

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

**PROPRIEDADES MAGNÉTICAS  
DE UM GÁS DE ELÉTRONS  
SEMICLÁSSICO.**

Sandra Denise Prado

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

Tese apresentada ao  
Instituto de Física "Gleb Wataghin"  
para a obtenção do Grau de Doutora em Ciências.

31 de julho de 1995

*Este exemplar corresponde à redação final da  
tese de doutorado defendida pela aluna  
Sandra Denise Prado e aprovada pela comissão julgadora.*

  
10/6/97

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA  
BIBLIOTECA DO IFGW- UNICAMP

P883p

**Prado, Sandra Denise**

**Propriedades magnéticas de um gás de elétrons semiclássico / Sandra Denise Prado. - Campinas, SP: [s.n.], 1995.**

**Orientador: Marcus A. M. de Aguiar.**

**Tese (doutorado) - Universidade Estadual Campinas, Instituto de Física "Gleb Wataghin".**

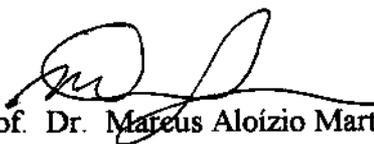
- 1. Gás de elétrons. 2. Magnetização. 3. Comportamento caótico nos sistemas. I. Marcus A.M. de Aguiar. II. Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Física "Gleb Wataghin". III. Título.**

*A Jacob e Maria,  
meus pais.  
Ao pequeno Caio,  
meu filho.*

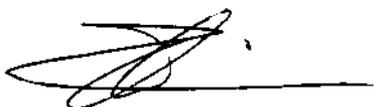
**PARECER DE APROVAÇÃO**  
**DEFESA DE TESE DE DOUTORADO DE**  
***SANDRA DENISE PRADO***

DATA: 31 / 07 / 95

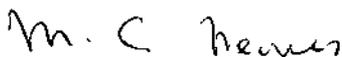
BANCA EXAMINADORA:



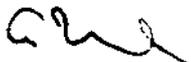
- Prof. Dr. Marcus Aloizio Martinez de Aguiar (Orientador)



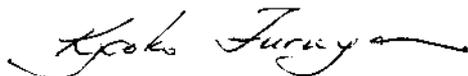
- Profa. Dra. Coraci Pereira Malta



- Profa. Dra. Maria Carolina Nemes



- Prof. Dr. Alfredo Miguel Ozório de Almeida



- Profa. Dra. Kyoko Furuya

## *Agradecimentos.*

*A Ricardo Egydio, de Rio Claro, pela proposta inicial,  
a Jon Keating, de Manchester, pela colaboração,  
ao Professor Ozório de Almeida, pelos comentários e  
sugestões sempre fundamentais,  
A Professora Kyoko, por sua amizade e incentivo,*

*Obrigada.*

*Aos que sempre foram amigos,  
ao pessoal da Secretaria de Pós Graduação,  
Armando, Márcia e Maria Ignez,*

*Obrigada.*

*Eu devo a Marcus Aguiar a maioria dos créditos da existência desta tese,  
suas idéias foram fundamentais para o desenvolvimento do trabalho.  
Foi um privilégio, pessoal e profissional, trabalhar com você.*

*Obrigada, Marcus.*

*Agradecemos ao CNPq, FAPESP e Finep pelo suporte financeiro.*

PROPRIEDADES MAGNÉTICAS  
DE UM GÁS DE ELÉTRONS  
SEMICLÁSSICO.

# Resumo

Estudamos a magnetização e a susceptibilidade semiclássica para um gás de elétrons não-interagentes, confinados por um potencial caótico suave. A magnetização por partícula,  $m$ , é diretamente relacionada à função escada,  $N(E)$ , que conta os níveis de uma partícula até a energia  $E$ . Usando a Fórmula do Traço de Gutzwiller para  $N$ , obtemos uma expressão semiclássica para  $m$ . Nossos resultados mostram que a magnetização tem uma média não-nula, que aparece devido às correções quânticas da aproximação de Weyl para a função escada média e que ela é independente do movimento clássico ser ou não caótico. As flutuações em torno da média são devidas às órbitas periódicas clássicas e representam uma manifestação do caos.

O cálculo da susceptibilidade,  $\chi$ , para um amplo intervalo de campo magnético,  $B$ , mostra que a transição caótico ( $B = 0$ ) para regular ( $B \rightarrow \infty$ ) é dominada por bifurcações de órbitas periódicas curtas, que se tornam estáveis quando o campo é aumentado. Grandes contribuições são observadas próximas aos pontos de bifurcações, aumentando a susceptibilidade para valores além daqueles esperados para sistemas regulares.

# Summary

We study the semiclassical magnetization and the susceptibility of non-interacting electrons gas confined by a smooth chaotic potential. The magnetization per particle,  $m$ , is directly related to the staircase function  $N(E)$ , which counts the single-particle levels up to energy  $E$ . Using Gutzwiller's trace formula for  $N$ , we derive a semiