nu_2}{2} - c \right) \left( -4p_3 + p_1 + \nu_1 + \frac{\nu_0}{2} \right) \right] F_{(4)}(c) \left. \right\}, \quad (5.49)
 \end{aligned}$$

com

$$\begin{aligned}
 F_{(1)}(x) &= \sum_{b,a=0}^1 (-1)^{b+a} \mathcal{I}[-\pi N(p_3 + \frac{\nu_2}{2} - b)(x + \frac{\mu_5}{2} - a)] \\
 F_{(2)}(x) &= \sum_{b,a=0}^1 (-1)^{b+a} \mathcal{I}[-\pi N(-4p_5 + 2\mu_5 + \nu_3 + b)(x - \frac{\mu_5}{2} - \frac{a}{2})] \\
 F_{(3)}(x) &= \sum_{b,a=0}^1 (-1)^{b+a} \mathcal{I}[-\pi N(p_1 + \frac{\nu_0}{2} - b)(x + \frac{\nu_2}{2} - a)] \\
 F_{(4)}(x) &= \sum_{b,a=0}^1 (-1)^{b+a} \mathcal{I}[-\pi N(-4p_3 + \nu_1 + b)(x - \frac{\nu_2}{2} - \frac{a}{2})]. \quad (5.50)
 \end{aligned}$$

Para a aproximação borda-estacionária, temos o propagador

$$\begin{aligned}
 \langle m_5, \mu_5 | U^5 | n_0, \nu_0 \rangle^{(b.e.)} &= -\frac{\sqrt{2}}{4\sqrt{N}\pi^4} (i)^{N(\nu_0\nu_1+\nu_1\nu_2+\nu_2\nu_3+\nu_3\mu_5)} \\
 &\times \exp\left\{ \frac{\pi i N}{4} [-p_1^{(est.)} q_4^{(est.)} + \mu_5(\nu_2 + \frac{\nu_1}{2}) + \nu_3\nu_1 \right. \\
 &\left. + \nu_0(\frac{\nu_3}{2} + \nu_2) + \frac{\mu_5\nu_0}{4}] \right\} R_{(1)}^{(b.e.)} R_{(2)}^{(b.e.)} R_{(3)}^{(b.e.)} R_{(4)}^{(b.e.)}, \quad (5.51)
 \end{aligned}$$

sendo

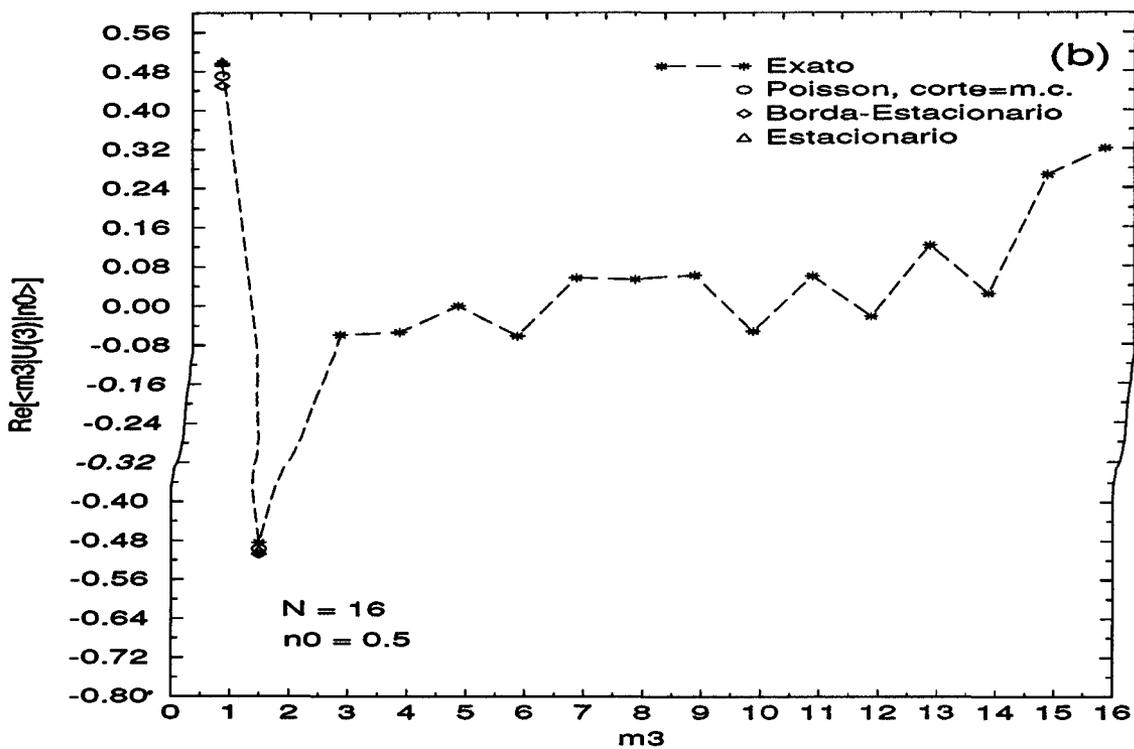
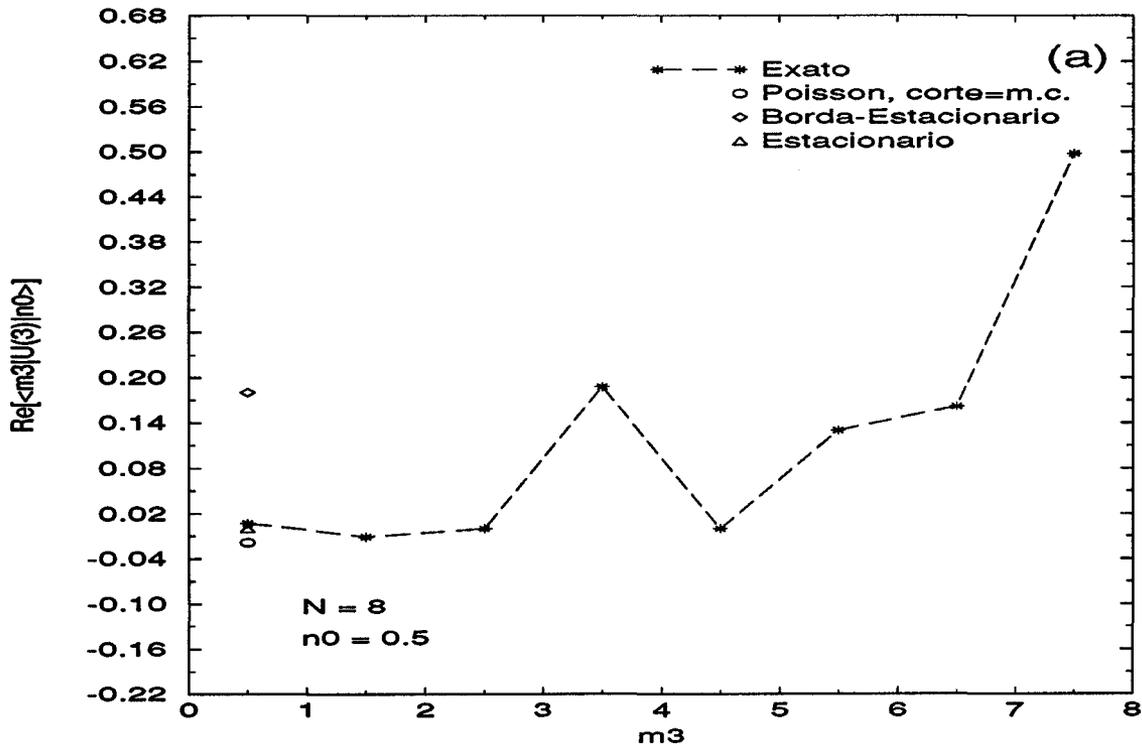
$$\begin{aligned}
 R_{(1)}^{(b.e.)} &= \sum_{b,a=0}^1 (-1)^{b+a} \mathcal{I}[-\pi N(p_1^{(est.)} + \frac{\nu_0}{2} - b)(q_2^{(est.)} + \frac{\nu_2}{2} - a)] \\
 R_{(2)}^{(b.e.)} &= \sum_{b,a=0}^1 (-1)^{b+a} \mathcal{I}[-\pi N(\frac{p_1^{(est.)}}{2} + \frac{\nu_1}{2} + \frac{\nu_0}{4} - b)(q_3^{(est.)} + \frac{\nu_3}{2} - a)] \\
 R_{(3)}^{(b.e.)} &= \sum_{b,a=0}^1 (-1)^{b+a} \mathcal{I}[-\pi N(\frac{p_1^{(est.)}}{4} + \frac{\nu_2}{2} + \frac{\nu_1}{4} + \frac{\nu_0}{8} - b)(q_4^{(est.)} + \frac{\mu_5}{2} - a)] \\
 R_{(4)}^{(b.e.)} &= \sum_{b,a=0}^1 (-1)^{b+a} \mathcal{I}[\frac{\pi N}{4}(p_1^{(est.)} - \frac{b}{2})(q_4^{(est.)} - \frac{a}{2})] \quad (5.52)
 \end{aligned}$$

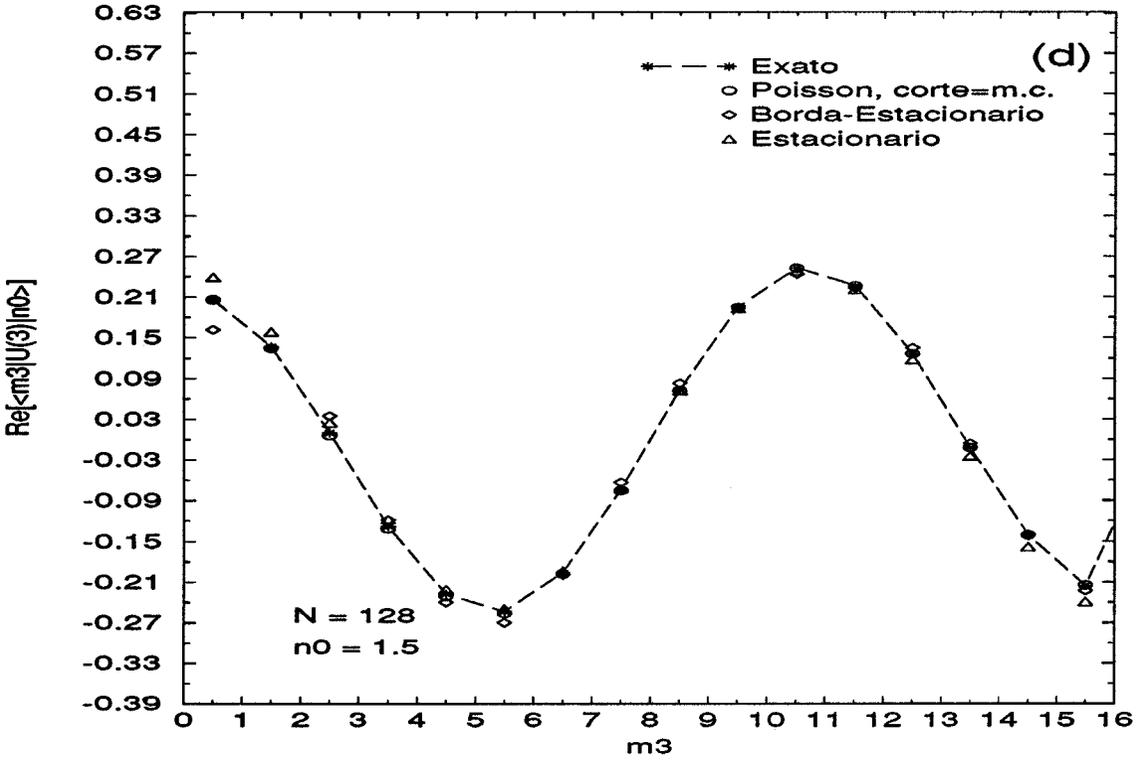
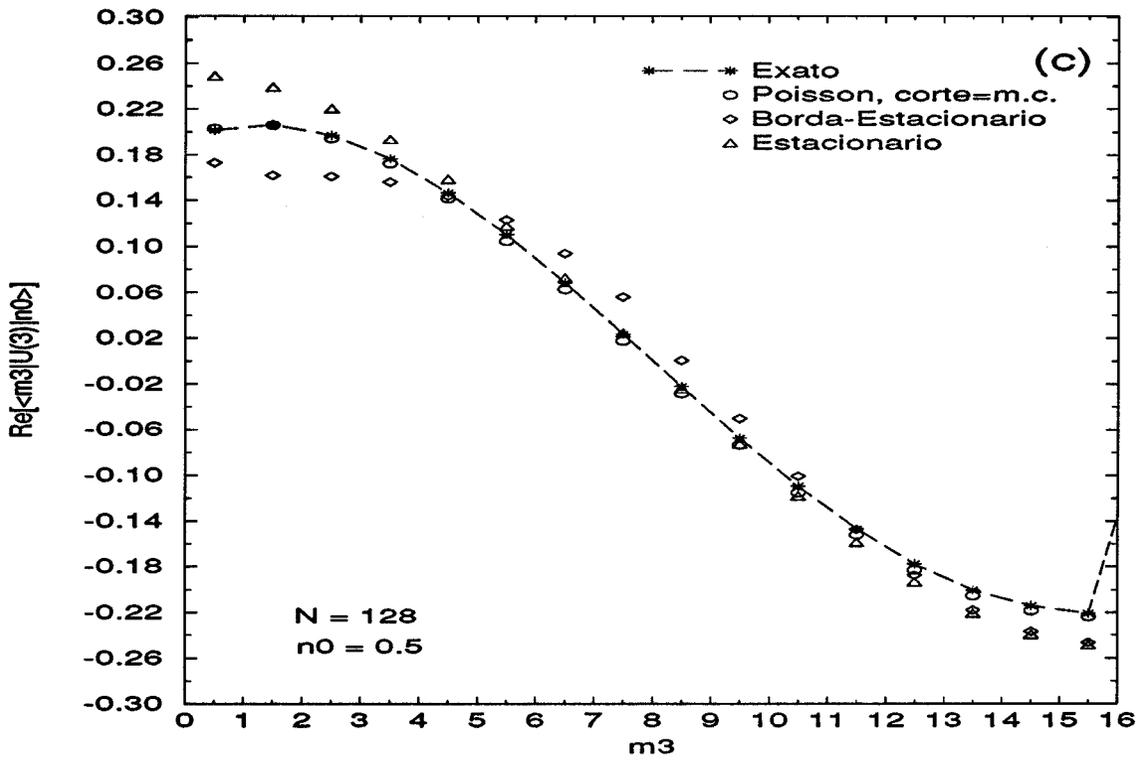
$$\begin{aligned}
p_1^{(est.)} &= 16p_5 - 8\mu_5 - 4\nu_3 - 2\nu_2 - \nu_1 - \frac{\nu_0}{2} \\
q_4^{(est.)} &= 16q_0 - \frac{\mu_5}{2} - \nu_3 - 2\nu_2 - 4\nu_1 - 8\nu_0 \\
q_3^{(est.)} &= 8q_0 - \frac{\nu_3}{2} - \nu_2 - 2\nu_1 - 4\nu_0 \\
q_2^{(est.)} &= 4q_0 - \frac{\nu_2}{2} - \nu_1 - 2\nu_0.
\end{aligned} \tag{5.53}$$

Agora estamos em condições de comparar o propagador exato com as três aproximações propostas, ou seja, soma de Poisson com corte=m.c., borda-estacionária e estacionária. Nos restringiremos ao estudo da região  $0 < p_l, q_0 < 1/2^l$ , uma vez que as outras regiões clássicas permitidas apresentam comportamento análogo (para a região que consideraremos, todos os  $\nu_j$ 's devem assumir o valor 0, qualquer que seja  $l$ ). Desta forma, as três aproximações serão calculadas apenas para tais valores de  $p_l$  e  $q_0$ .

Como já vimos, o "log-time" é definido por  $l^* = \log_2 N$ . Porém, podemos fazer o inverso, se tivermos  $l$  fixo, podemos definir um  $N^*$ , tal que  $N^* = 2^l$ . Assim, ultrapassar o limite de "log-time", corresponde agora a termos  $N < N^*$ . Para  $l = 3, 4$  e  $5$   $N^*$  é dado, respectivamente, por 8, 16 e 32.

Nas Figuras 5.6 a 5.11, são mostradas as comparações para  $l = 3, 4$  e  $5$ . Em cada caso, tomamos diferentes valores de  $n_0$  e  $N$ , com  $N \geq N^*$  (no caso limite de  $N = N^*$ , existe apenas um único ponto quântico na região considerada).





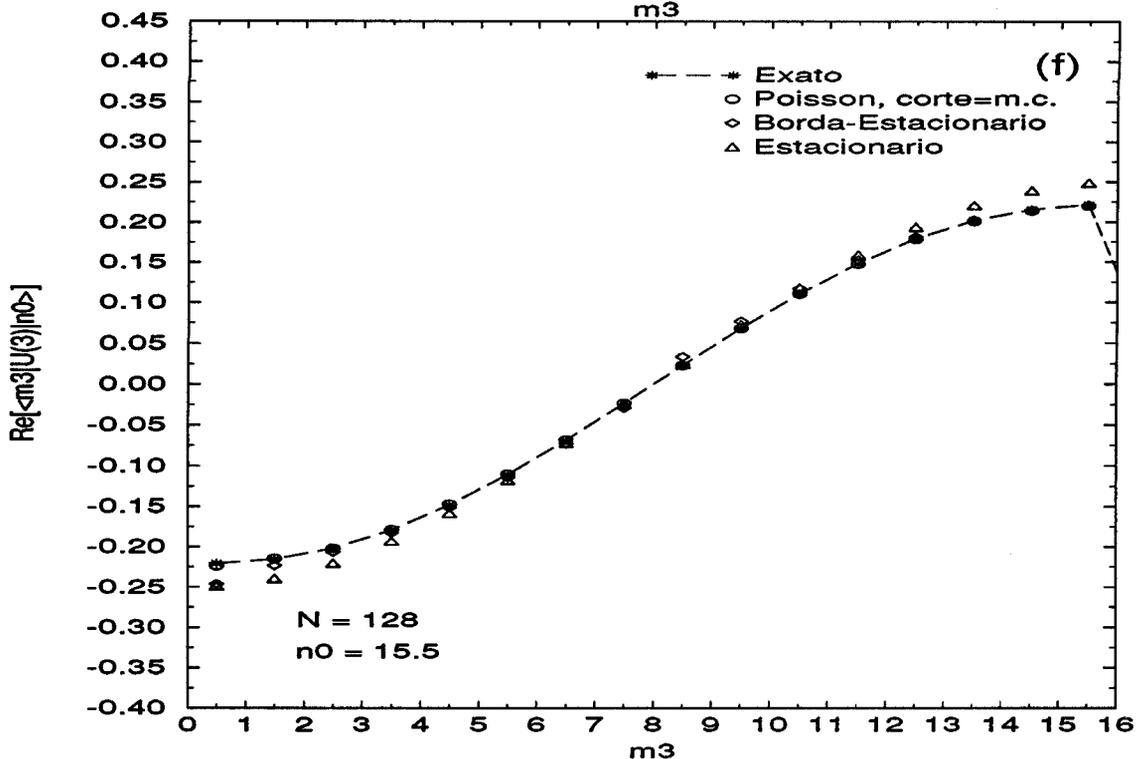
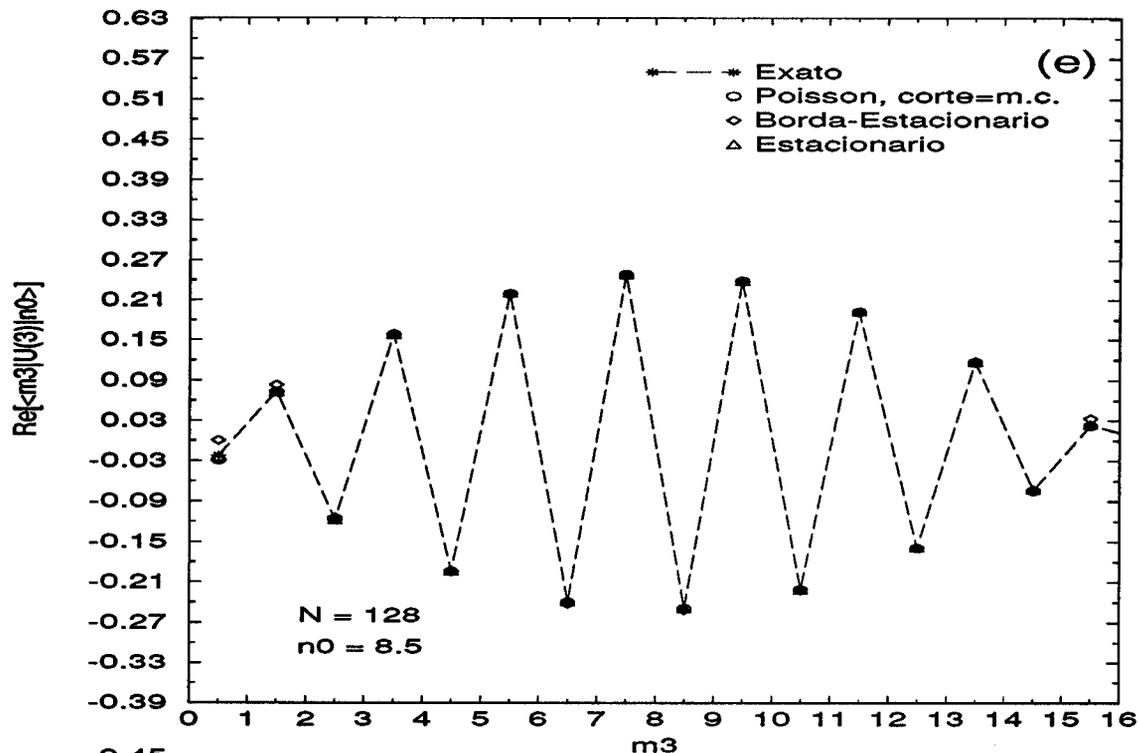
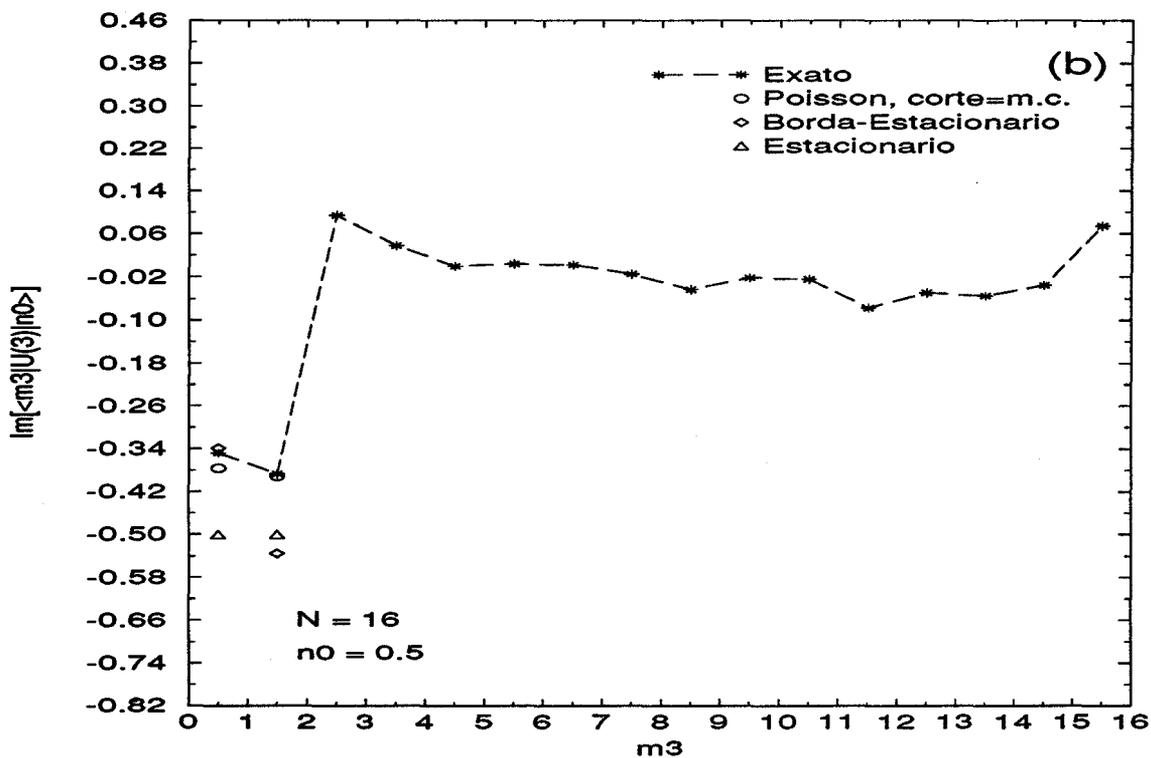
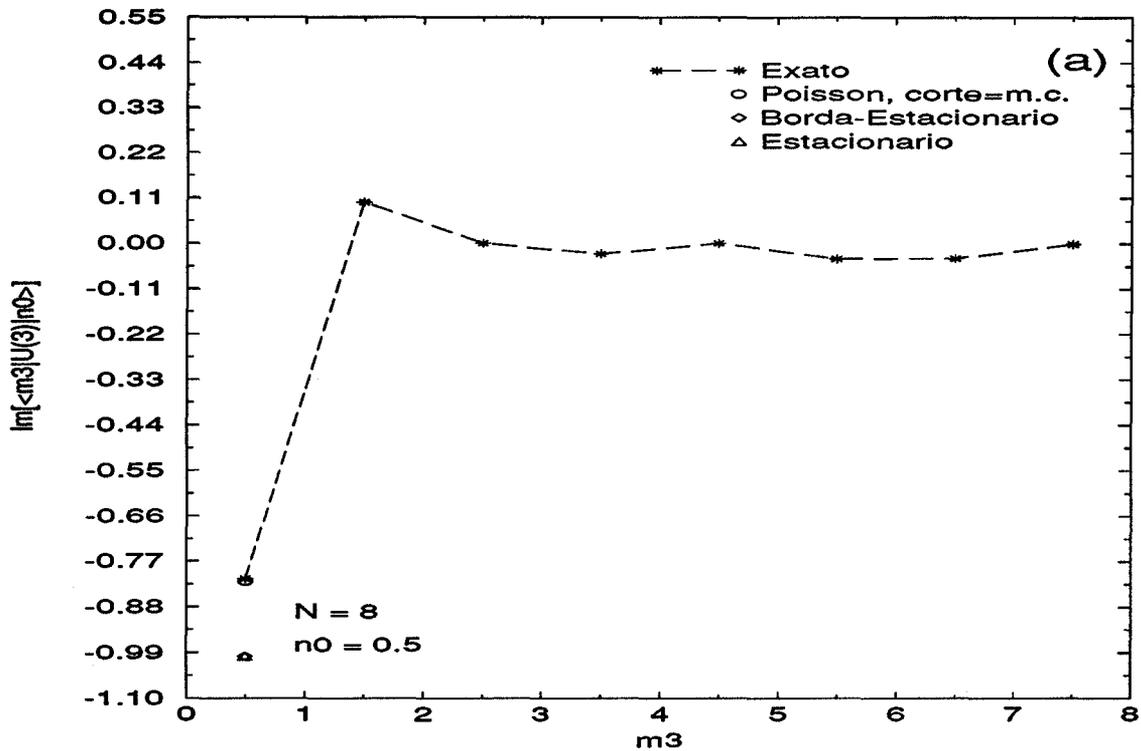
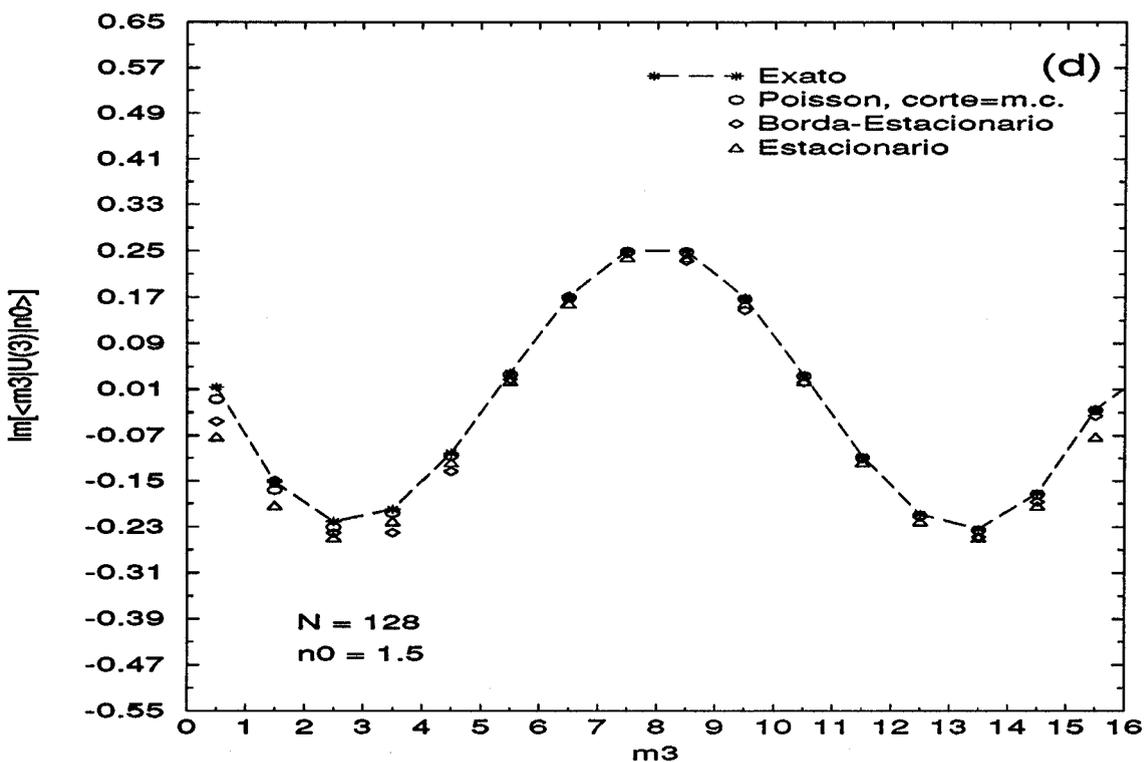
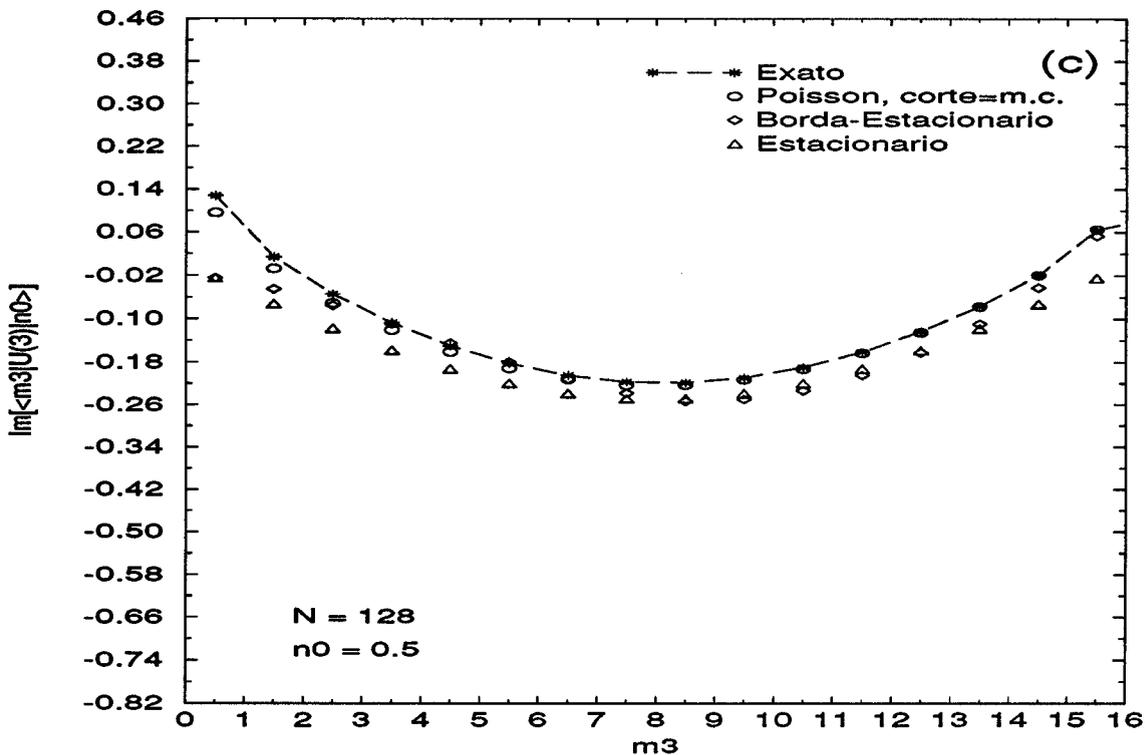


Figura 5.6: Comparação da parte real do propagador exato ( $l = 3$ ) com três aproximações diferentes, considerando-se vários valores de  $N$  e  $n_0$ .





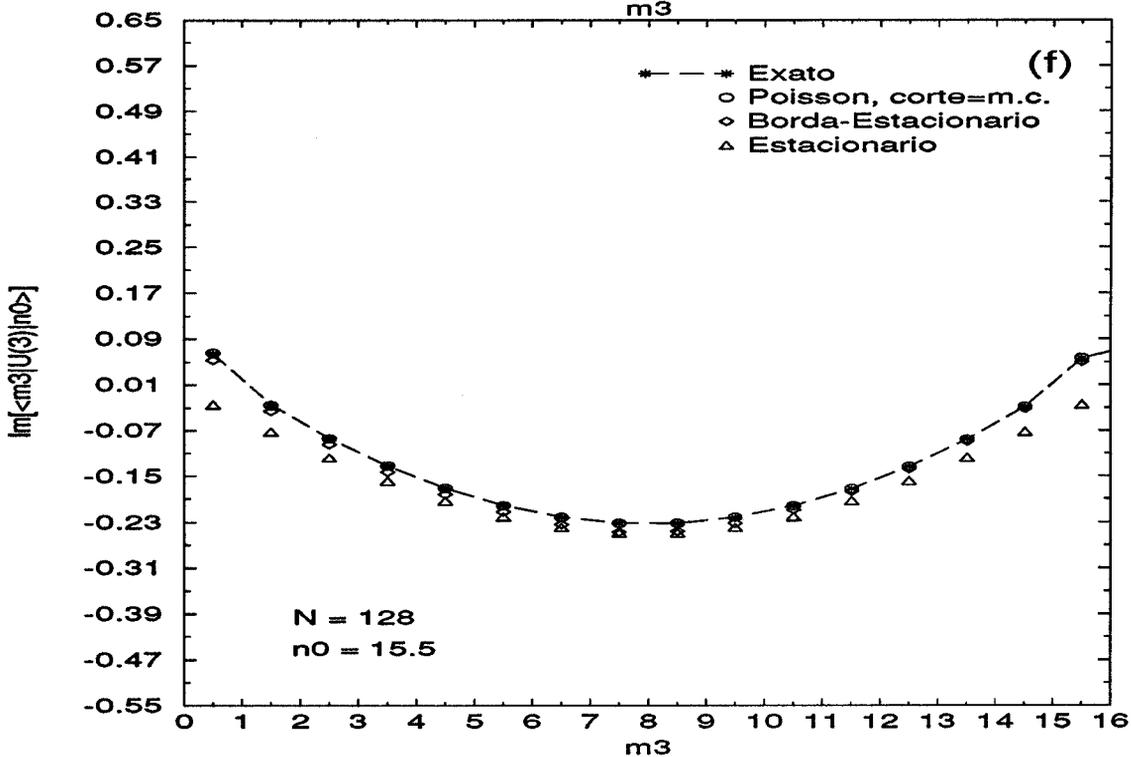
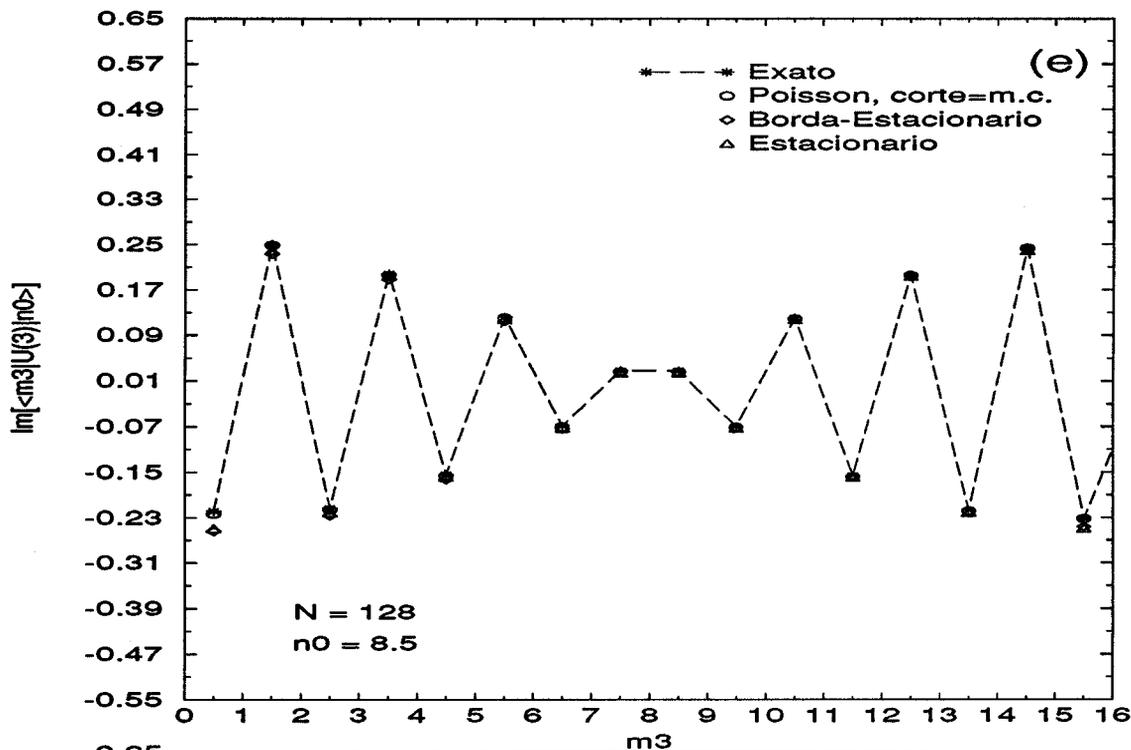
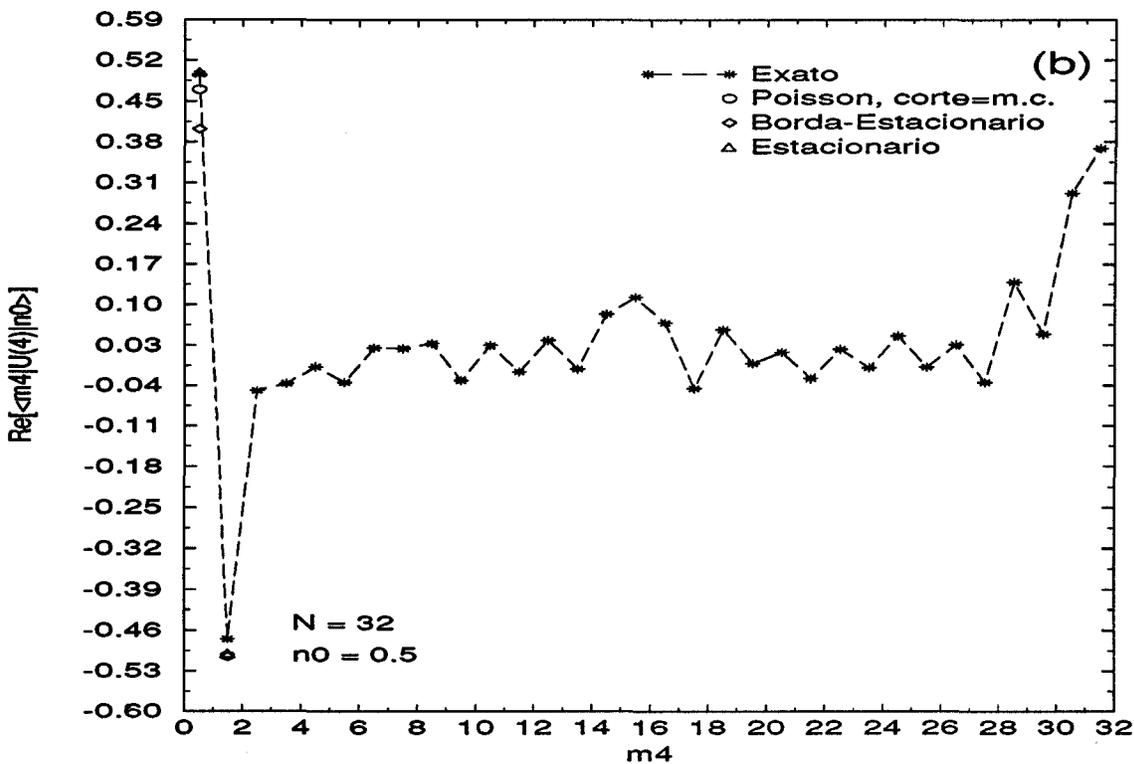
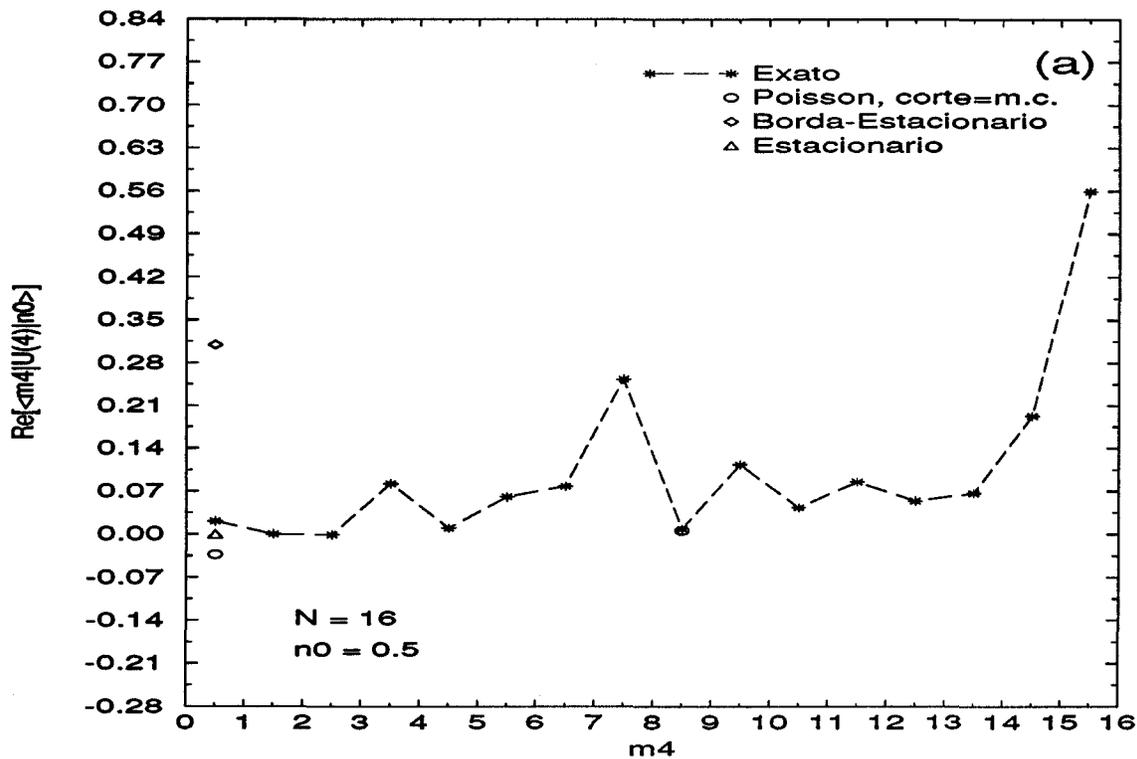


Figura 5.7: As mesmas comparações da Figura 5.6 para a parte imaginária do propagador.



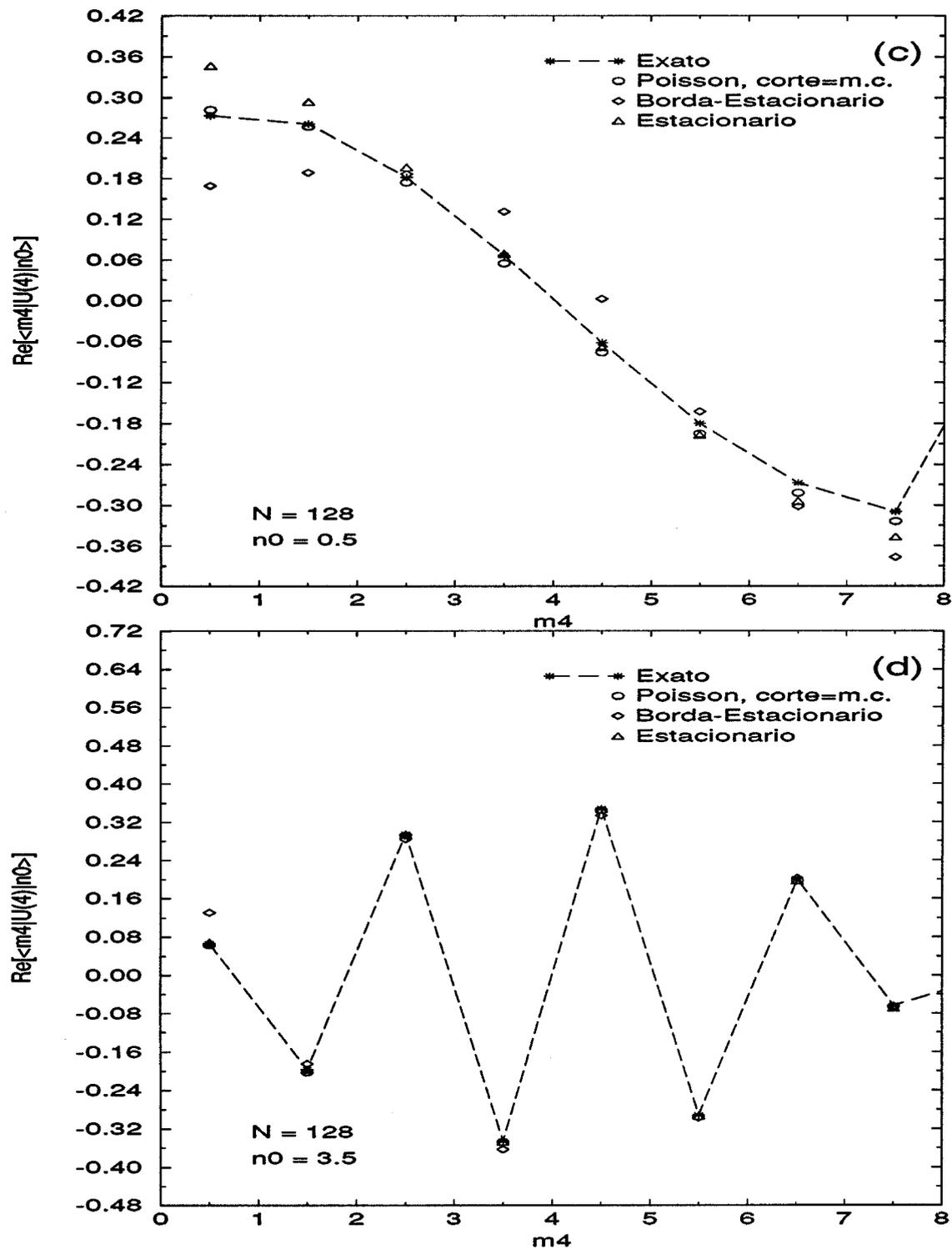
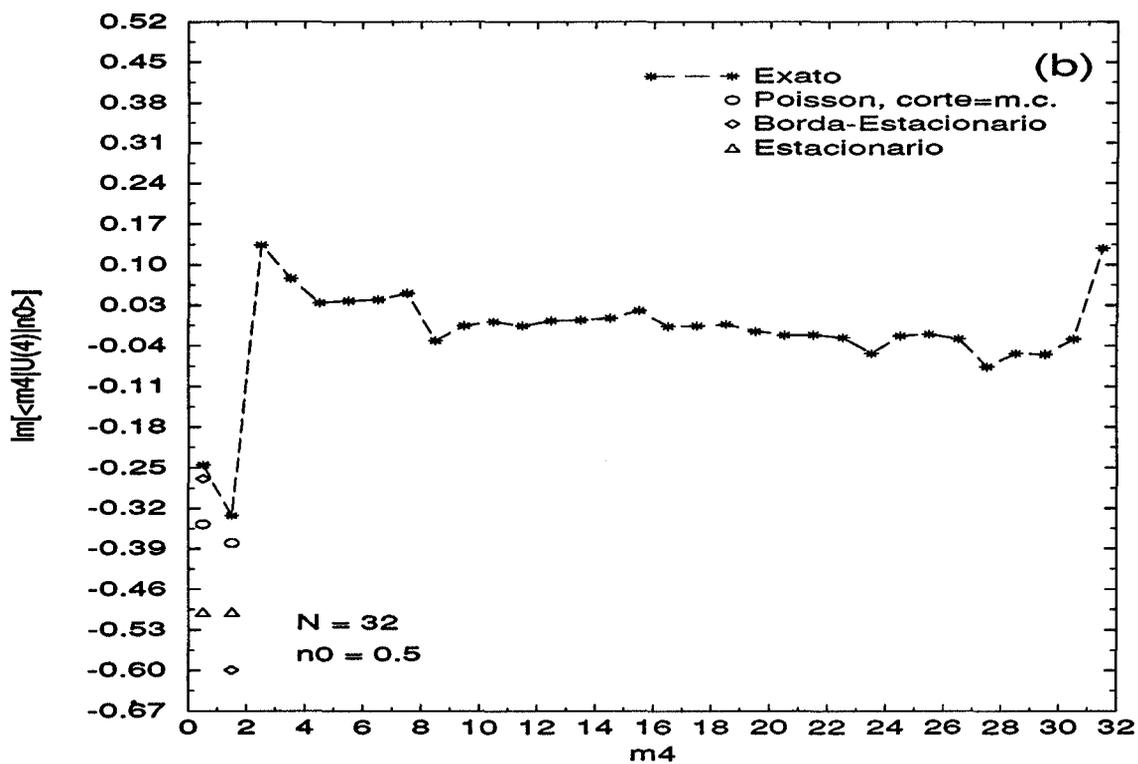
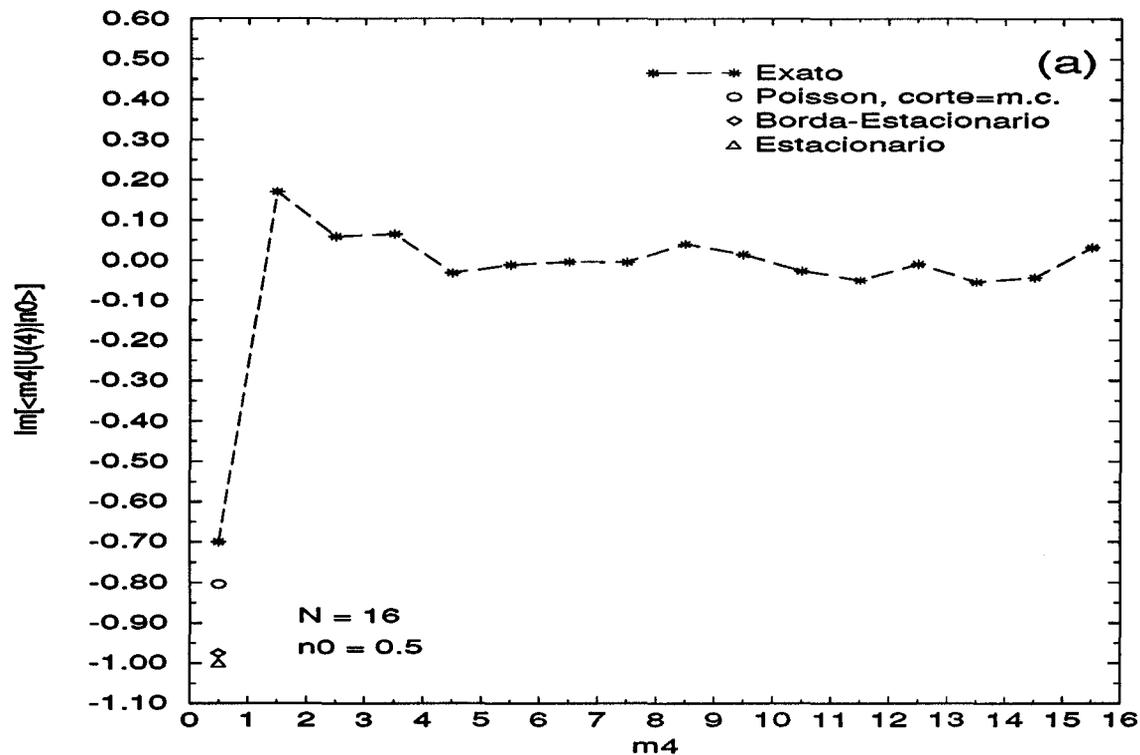


Figura 5.8: Comparação da parte real do propagador exato ( $l = 4$ ) com três aproximações diferentes, considerando-se vários valores de  $N$  e  $n_0$ .



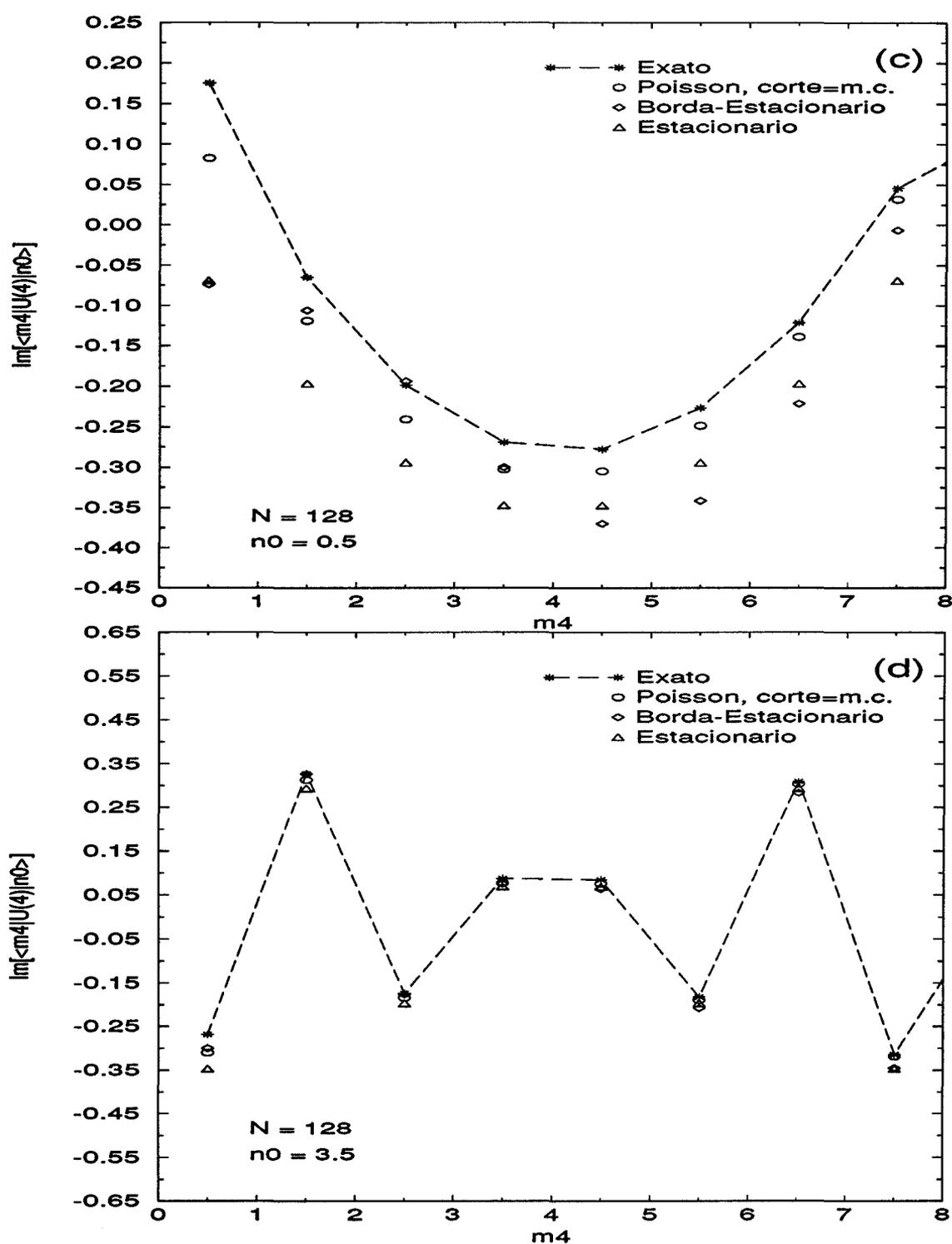
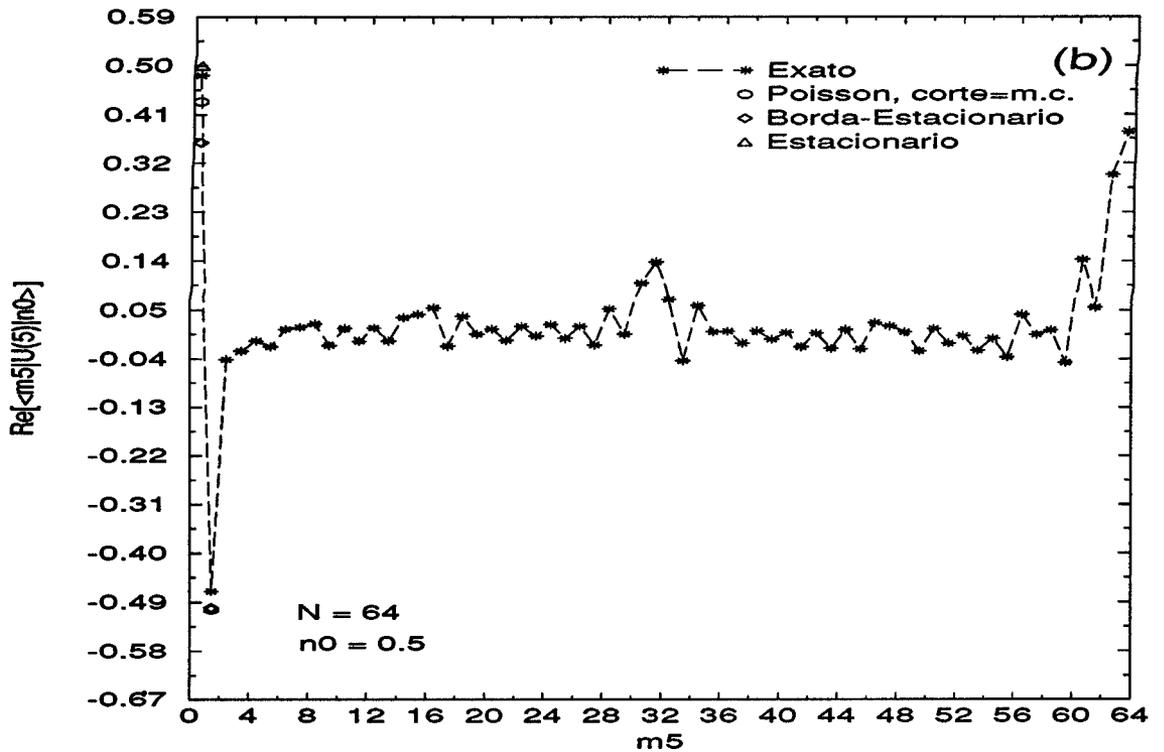
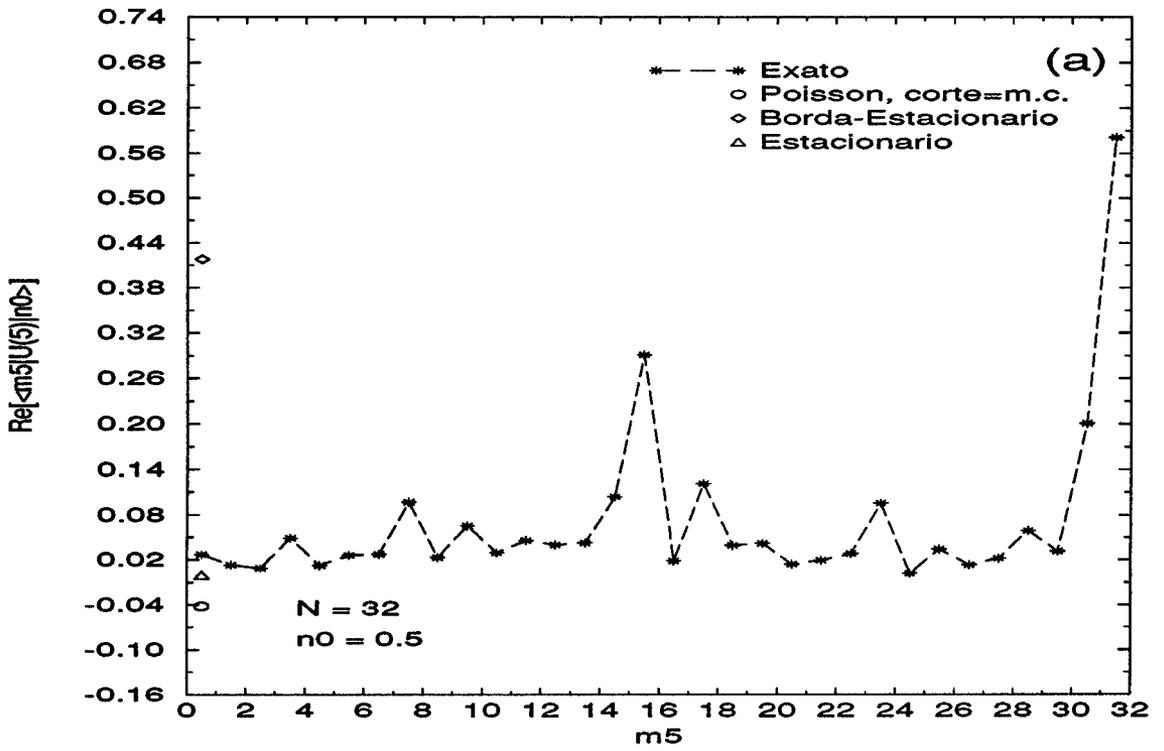


Figura 5.9: As mesmas comparações da Figura 5.8 para a parte imaginária do propagador.



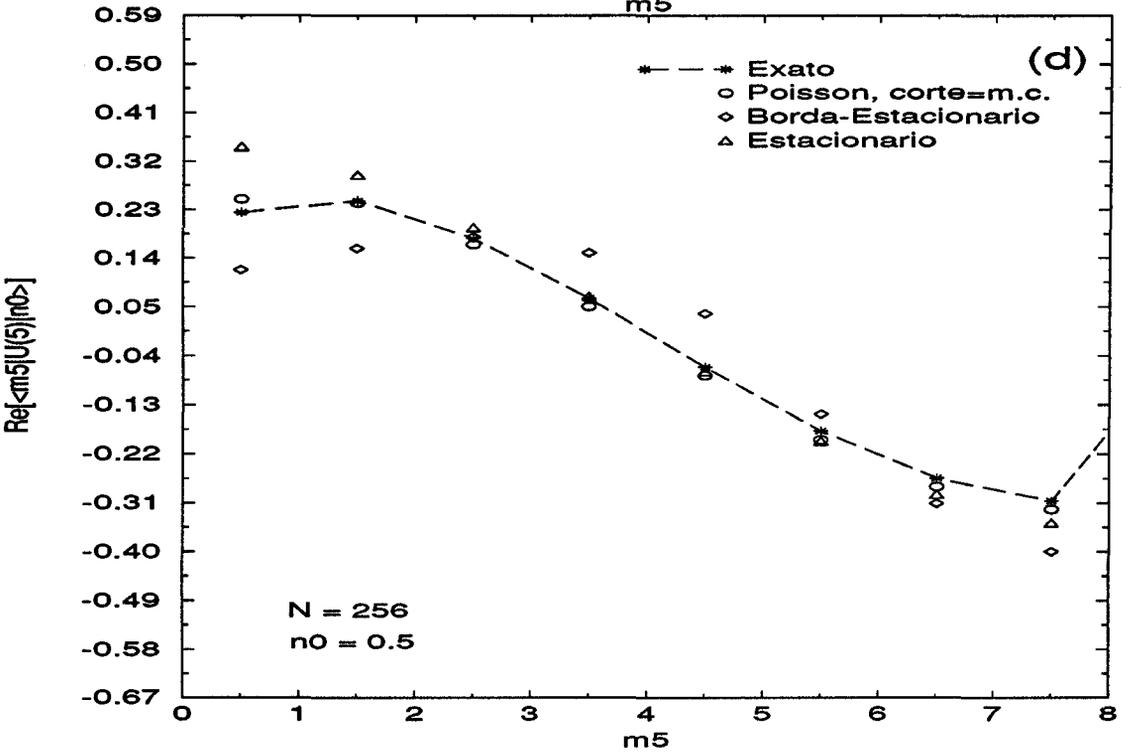
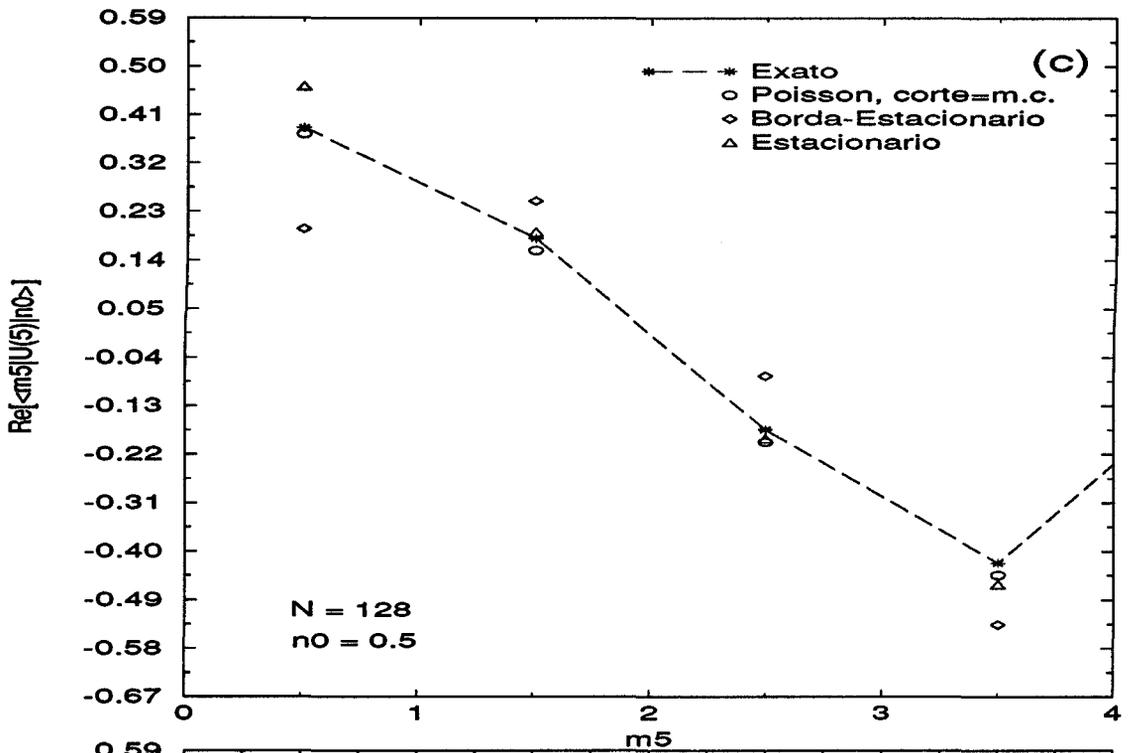
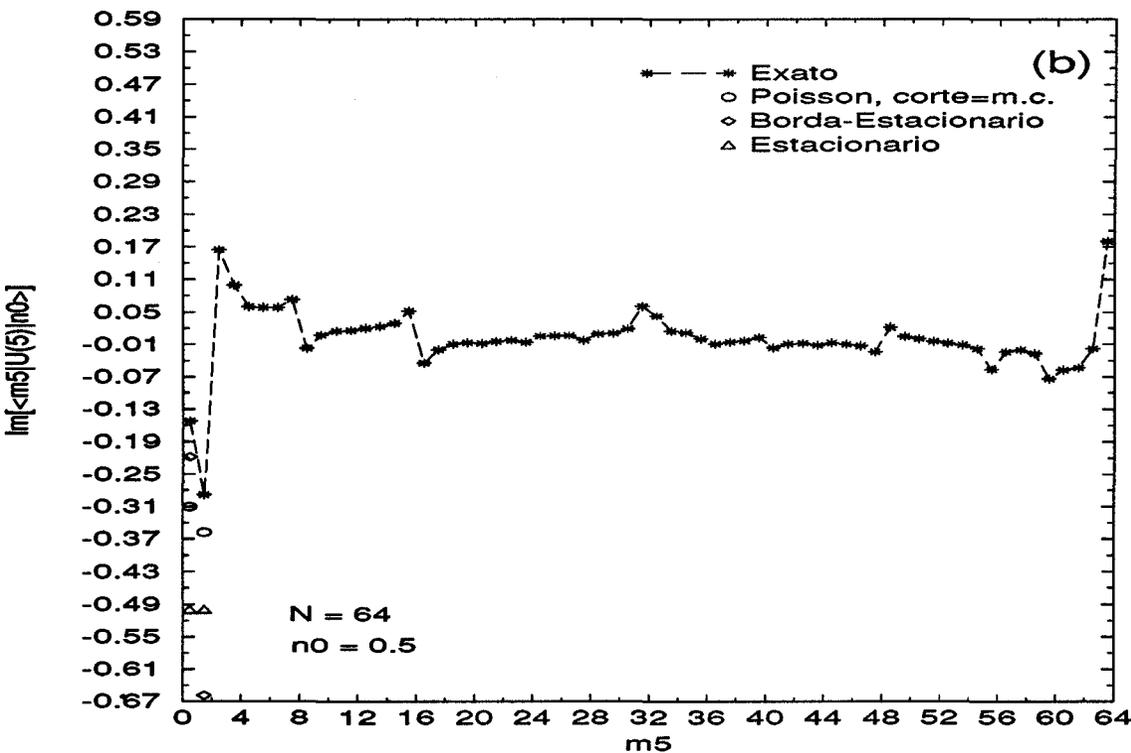
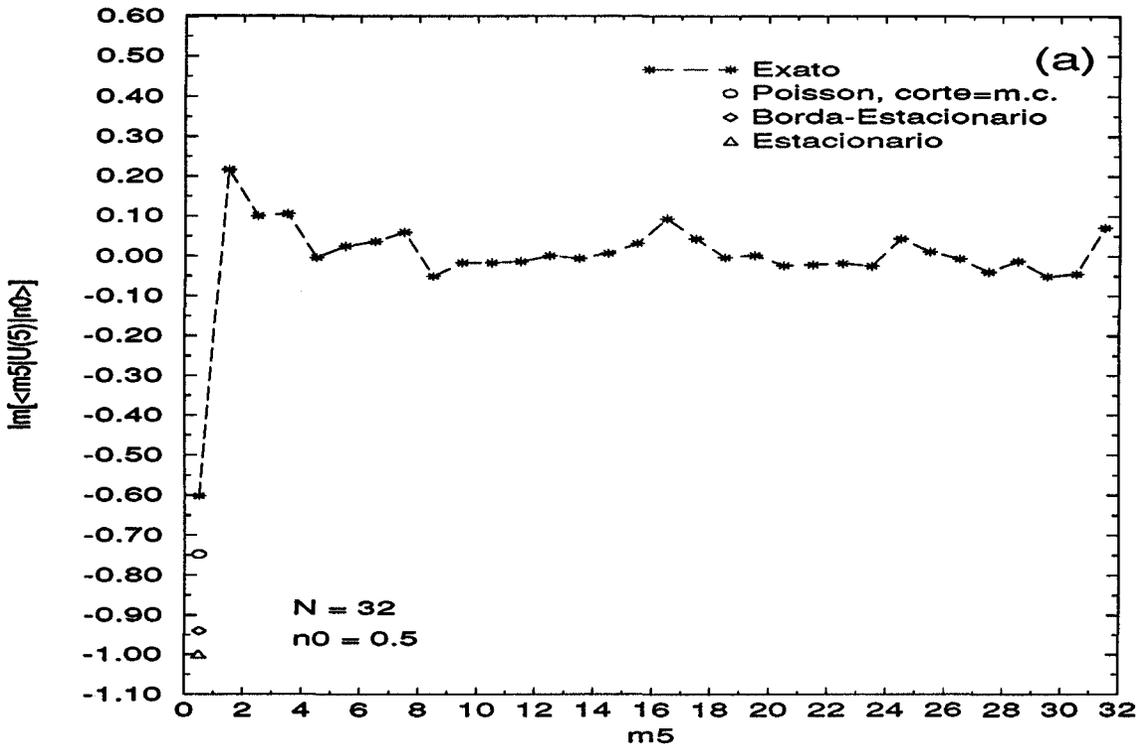


Figura 5.10: Comparação da parte real do propagador exato ( $l = 5$ ) com três aproximações diferentes, considerando-se vários valores de  $N$  e  $n_0$ .



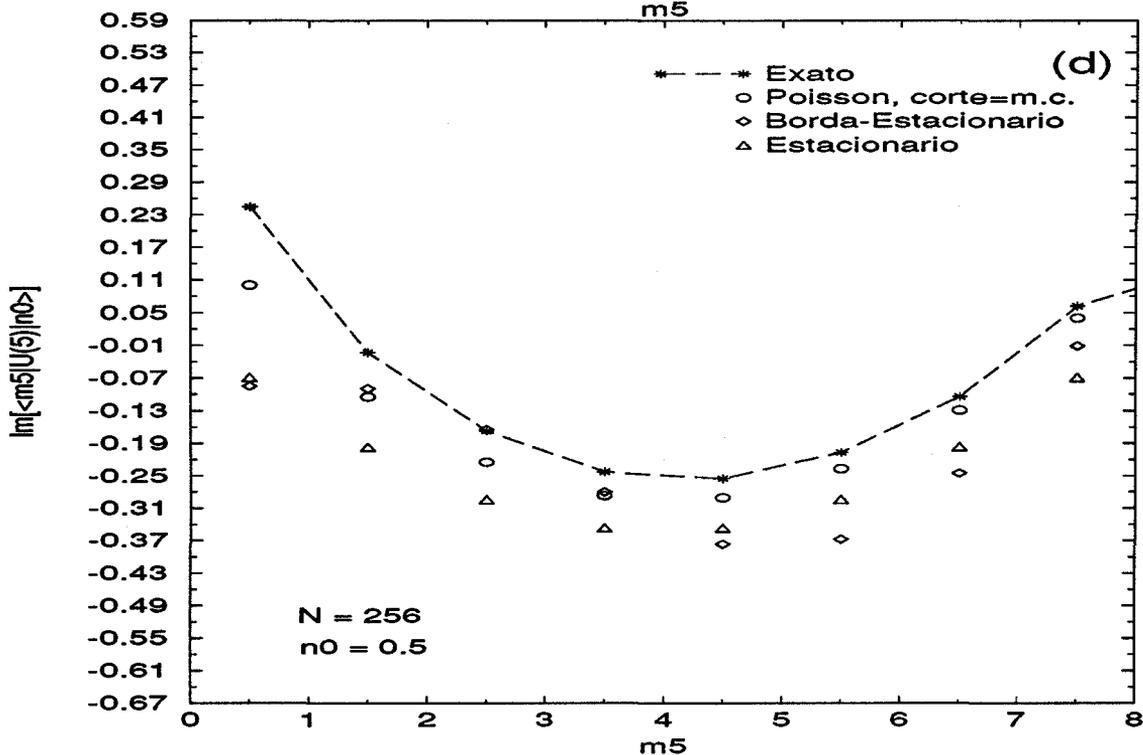
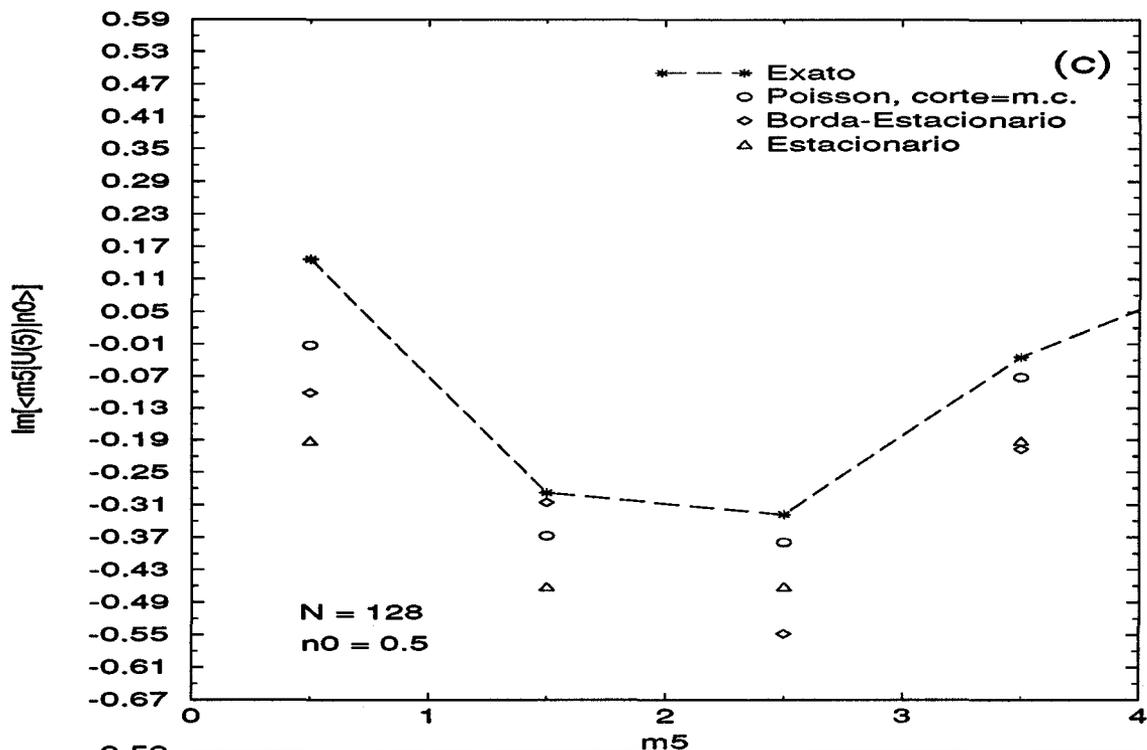


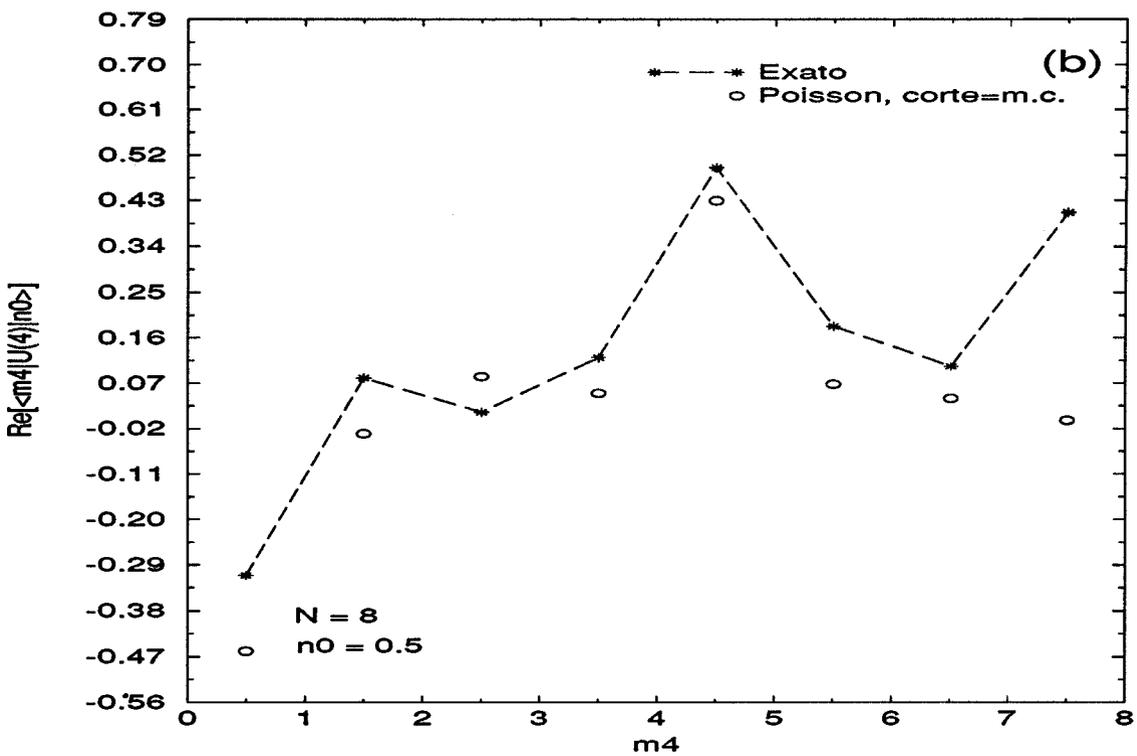
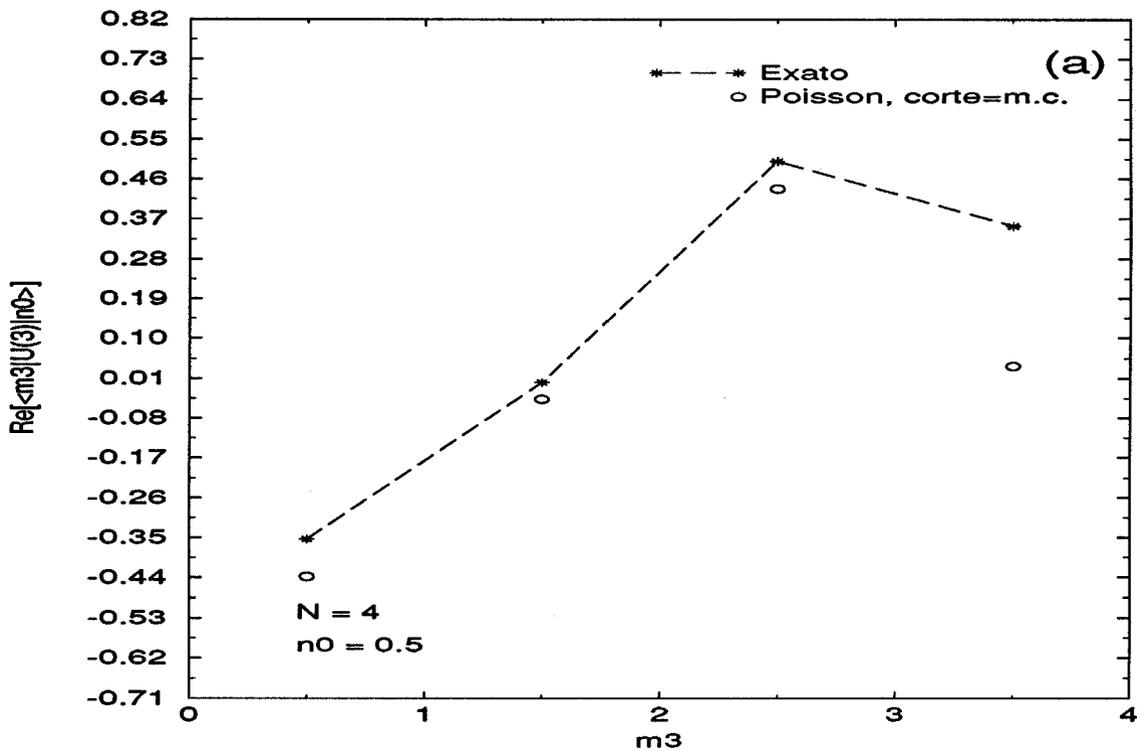
Figura 5.11: As mesmas comparações da Figura 5.10 para a parte imaginária do propagador.

Da análise dos gráficos, verificamos que na média tanto o propagador estacionário quanto o propagador borda-estacionário têm a mesma concordância com o resultado exato, um não sendo melhor que o outro (a única exceção é o melhor resultado da aproximação estacionária em relação à borda-estacionária, para a parte real do propagador, quando  $N = N^*$ ). Também verificamos, que a soma de Poisson com corte=m.c., é um pouco melhor que as outras duas aproximações, isto podendo ser melhor visto nas Figuras 5.6, 5.7, 5.8 e 5.9 (c); nas Figuras 5.10 e 5.11 (d) e nas Figuras 5.6 e 5.7 (f).

Estes resultados nos sugerem o fato interessante de que não adianta tentarmos fazer uma aproximação melhor que a semiclássica usual, considerando eventuais termos de borda para apenas um termo da soma de Poisson, calculado nos pontos estacionários. Na verdade, sucessivos refinamentos no cálculo aproximado do propagador devem incluir contribuições oriundas de estruturas que não sejam apenas "pontos estacionários". Pois a aproximação estacionária, por si, já faz isto muito bem, além de parecer dar conta de algo mais: uma média do comportamento dos outros termos, não estacionários, da soma de Poisson.

Este nosso raciocínio fica também apoiado pelo melhor resultado do truncamento da soma de Poisson com corte=m.c., comparado ao borda-estacionário, uma vez que no primeiro estamos levando em consideração as contribuições das regiões não-hachuradas da Figura 5.1, o que não fazemos no segundo.

Por fim, apresentamos para  $l = 3, 4$  e  $5$  a comparação entre o propagador exato e a soma de Poisson truncada com corte=m.c. para  $N = N^*/2$ , isto é, para tempos maiores que o "log-time". Os resultados são mostrados nas Figuras 5.12 e 5.13.



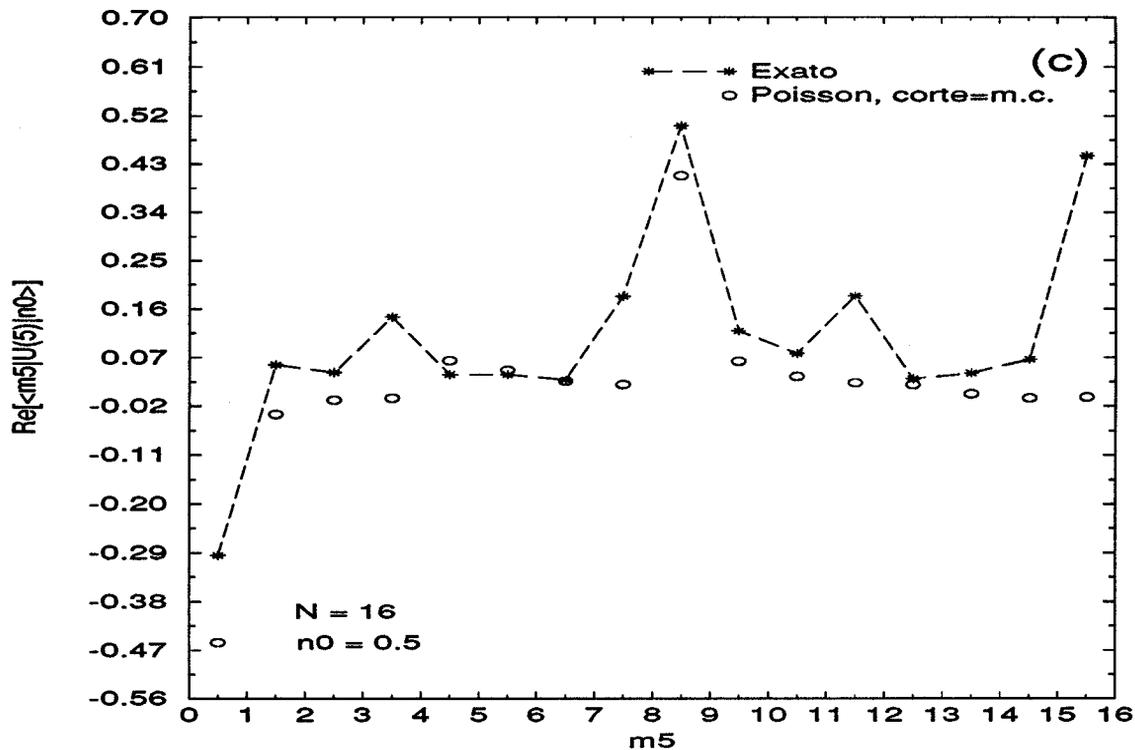
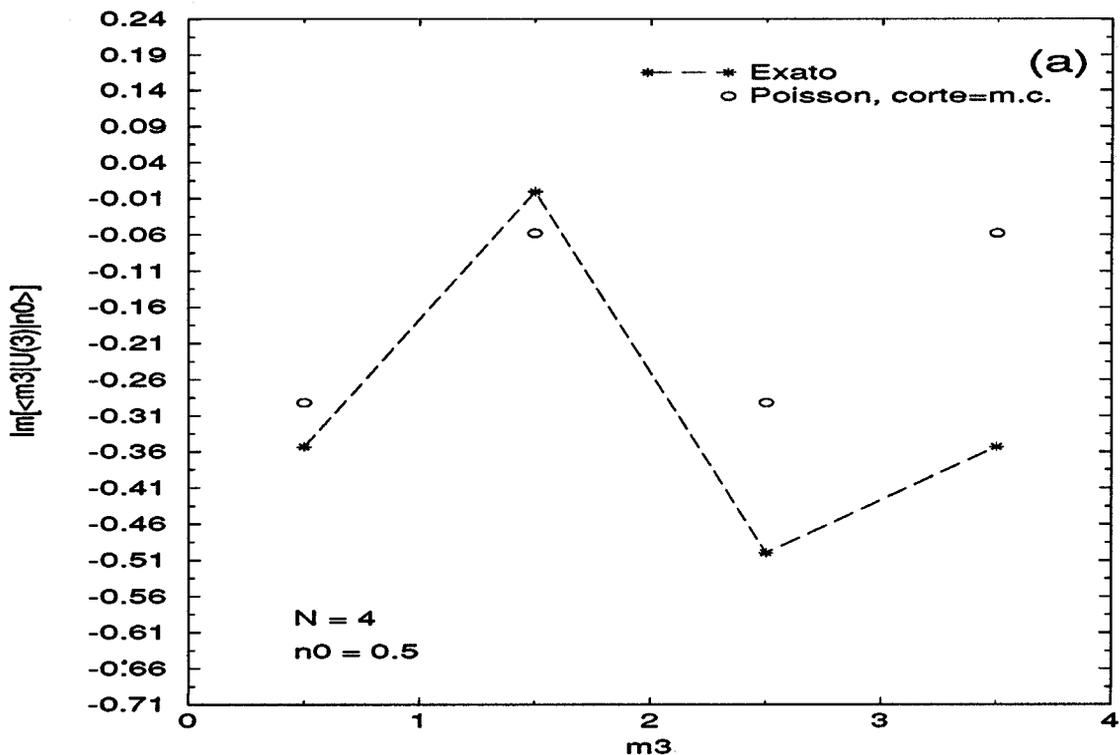


Figura 5.12: Comparação da parte real do propagador exato e a soma de Poisson com corte=m.c., considerando-se  $N = N^*/2$  para  $l = 3, 4$  e  $5$ .



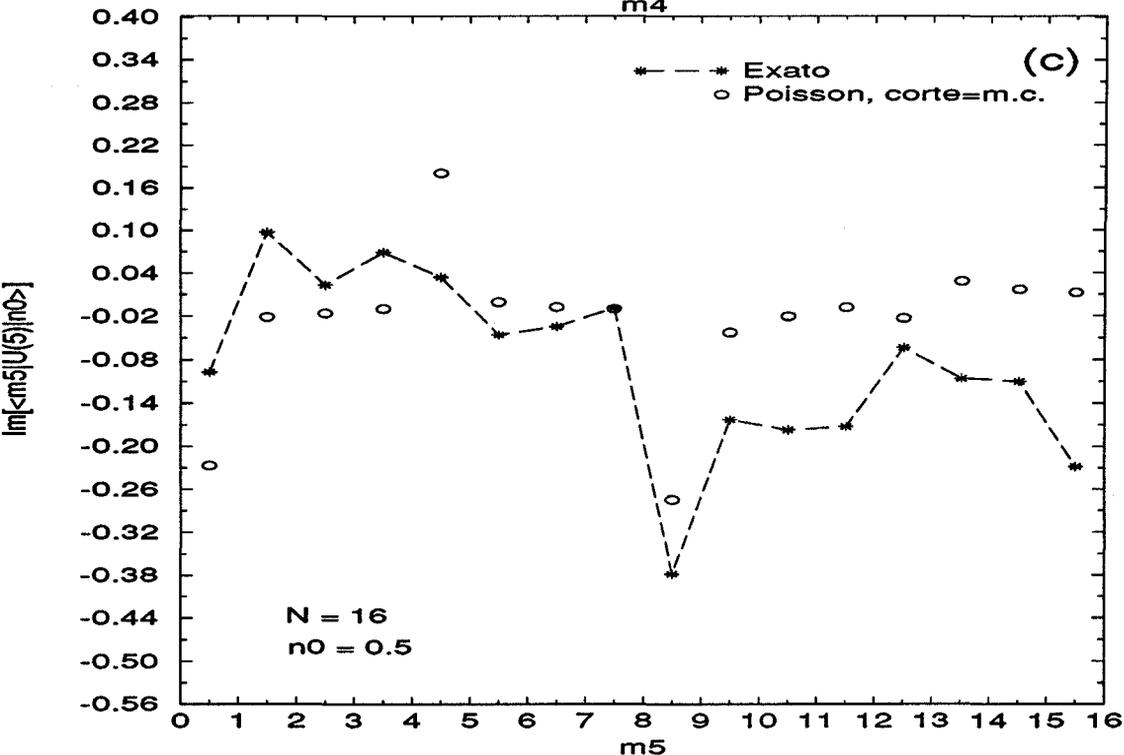
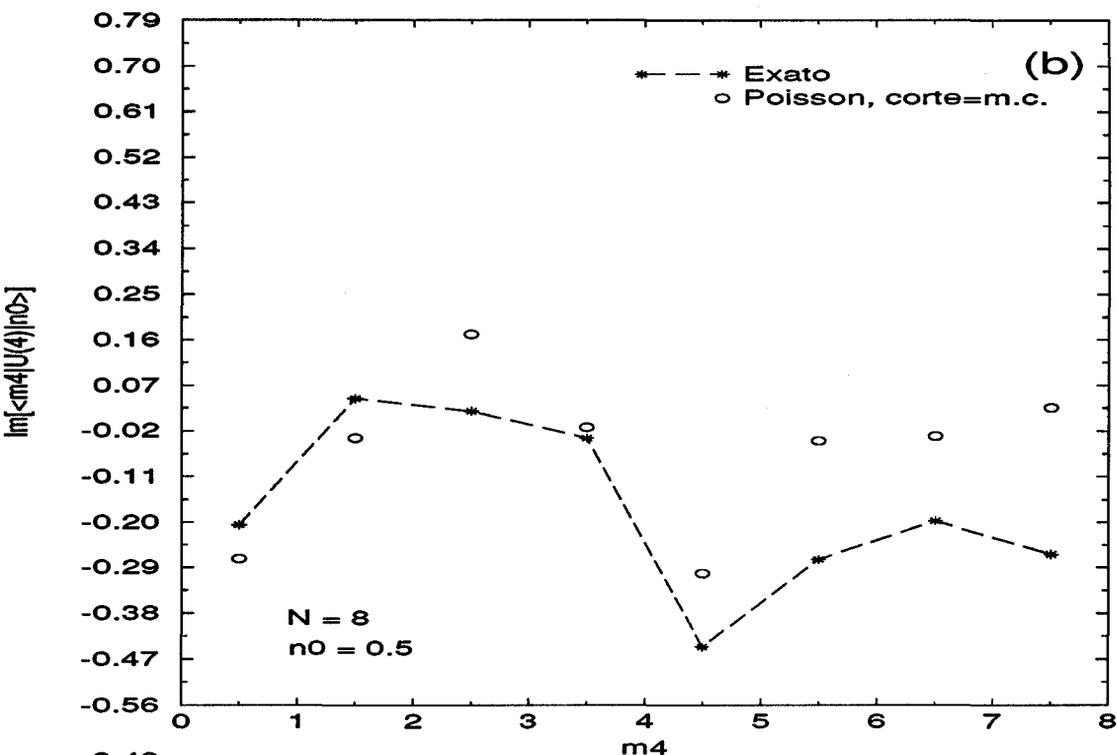


Figura 5.13: As mesmas comparações da Figura 5.12 para a parte imaginária do propagador.

### 5.3 O Traço do Propagador

O traço do propagador é de grande interesse no entendimento de caos quântico. Por um lado, é uma espécie de “suavização” do propagador, uma vez que é dado pela integral sobre as variáveis de posição e/ou momento deste. Por outro, sua transformada de Fourier fornece a densidade de estados do sistema quântico, objeto de estudo da famosa fórmula do traço de Gutzwiller [29].

No contexto do mapa do padeiro, seu interesse aumenta ainda mais, face aos resultados obtidos para seu cálculo, via aproximação semiclássica. O’Connor e Tomsovic [30] mostram bons resultados numéricos para o traço do propagador, considerando tempos muito além do “log-time”. Face a isto, sugere-se em [31] que o limite para a quebra da validade da aproximação semiclássica não seja dada por uma relação logarítmica, mas sim por uma relação do tipo linear.

Ozorio de Almeida e Saraceno [11] foram capazes de derivar uma expressão para o traço do propagador, a partir do propagador semiclássico (3.10). Basicamente, tomaram uma transformada de Poisson dupla da eq. (3.12), com  $\langle m_l | U^l | n_0 \rangle$  sendo dado por (3.10), e depois, efetivaram as integrações via método de fase estacionária. O resultado obtido é

$$\text{Tr}(U^l) \approx \sum_{\nu} U_{\nu}, \quad (5.54)$$

onde o somatório corre sobre  $\nu$  definido na Seção 2.1. Com exceção de  $\nu = 00 \dots 0$  e  $\nu = 11 \dots 1$ ,  $U_{\nu}$  é dado por

$$U_{\nu} = \frac{\sqrt{2^l}}{2^l - 1} \exp[2\pi i N S_{\nu}], \quad (5.55)$$

com  $S_{\nu}$  definido em (2.7). Portanto, o traço do propagador calculado semiclassicamente é escrito unicamente em função das órbitas periódicas do mapa clássico. A contribuição dos dois  $\nu$ 's faltantes pode ser calculada diretamente dos correspondentes elementos de matriz da soma em (3.12) (sendo  $\langle m_l | U^l | n_0 \rangle$  substituído pelo propagador semiclássico).

Analogamente ao que foi feito para o propagador, podemos também, para nossa fórmula exata do traço, eq. (3.14), truncar a soma de Poisson, considerando um corte=m.c., ou desenvolver uma aproximação borda-estacionária. Para isto, precisamos primeiramente encontrar os  $K$ 's e  $L$ 's estacionários. É muito fácil verificar, a partir da expressão exata, que isto se verifica apenas se todos os valores dos parâmetros  $K$ 's e  $L$ 's forem iguais a zero. Desta forma, corte=m.c. corresponde a corte=0. Quanto aos  $\nu_j$ 's, não há nenhuma restrição sobre eles, portanto, devemos efetuar a soma sobre as órbitas simbólicas normalmente.

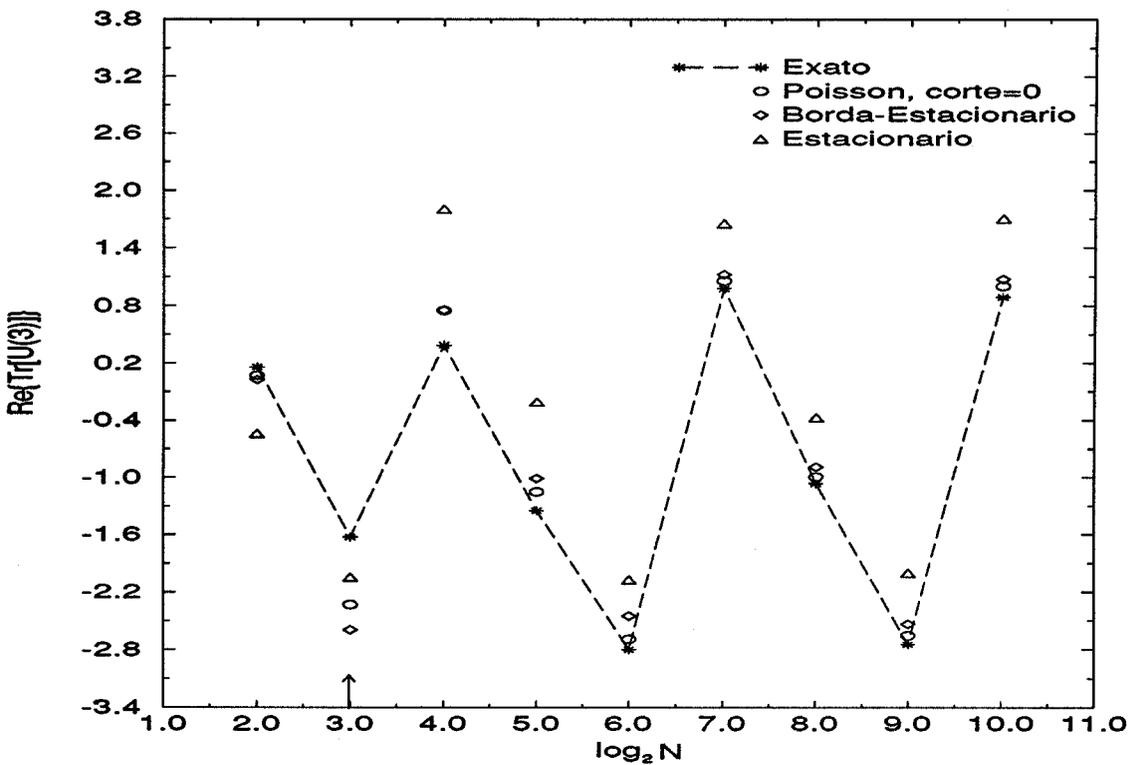
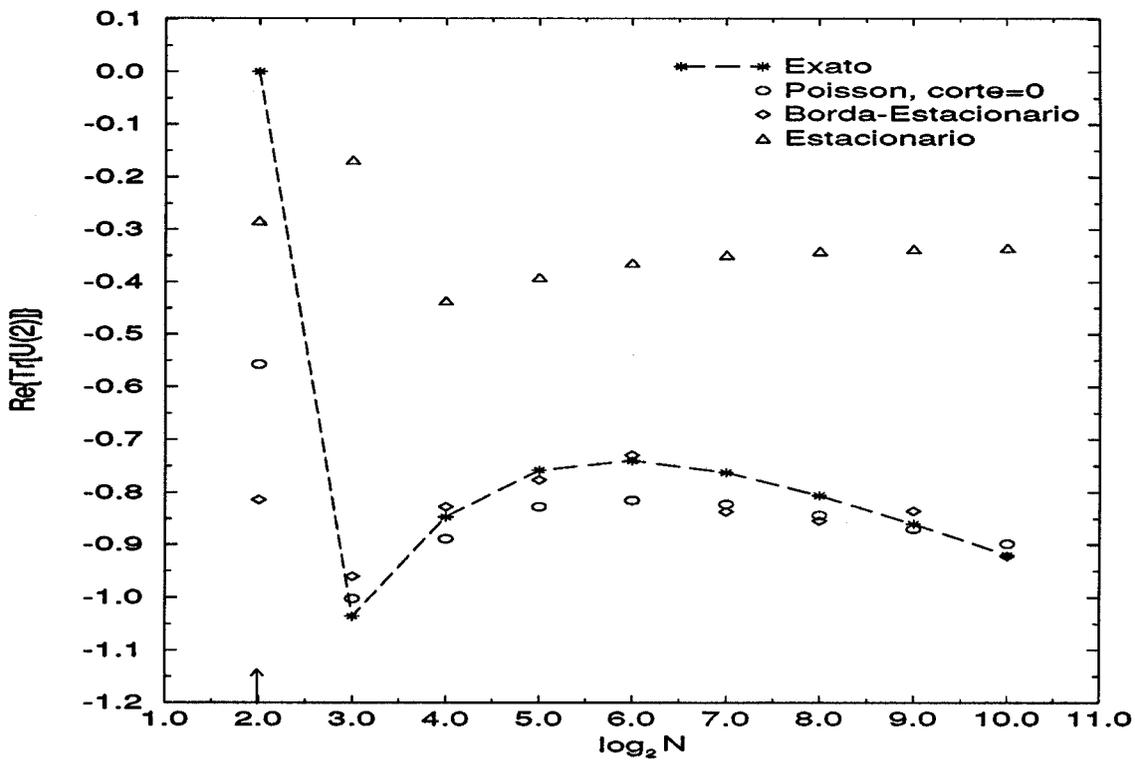
A obtenção do traço borda-estacionário segue os moldes do método desenvolvido na Seção 5.1. Integra-se as duas variáveis,  $p_j$  e  $q_{j-1}$ , obtendo-se a soma de funções  $\mathcal{I}$ , encontra-se os pontos estacionários para os argumentos das funções  $\mathcal{I}$ , toma-se as  $\mathcal{I}$ 's nestes pontos e passa-se então para a próxima etapa de integração. Com

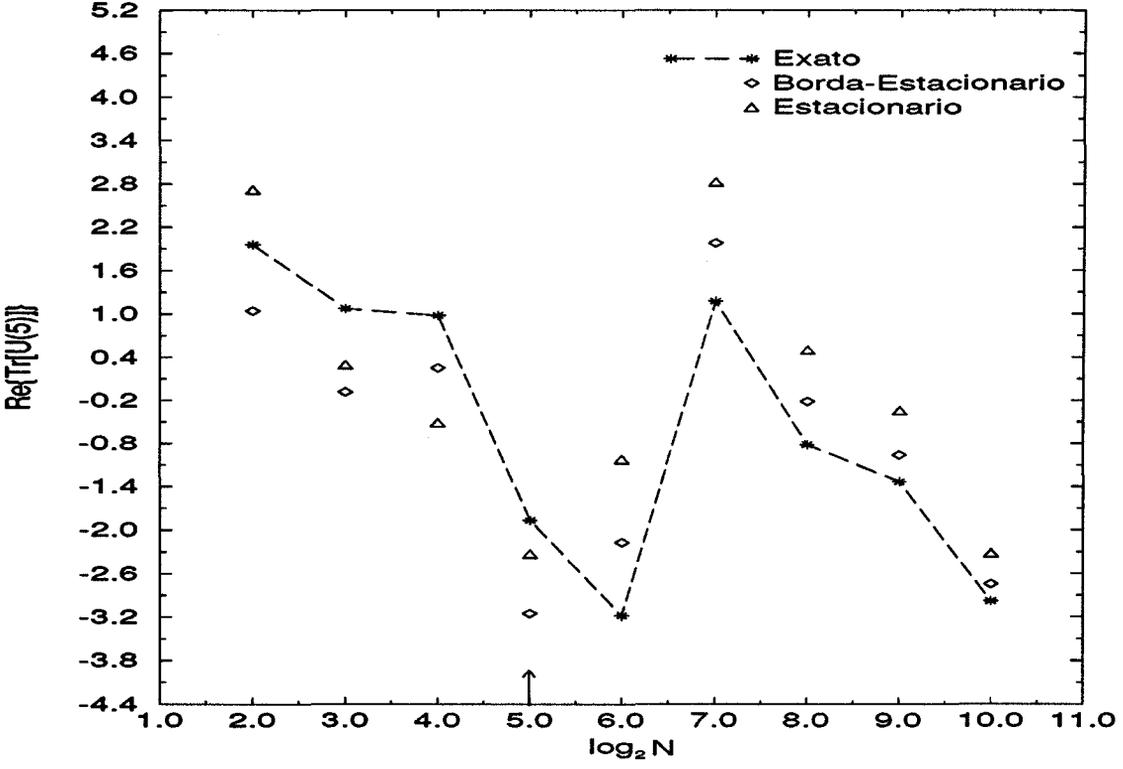
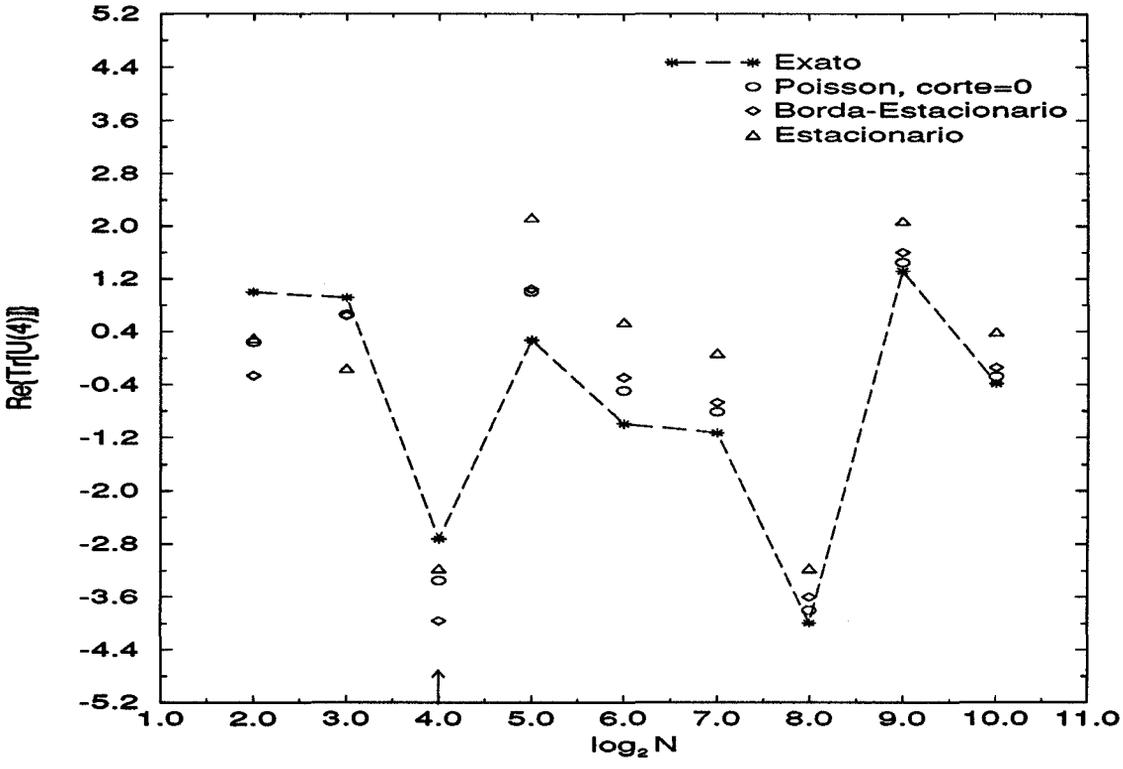
relação ao cálculo de Poisson truncado com corte=0, integramos analiticamente nas expressões o máximo de variáveis possível e depois, integramos numericamente as variáveis restantes. Como já visto no caso do propagador, os cálculos destas duas aproximações são mecânicos, não oferecendo maiores dificuldades, mas originam equações extremamente longas. Portanto, omitiremos aqui as expressões resultantes, mostrando apenas seus resultados gráficos.

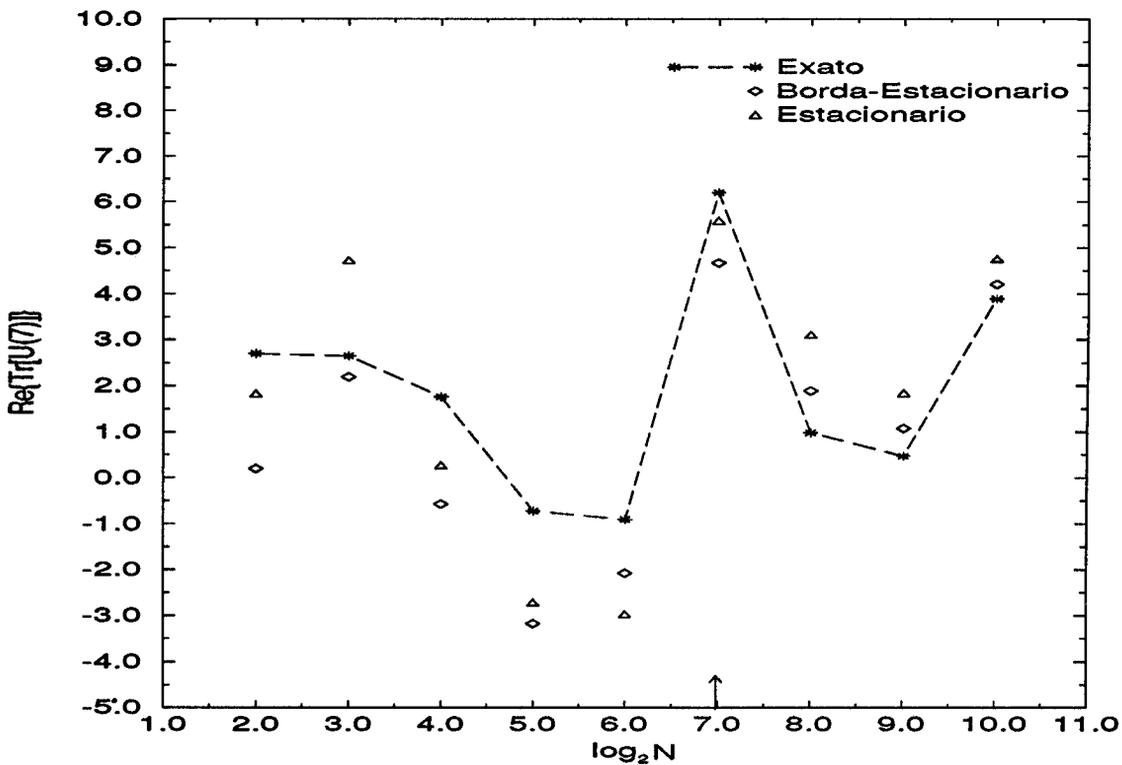
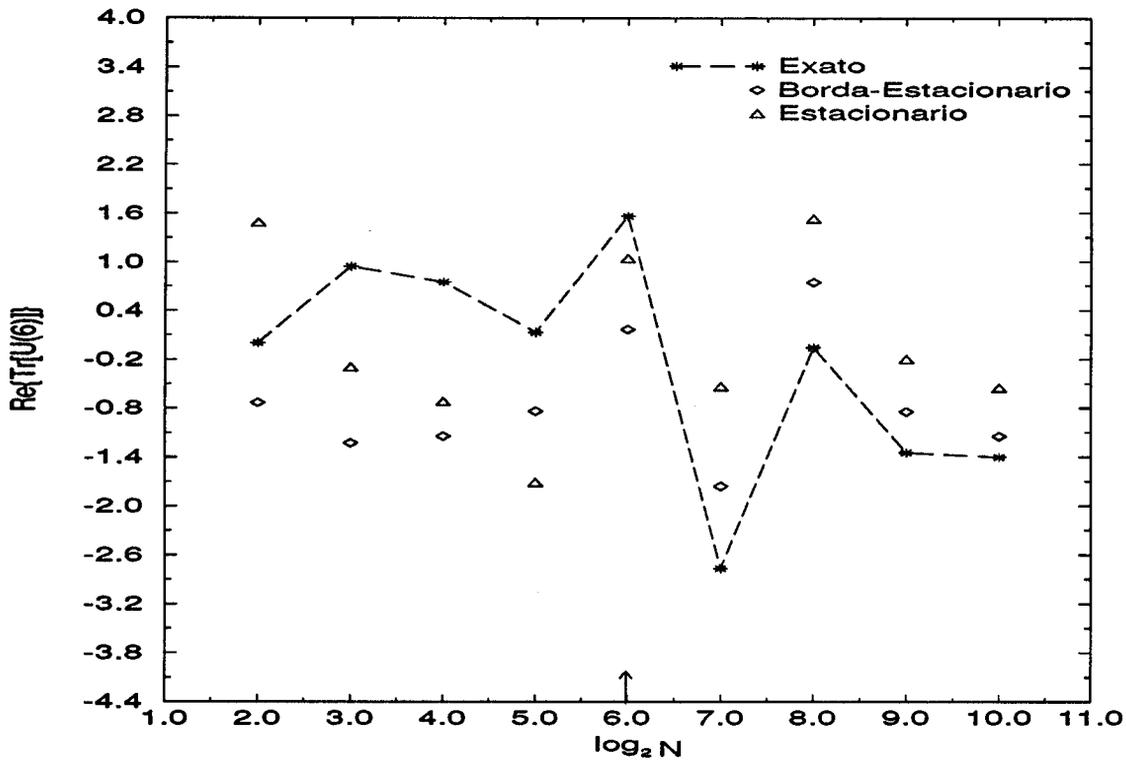
Nas Figuras 5.14 e 5.15 mostramos, respectivamente, as partes real e imaginária do traço do propagador para  $l = 2, 3, 4, 5, 6, 7$  e  $8$ ; comparando o caso exato com o Poisson truncado para corte=0 (calculado apenas para  $l = 2, 3$  e  $4$ ), o borda-estacionário e o estacionário. Os valores do traço, para um  $l$  fixo, são apresentados como função de  $N$ . No eixo dos  $N$ 's existem flexas indicando o "log-time", ou seja, à esquerda destas flexas estamos no limite de tempos maiores que o "log-time".

Os resultados obtidos são muito interessantes. Se olharmos inicialmente apenas para a aproximação semiclássica, observamos que tanto para tempos maiores quanto para tempos menores que o "log-time", ela apresenta a mesma ordem de concordância com o traço exato, resultado este já conhecido na literatura. Agora, quando consideramos a aproximação borda-estacionária, verificamos que é sempre melhor que a estacionária para tempos menores que o "log-time", ao passo que para tempos maiores que o "log-time" ora uma, ora outra é melhor.

Assim, o mapa, na verdade, parece sentir um "log-time", uma vez que um "refinamento" da aproximação semiclássica funciona para  $l < l^*$ , não ocorrendo o mesmo, entretanto, para  $l > l^*$ . Resultado esperado, caso realmente tivéssemos sensibilidade do sistema ao "log-time" pois a princípio, para  $l > l^*$ , o método estacionário não deveria funcionar e portanto, tal refinamento não teria sentido.







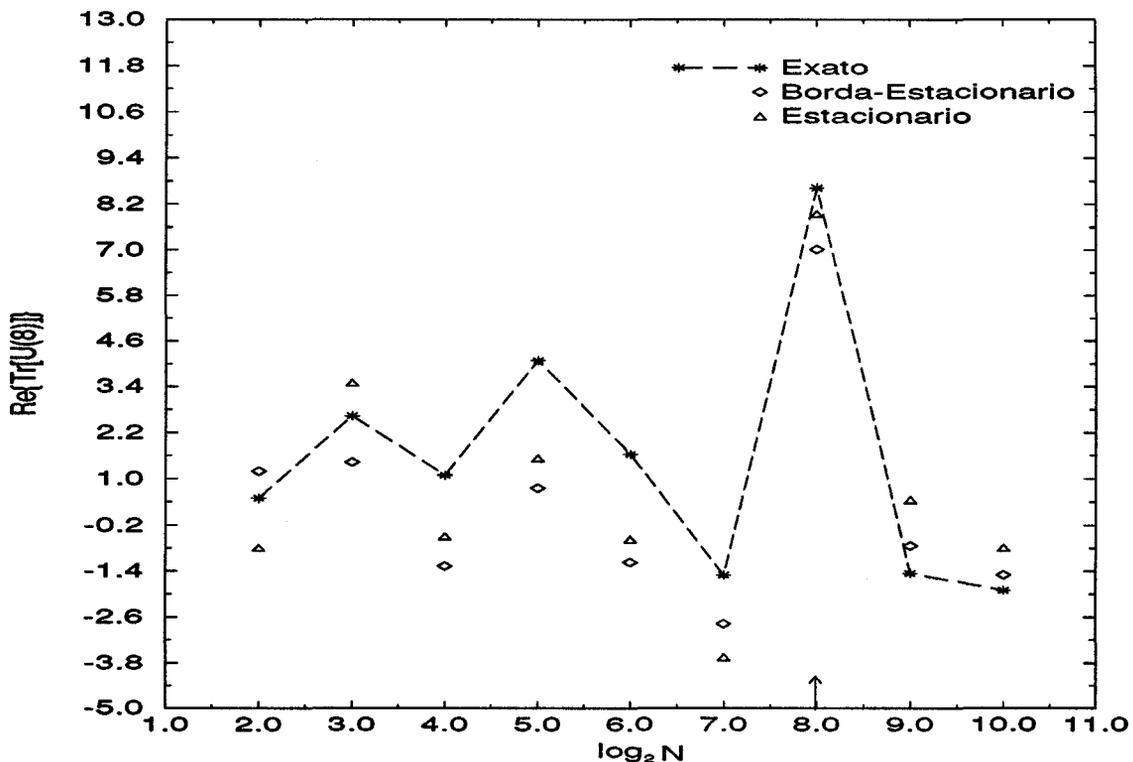
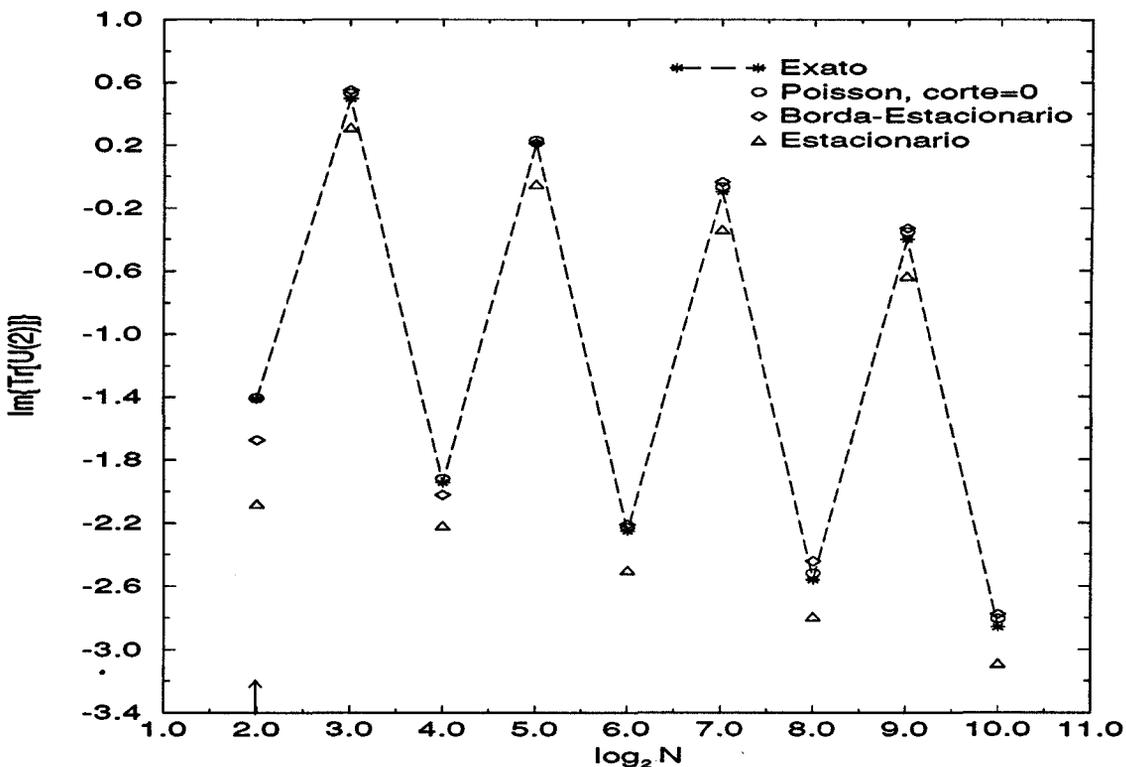
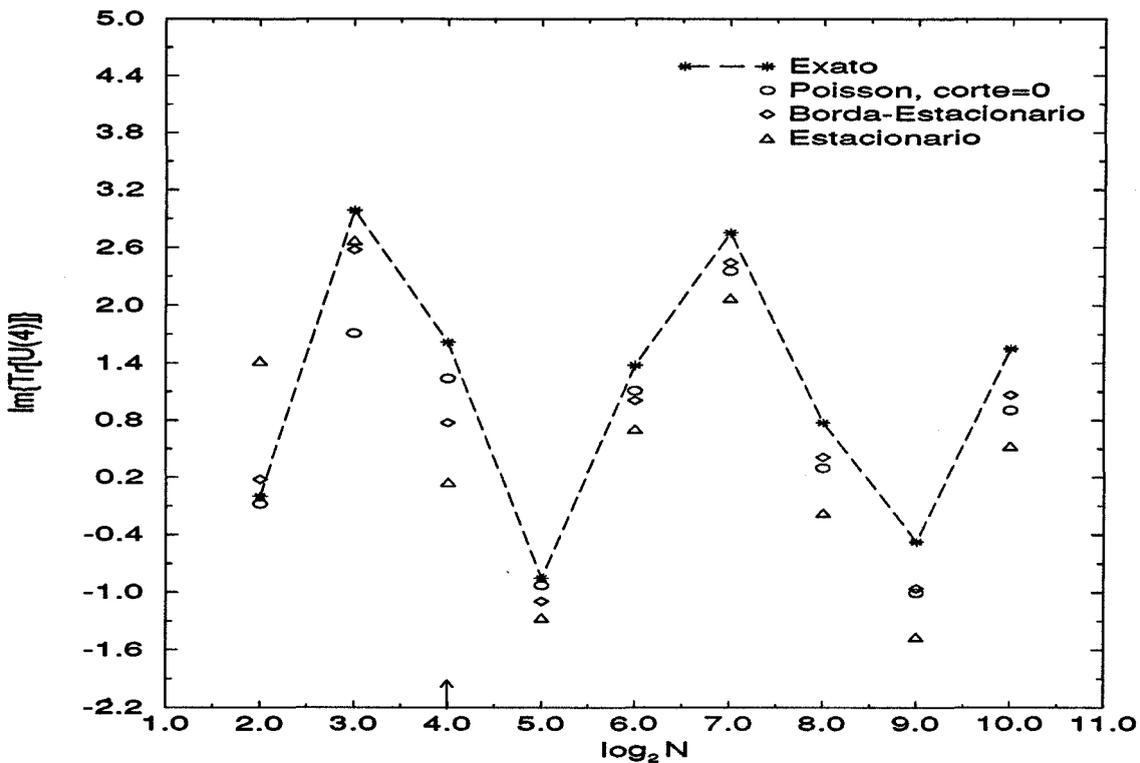
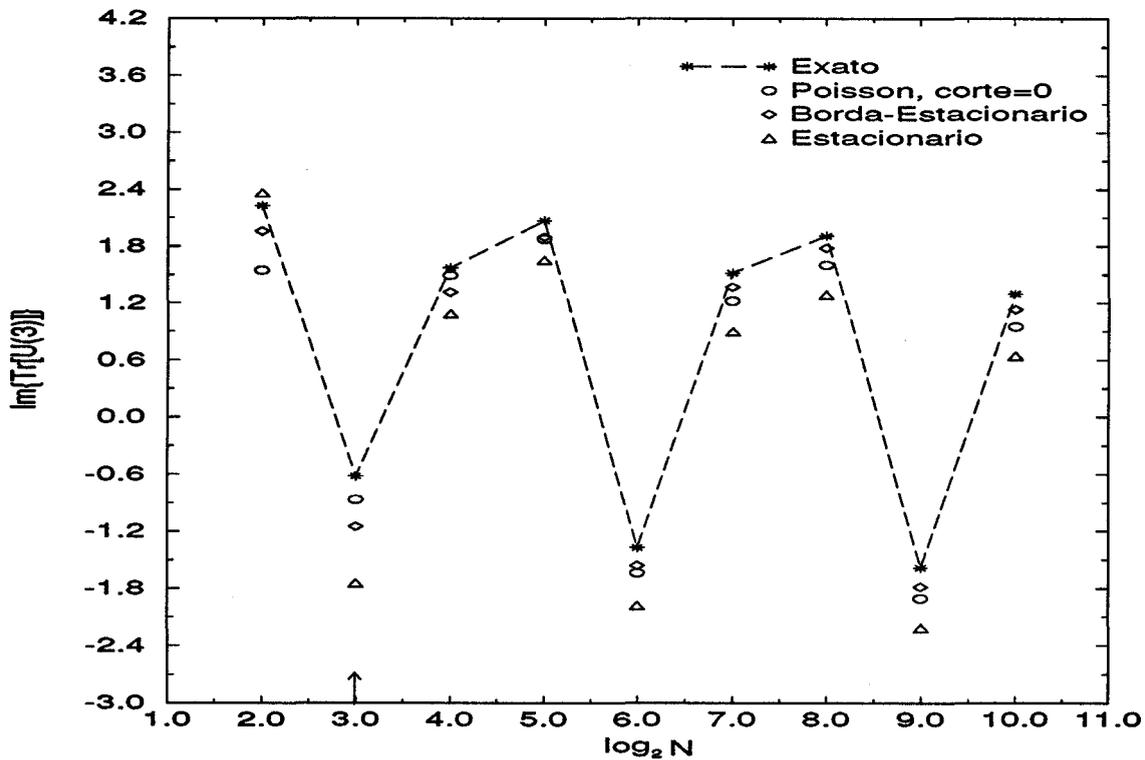
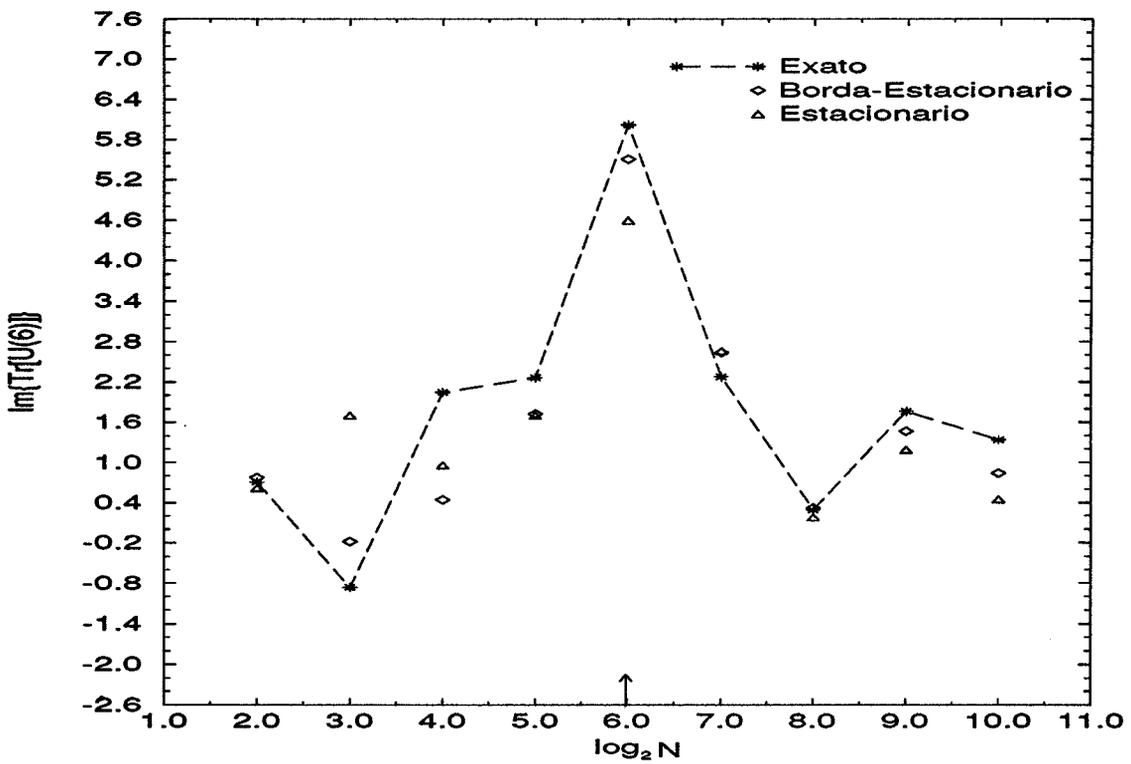
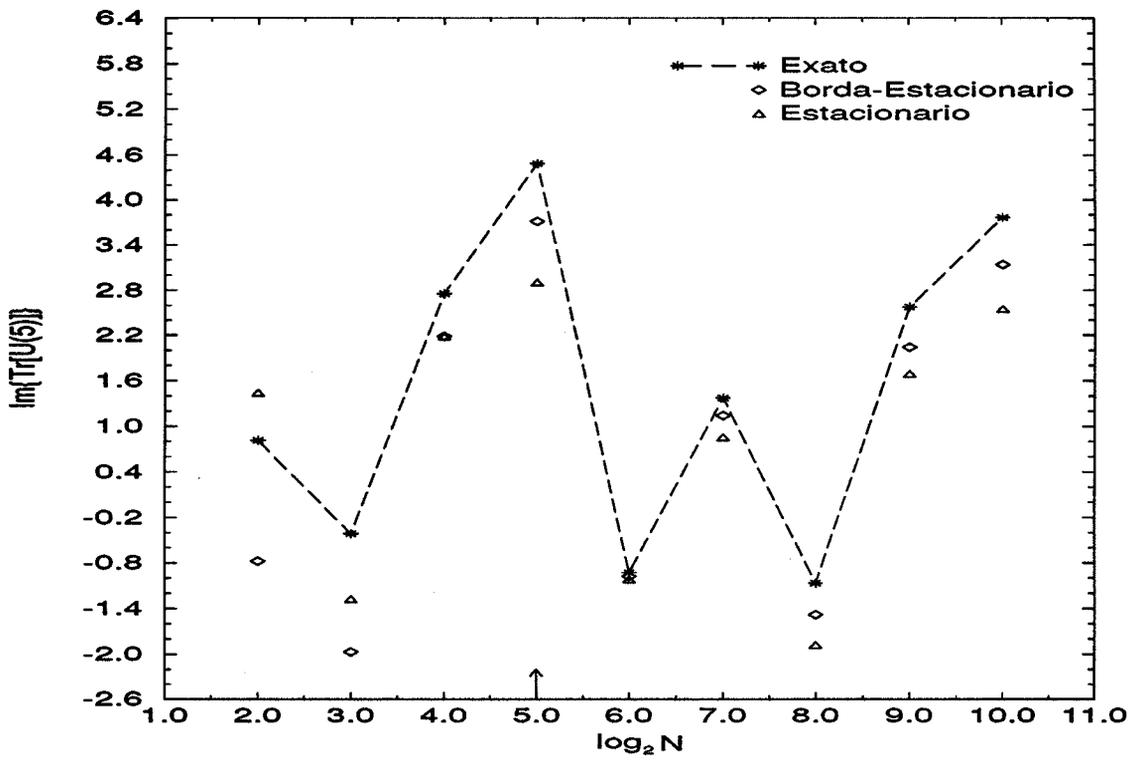


Figura 5.14: Comparação entre a parte real do traço exato e diferentes aproximações, considerando-se vários valores para  $l$ .







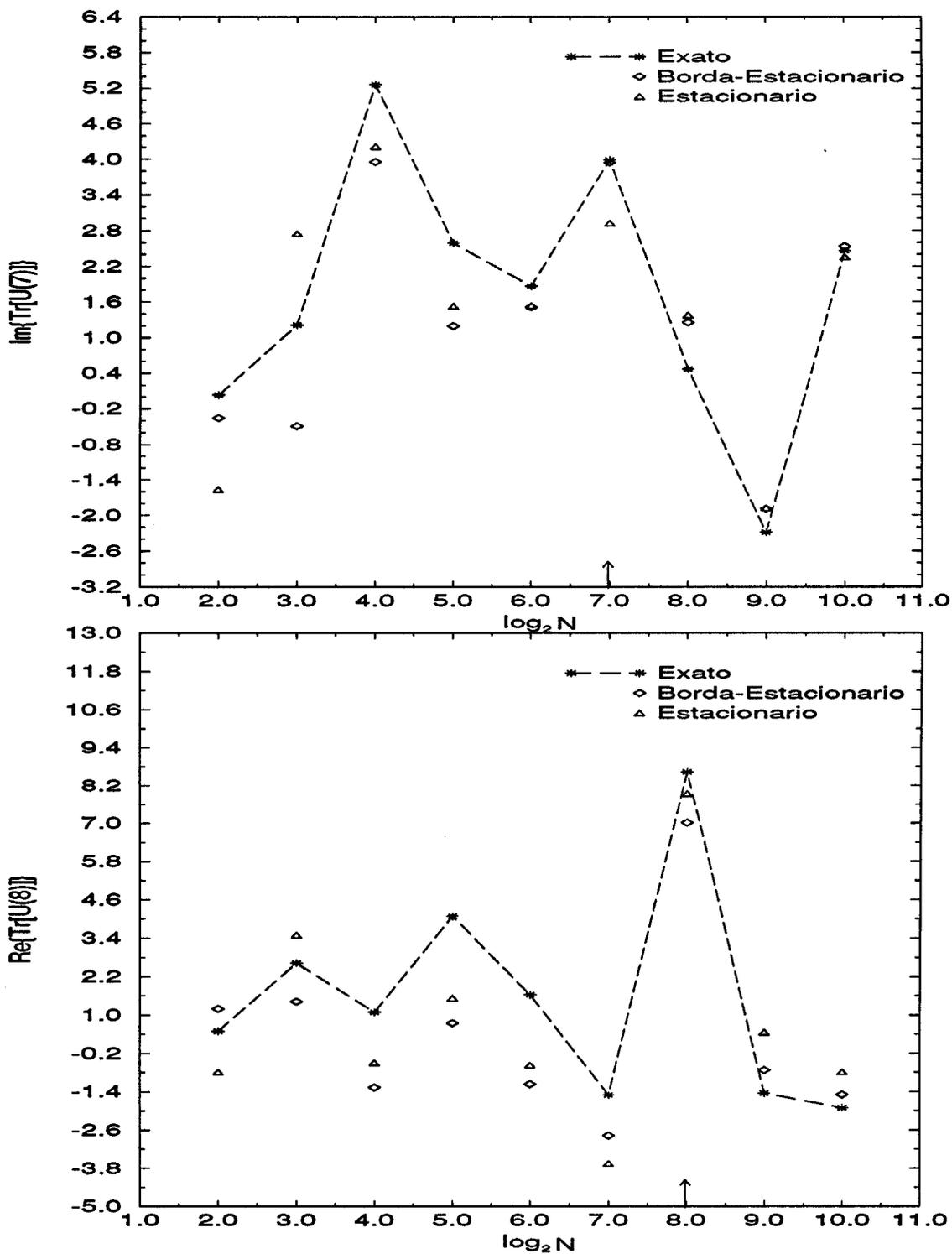


Figura 5.15: As mesmas comparações da Figura 5.14 para a parte imaginária do traço.

# Capítulo 6

## Conclusão

Neste trabalho desenvolvemos a quantização do mapa do padeiro em termos de integrais de caminho no espaço de fase. Isto foi feito por intermédio de transformações de Poisson, que introduziram somas infinitas nas expressões para o propagador e seu traço. Desta forma, os resultados nos colocam frente a uma soma infinita de integrais, mas que se mostram, ao serem truncadas, satisfatoriamente convergentes para a obtenção de bons resultados numéricos. Além disso, as deduções incorporaram naturalmente a dinâmica simbólica do caso clássico, introduzindo um somatório sobre toda a história comum da evolução de órbitas clássicas.

Os resultados semiclássicos de Ozorio de Almeida e Saraceno foram reobtidos, mas por um método que não incorpora as limitações da dedução usada por eles.

Uma grande vantagem do método repousa sobre o rápido reconhecimento das diversas contribuições ao propagador, ou seja, podemos entender os resultados em termos de ações no espaço de fase, identificando tanto contribuições de trajetórias clássicas como de caminhos puramente quânticos ‘a la Feynman’. Isto nos permitindo inclusive, desenvolver correções de ordem maior que as do propagador semiclássico.

De fato, propusemos uma aproximação, a qual chamamos de borda-estacionária, que considera apenas os pontos estacionários usuais, mas que leva em conta os efeitos do tamanho finito do espaço de fase do mapa do padeiro. Para o propagador, a aproximação borda-estacionária não deu melhores resultados que o semiclássico no caso de  $l < l^*$ . Já para traço, tal melhora foi observada para tempos menores que o “log-time”.

Implementamos também um algoritmo para a escolha dos termos a serem retidos no truncamento das somas de Poisson para nossas expressões do propagador e de seu traço. Este algoritmo permitiu-nos encontrar os termos da soma responsáveis pelas maiores contribuições (m.c.). Isto nos possibilitou discutir correções quânticas em termos das ações não-clássicas de m.c..

Os seis objetivos iniciais, listados na Introdução, foram de forma geral alcançados. Obviamente que algumas questões ficaram em aberto, e outras nem mesmo foram

discutidas. Acreditamos entretanto, que um trabalho não deve apenas responder questões sobre um assunto, mas também abrir novos caminhos para este mesmo assunto.

Nesta linha podemos então listar algumas perspectivas:

(i) Correções ao propagador semiclássico e seu traço - demos uma contribuição importante neste sentido, uma vez que mostramos, com nosso método, como considerar tais correções. Fomos capazes de obter melhores resultados para o traço para tempos menores que o “log-time” com a aproximação borda-estacionária do que com a semiclássica. Isto não ocorre para tempos maiores que o “log-time”, mostrando então uma espécie de sensibilidade ‘fraca’ do mapa ao “break-time”, ‘fraca’ pois os resultados semiclássicos neste limite ainda são razoáveis. Para o propagador, nada de novo com a aproximação borda-estacionária foi obtido para  $l < l^*$ . Porém não fizemos os cálculos no caso de  $l > l^*$ , sendo que uma tal extensão pode vir a esclarecer alguns aspectos do alcance de validade da aproximação semiclássica.

(ii) Estudo do propagador nas regiões não clássicas - onde não há trajetórias clássicas no espaço de fase, não podemos obviamente aplicar uma teoria semiclássica ao propagador. Isto portanto exige um tratamento diferente, sendo uma possibilidade o estudo do truncamento da soma de Poisson. Mostramos que para estas regiões certos ‘cortes’ da expressão exata, as m.c., podem dar bons resultados numéricos. Porém, não estudamos a interpretação destas ações que não advém de trajetórias clássicas. É curioso que existam caminhos ‘a la Feynman’ que possam contribuir mais que outros. A análise de tais ações e sua interpretação em termos clássicos (se houver) é uma boa linha de prosseguimento deste trabalho.

(iii) Por último, nosso enfoque pode ser generalizado facilmente e assim, ser aplicado a qualquer mapa no toro. Sem dúvida, sua utilização em outros sistemas pode trazer valiosas informações sobre o comportamento de sistemas caóticos a nível de Mecânica Quântica. Candidatos a isto seriam o rotor quicado [5], o mapa do gato [6] (interessante pois a aproximação semiclássica é exata), ou o mapa de Anosov [32].

Esperamos então, que nosso trabalho tenha lançado um pouco mais de luz sobre este sistema tão interessante e que os nossos principais desenvolvimentos aqui: integrais de caminho para mapas no toro, identificação de contribuições clássicas e puramente quânticas e correções de ordem maior ao propagador semiclássico; possam servir de subsídio para estudos futuros.

# Apêndice A

## Tempo e Constante de Planck na Aproximação Semiclássica

### A.1 Avaliação do “Break-Time”

Uma estimativa do “break-time” para um sistema geral pode ser dada através do princípio de incerteza [20].

Consideremos  $V(E)$  o volume do espaço de fase clássico com energia menor que  $E$ . Então, o número de estados quânticos contidos neste volume é dado por

$$N(E) = \frac{V(E)}{h^d}, \quad (\text{A.1})$$

onde  $d$  é o número de graus de liberdade do espaço de fase.

Tomando uma energia média  $E$ , o espaçamento médio  $\Delta E$  entre os níveis de energia é obtido de

$$N(E + \Delta E) - N(E) = 1. \quad (\text{A.2})$$

Agora, das eqs. (A.1) e (A.2), temos

$$\frac{V(E + \Delta E) - V(E)}{h^d} = 1 \approx \frac{V'(E)\Delta E}{h^d}. \quad (\text{A.3})$$

A resolução de  $\Delta E$  em energia requer, pela relação de incerteza, um tempo  $t_B$ , tal que

$$t_B = \frac{h}{\Delta E}. \quad (\text{A.4})$$

Assim, de (A.3) e (A.4) chegamos finalmente a

$$t_B = \frac{V'(E)}{h^{d-1}}, \quad (\text{A.5})$$

que é a estimativa para o “break-time”, tempo limite de validade da aproximação semiclássica.

## A.2 Não-Comutabilidade de $t \rightarrow \infty$ com $\hbar \rightarrow 0$ : Um Exemplo Simples

Usualmente assume-se que a transição da Mecânica Quântica para a Mecânica Clássica se dá quando  $\hbar \rightarrow 0$ . Desta forma, a descrição semiclássica de um sistema passa necessariamente pelos limites  $\hbar$  pequeno e  $T$  grande. O problema, como discutido por Berry [25], surge então justamente na não comutação de tais limites.

A fim de exemplificar esta não comutabilidade, basta olharmos o propagador da partícula livre

$$K(x_b, x_a; T) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar T}} \exp \left[ \frac{im}{2\hbar T} (x_b - x_a)^2 \right], \quad (\text{A.6})$$

que após uma rápida inspeção mostra que

$$T \rightarrow \infty \text{ e depois } \hbar \rightarrow 0 \neq \hbar \rightarrow 0 \text{ e depois } T \rightarrow \infty.$$

# Apêndice B

## Dedução da Aproximação Semiclássica

Neste Apêndice, vamos derivar o propagador aproximado (3.10), a partir do expressão exata (3.8). Para isto, consideremos primeiramente o argumento da exponencial em (3.8),

$$\varphi = \sum_{j=1}^{l-1} \left( p_j q_j + p_j \left( K_j + \frac{\nu_j}{2} \right) + q_j \left( L_j + \frac{\nu_{j-1}}{2} \right) \right) - 2 \sum_{j=0}^{l-1} p_{j+1} q_j, \quad (\text{B.1})$$

cujos extremos são encontrados pela imposição ( $j = 1, \dots, l-1$ )

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial p_j} \varphi &= q_j - 2q_{j-1} + K_j + \frac{\nu_j}{2} = 0 \\ \frac{\partial}{\partial q_j} \varphi &= p_j - 2p_{j+1} + L_j + \frac{\nu_{j-1}}{2} = 0. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Estas equações acopladas são satisfeitas somente por certos valores dos parâmetros  $K$ 's,  $L$ 's e  $\nu$ 's. Assumindo estes valores para os parâmetros, encontramos ( $i = 1, \dots, l-1$ )

$$\begin{aligned} p_{l-i} &= 2^i p_l - \sum_{j=1}^i 2^{i-j} \left( L_{l-j} + \frac{\nu_{l-1-j}}{2} \right) \\ q_i &= 2^i q_0 - \sum_{j=1}^i 2^{i-j} \left( K_j + \frac{\nu_j}{2} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

Denotando por  $\varphi^{(est.)}$ ,  $\varphi$  que satisfaz (B.2), temos das eqs. (B.2) e (B.3)

$$\exp[2\pi i N \varphi^{(est.)}] = (-i)^{N(\nu_0 \nu_1 + \dots + \nu_{l-2} \nu_{l-1})} \exp[2\pi i N (-2^l p_l q_0 + p_l \nu_{l-1} + q_0 \nu_0)]. \quad (\text{B.4})$$

Agora, consideremos

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dp_1 \dots dp_{l-1} dq_1 \dots dq_{l-1} \exp[2\pi i N \varphi] \quad (\text{B.5})$$

que é a integral da expressão exata para o propagador (3.8), só que com o intervalo de integração estendido a  $(-\infty, \infty)$ . Para um  $j = 1, \dots, l-1$  fixo,

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} dp_1 \dots dp_{j-1} dp_{j+1} \dots dp_{l-1} dq_1 \dots dq_{j-1} dq_{j+1} \dots dq_{l-1} \int_{-\infty}^{\infty} dp_j dq_j \times \exp[2\pi i N p_j (q_j + A)] \exp[2\pi i N q_j B] \exp[2\pi i N F(q_j; \dots)], \quad (\text{B.6})$$

com

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial p_j} \varphi &= q_j + A \\ \frac{\partial}{\partial q_j} \varphi &= p_j + B. \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

A integração em  $p_j$  fornece

$$I = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} dp_1 \dots dp_{j-1} dp_{j+1} \dots dp_{l-1} dq_1 \dots dq_{j-1} dq_{j+1} \dots dq_{l-1} \int_{-\infty}^{\infty} dq_j \times \delta[-q_j - A] \exp[2\pi i N q_j B] \exp[2\pi i N F(q_j; \dots)]. \quad (\text{B.8})$$

Definindo  $I^{(est.)}$ , como sendo a integral  $I$ , com os valores dos parâmetros que satisfazem (B.2), temos

$$I^{(est.)} = \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{\infty} dp_1 \dots dp_{j-1} dp_{j+1} \dots dp_{l-1} dq_1 \dots dq_{j-1} dq_{j+1} \dots dq_{l-1} \times \exp[-2\pi i N A B] \exp[2\pi i N F(-A; \dots)]. \quad (\text{B.9})$$

Assim, as sucessivas integrações de  $I^{(est.)}$ , substituem os  $p_j$ 's e  $q_j$ 's por seus valores dados em (B.3), então

$$I^{(est.)} = \frac{1}{N^{l-1}} \exp[2\pi i N \varphi^{(est.)}]. \quad (\text{B.10})$$

Como última parte de nossa derivação, precisamos encontrar os  $K$ 's,  $L$ 's e  $\nu$ 's, para os quais a eq. (B.2) seja válida. Levando em consideração o intervalo original de integração ( $0 < p_j, q_j < 1/2$  for  $j = 1, \dots, l-1$ ) e que  $0 < p_l, q_0 < 1$ , é fácil mostrar que  $K_j = L_{j-1} = 0$  se  $j = 2, \dots, l-1$ ;  $K_1 = \nu_0$  e  $L_{l-1} = \nu_{l-1}$ . Para estas condições, todos os pontos estacionários localizados nos extremos de integração são excluídos.

Não há restrições para os valores dos  $\nu_j$ 's internos, 0 ou 1, mas uma escolha particular destes  $\nu$ 's, limita os valores de  $p_l$  e  $q_0$ , para os quais teremos condições

estacionárias. Se definimos em código binário,  $\mu$  e  $\nu$ , como sendo números com  $l$  dígitos, de acordo com

$$\begin{array}{lll}
 \mu = 00 \dots 00 \ (\nu = 00 \dots 00) & \text{para} & 0 < p_l < \frac{1}{2^l} \quad (0 < q_0 < \frac{1}{2^l}) \\
 \mu = 00 \dots 01 \ (\nu = 00 \dots 01) & \text{para} & \frac{1}{2^l} < p_l < \frac{1}{2^{l-1}} \quad (\frac{1}{2^l} < q_0 < \frac{1}{2^{l-1}}) \\
 \vdots & \vdots & \vdots \\
 \mu = 11 \dots 11 \ (\nu = 11 \dots 11) & \text{para} & 1 - \frac{1}{2^l} < p_l < 1 \quad (1 - \frac{1}{2^l} < q_0 < 1),
 \end{array} \tag{B.11}$$

podemos mostrar, após cálculos tediosos mas diretos, que  $p_l$  e  $q_0$  estão na condição estacionária se,  $\mu = \bar{\nu}$ . Finalmente, juntando todos os resultados obtidos acima, o propagador semiclássico fica dado por

$$\langle m_l, \mu_l | U^l | n_0, \nu_0 \rangle^{(est.)} = \sqrt{\frac{2^l}{N}} \exp[2\pi i N(-2^l p_l q_0 + p_l \mu_l + q_0 \nu_0)] \delta_{\mu \bar{\nu}}. \tag{B.12}$$

# Apêndice C

## Dedução da Integral (4.3)

Aqui, vamos derivar explicitamente a integral

$$I = \int_{\alpha}^{\beta} \frac{\exp[i\gamma x]}{x} dx = I_c + iI_s. \quad (\text{C.1})$$

Primeiro, consideremos o caso  $\gamma \neq 0$ . Para a parte imaginária de  $I$ ,  $I_s$ , temos

$$I_s = \int_0^b \frac{\sin(x)}{x} dx - \int_0^a \frac{\sin(x)}{x} dx = \text{Si}(b) - \text{Si}(a), \quad (\text{C.2})$$

onde  $a = \gamma\alpha$ ,  $b = \gamma\beta$  e  $\text{Si}(x)$  é a função seno-integral [24]. Para a parte real de  $I$ ,  $I_c$ , temos

$$I_c = - \int_b^{\infty} \frac{\cos(x)}{x} dx + \int_a^{\infty} \frac{\cos(x)}{x} dx. \quad (\text{C.3})$$

Aqui, observamos que a função ímpar,  $\cos(x)/x$ , diverge em  $x = 0$ , mas uma vez que estas integrais se originam de transformações de Poisson de expressões do tipo  $\sum \cos(\dots)$ , devem então ser encaradas como valores principais. Assim, podemos escrever

$$I_c = \text{ci}(|b|) - \text{ci}(|a|), \quad (\text{C.4})$$

com  $\text{ci}(x)$  sendo a função coseno-integral [24].

Com a ajuda das identidades [23]

$$\begin{aligned} \text{Si}(x) &= \text{sign}(x) \text{Si}(|x|) \\ \text{si}(x) &= -\frac{\pi}{2} + \text{Si}(x) \\ \text{Ei}(ix) &= \text{ci}(|x|) + i \text{sign}(x) \text{si}(|x|), \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

onde  $\text{sign}(x) = -1$  se  $x < 0$  e  $\text{sign}(x) = +1$  se  $x > 0$ , a integral  $I$  se transforma em

$$I = \text{Ei}(ib) - \text{Ei}(ia) + i\frac{\pi}{2}[\text{sign}(b) - \text{sign}(a)], \quad (\text{C.6})$$

válida para  $\gamma \neq 0$ . O caso de  $\gamma = 0$  é facilmente incluído se consideramos a relação

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} [\text{Ei}(i\gamma\beta) - \text{Ei}(i\gamma\alpha)] = \ln(\beta) - \ln(\alpha). \quad (\text{C.7})$$

Desta forma, finalmente encontramos

$$\int_{\alpha}^{\beta} \frac{\exp[i\gamma x]}{x} dx = \text{Ei}(i\gamma\beta) - \text{Ei}(i\gamma\alpha) + i\frac{\pi}{2} \xi(\gamma) [\xi(\beta) - \xi(\alpha)], \quad (\text{C.8})$$

onde  $\xi(x) = +1$  se  $x \geq 0$  e  $\xi(x) = -1$  se  $x < 0$ .

# Apêndice D

## Deduções das Aproximações (4.19) e (4.29)

Vamos deduzir aqui, duas aproximações usadas no Capítulo 4.

(1) *Aproximação* (4.19)

A função  $Ei$  pode ser escrita como [23]

$$Ei(ix) = ci(x) + i si(x). \quad (D.1)$$

Para as funções  $ci$  e  $si$ , temos expansões, dadas por [24]

$$\begin{aligned} ci(x) &= \frac{\sin(x)}{x} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (2n)!}{x^{2n}} - \frac{\cos(x)}{x^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (2n+1)!}{x^{2n}} \\ si(x) &= -\frac{\cos(x)}{x} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (2n)!}{x^{2n}} - \frac{\sin(x)}{x^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (2n+1)!}{x^{2n}}, \end{aligned} \quad (D.2)$$

se  $|x|$  for grande, e

$$\begin{aligned} ci(x) &= \Gamma + \ln(x) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n x^{2n}}{2n(2n)!} \\ si(x) &= -\frac{\pi}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1} x^{2n-1}}{(2n-1)(2n-1)!}, \end{aligned} \quad (D.3)$$

se  $|x|$  for pequeno, com  $\Gamma = 0,577215\dots$  sendo a constante de Euler.

Assumindo agora, que para  $|x| \geq \pi/2$ , usamos a expansão (D.2), tomando termos até ordem  $x^{-1}$ , e para  $|x| < \pi/2$ , usamos a expansão (D.3), tomando termos até ordem  $x^2$ . Então, a eq. (D.1) pode ser escrita como

$$\begin{aligned} Ei(ix) &\approx \frac{\exp(ix)}{ix}, & \text{se } |x| \geq \frac{\pi}{2} \\ Ei(ix) &\approx \Gamma - \frac{i\pi}{2} + \ln(x) + ix - \frac{x^2}{2}, & \text{se } |x| < \frac{\pi}{2}, \end{aligned} \quad (D.4)$$

que é a aproximação (4.19).

(2) *Aproximação* (4.29)

A função

$$\mathcal{I}(x) = \int_0^x dt \frac{(\exp(it) - 1)}{t}, \quad (\text{D.5})$$

pode ser escrita, para  $|x|$  pequeno, como

$$\mathcal{I}(x) = \int_0^x dt \frac{1}{t} \left( it - \frac{t^2}{2} + \dots \right) \approx ix - \frac{x^2}{4}. \quad (\text{D.6})$$

Também podemos escrever (D.5) na seguinte forma

$$\mathcal{I}(x) = \int_0^{|x|} dt \frac{(\cos(t) - 1)}{t} + i \xi(x) \int_0^{|x|} dt \frac{\sin(t)}{t}, \quad (\text{D.7})$$

onde  $\xi(x) = 1$  se  $x \geq 0$  e  $\xi(x) = -1$  se  $x < 0$ . Temos os seguintes resultados [23]

$$\begin{aligned} \int_0^{|x|} dt \frac{(\cos(t) - 1)}{t} &= -\Gamma - \ln(|x|) + \text{ci}(|x|) \\ \int_0^{|x|} dt \frac{\sin(t)}{t} &= \frac{\pi}{2} + \text{si}(|x|). \end{aligned} \quad (\text{D.8})$$

Se  $|x|$  for um número grande, então de (D.8) e de (D.2) (considerando-se termos até  $x^{-1}$ ), encontramos para (D.5)

$$\mathcal{I}(x) \approx \frac{\exp(ix)}{ix} - \Gamma - \ln(|x|) + \frac{i\pi}{2} \xi(x). \quad (\text{D.9})$$

Desta forma, tomando (D.6) se  $|x| < \pi/2$  e (D.9) se  $|x| \geq \pi/2$ , encontramos

$$\begin{aligned} \mathcal{I}(x) &\approx ix - \frac{x^2}{2}, & \text{se } |x| < \frac{\pi}{2} \\ \mathcal{I}(x) &\approx \frac{\exp(ix)}{ix} - \Gamma - \ln(|x|) + \frac{i\pi}{2} \xi(x), & \text{se } |x| \geq \frac{\pi}{2}, \end{aligned} \quad (\text{D.10})$$

que é a aproximação (4.29).

Os gráficos a seguir comparam estas aproximações com os resultados exatos.

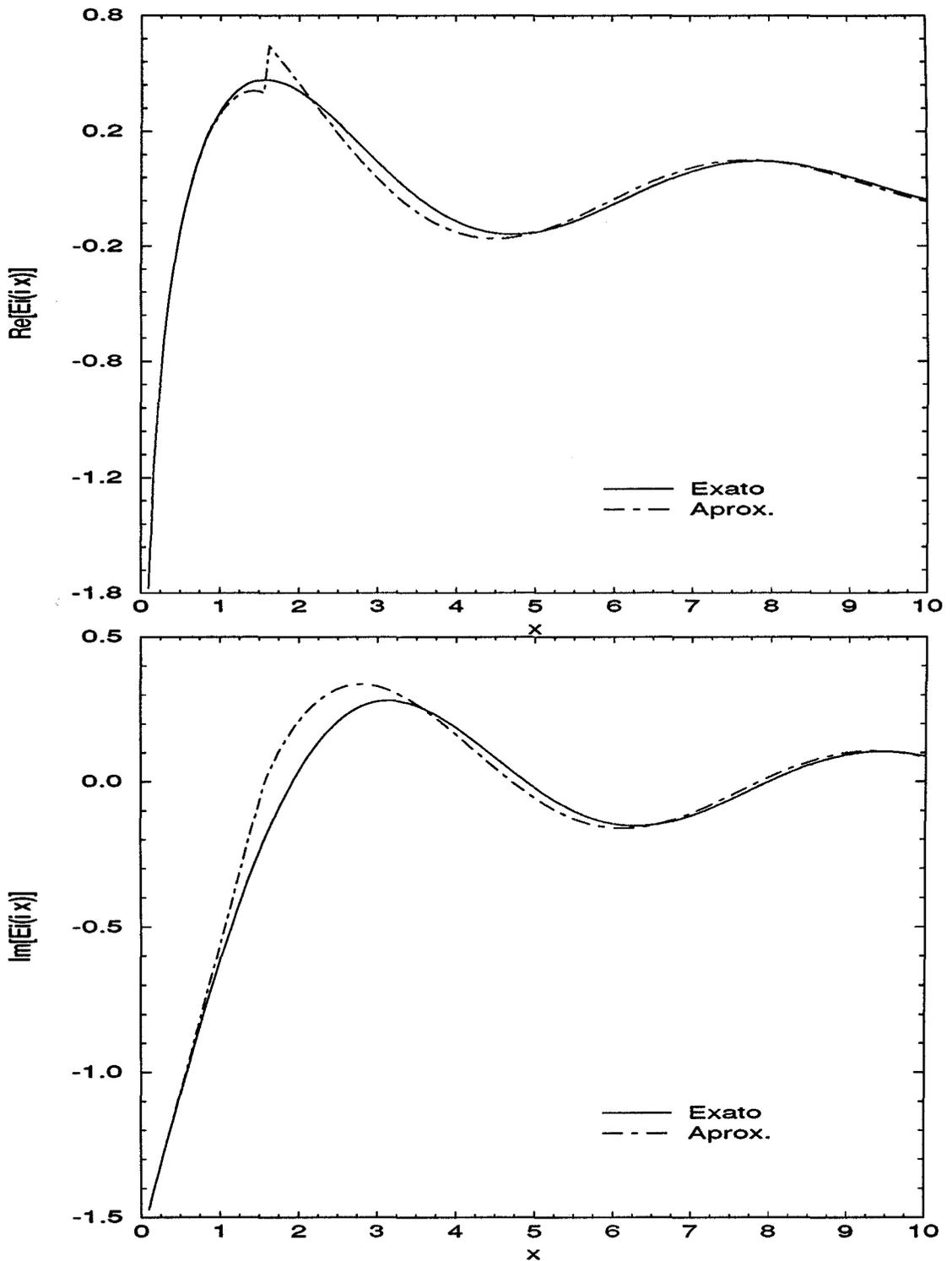


Figura D.1: Comparação da parte real e imaginária da função  $Ei(ix)$  com sua aproximação dada por (C.4).

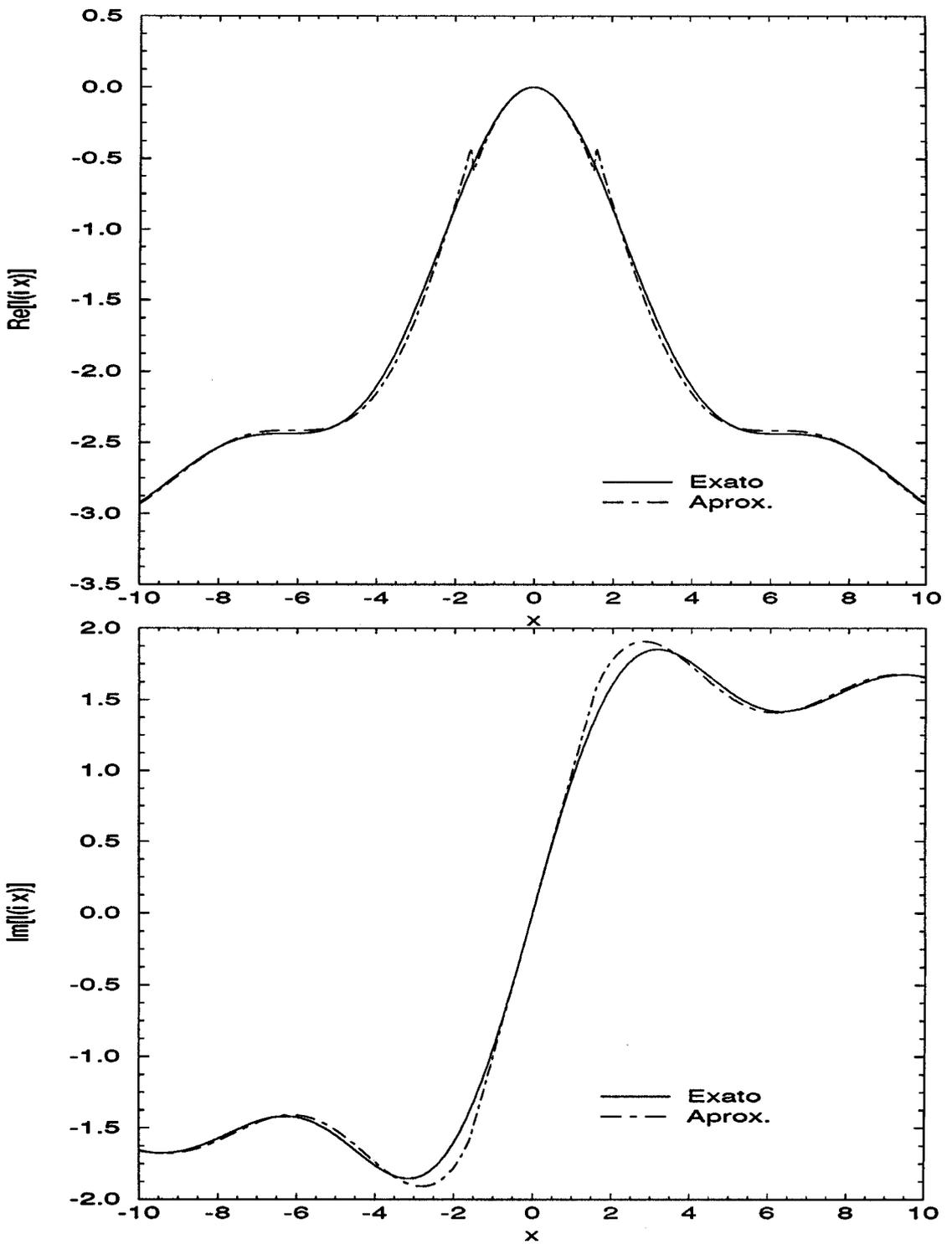


Figura D.2: Comparação da parte real e imaginária da função  $\mathcal{I}(ix)$  com sua aproximação dada por (C.10).

# Bibliografia

- [1] A. Einstein, Verh. Dtsch. Phys. Ges. **19**, (1917) 82.
- [2] J.H. Van Vleck, Proc. Natl. Acad. Sci. (USA) **14**, (1928) 178.
- [3] M.C. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*, (New York: Springer-Verlag, 1991).
- [4] M.C. Gutzwiller, J. Math. Phys. **10**, (1969) 1004.
- [5] G. Casati, B.V. Chirikov, F.M. Israeliev, J. Ford, *Stochastic Behavior in Quantum and Classical Hamiltonian Systems* (Lectures Notes in Physics **93**), eds. G. Casati, J. Ford, (Springer-Verlag, Berlin, 1979).
- [6] J.H. Hannay, M.V. Berry, Phys. D **1**, (1980) 267.
- [7] J. Guckenheimer, Lect, App. Math. **17**, (1979) 187.
- [8] R.P. Feynman, Rev. Mod. Phys. **20**, (1948) 367.
- [9] V.I. Arnold, A. Avez, *Ergodic Problems of Classical Mechanics*, (Reading MA: Benjamin, 1968).
- [10] J.L. McCauley, Phys. Scr. **T20**, (1988) 1.
- [11] A.M. Ozorio de Almeida, M. Saraceno, Ann. Phys. (NY) **210**, (1991) 1.
- [12] H. Goldstein, *Classical Mechanics*, (Reading MA: Addison-Wesley, 1980).
- [13] N.L. Balazs, A. Voros, Ann. Phys. (NY) **190**, (1989) 1.
- [14] M. Saraceno, Ann. Phys. (NY) **199**, (1990) 37.
- [15] J.H. Hannay, J.P. Keating, A.M. Ozorio de Almeida, Nonlinearity **7**, (1994) 1327.
- [16] A.M. Ozorio de Almeida, *Hamiltonian Systems: Chaos and Quantization*, (Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1988).

- [17] P.W. O'Connor, S. Tomsovic, E.J. Heller, *Physica D* **55**, (1992) 340.
- [18] M. Saraceno, A. Voros, *Physica D* **79** (1994) 206.
- [19] R.P. Feynman, *Rev. Mod. Phys.* **20**, (1948) 367.
- [20] P.W. O'Connor, *Ph.D. Thesis, University of Washington*, (1991).
- [21] K. Johnson, *Ann. Phys. (NY)* **192**, (1989) 104.
- [22] M.S. Marinov, *Phys. Rep.* **60**, (1980) 1.
- [23] I.S. Gradshteyn, I.M. Ryzhik, *Tables of Integrals, Series and Products*, (New York: Academic Press, 1980).
- [24] *Handbook of Mathematical Functions*, eds. M. Abramowitz, I.A. Stegun, (New York: Dover, 1972).
- [25] M.V. Berry, *Chaos and Quantum Physics* (Les Houches, Session LII), eds. M.J. Giannoni, A. Voros, J. Zinn-Justin (Amsterdam: North Holland, 1991).
- [26] S. Tomsovic, E.J. Heller, *Phys. Rev. Lett.* **67**, (1991) 664.
- [27] L.S. Schulman, *J. Phys. A* **27**, (1994) 1703.
- [28] A. Erdélyi, *Asymptotic Expansions*, (New York: Dover, 1956).
- [29] M.C. Gutzwiller, *J. Math. Phys.* **12**, (1971) 343.
- [30] P.W. O'Connor, S. Tomsovic, *Ann. Phys. (NY)* **207**, (1991) 218.
- [31] P.W. O'Connor, S. Tomsovic, E.J. Heller, *J. Stat. Phys.* **68**, (1992) 131.
- [32] M.B. de Matos, A.M. Ozorio de Almeida, *Ann. Phys. (NY)* **237**, (1995) 46.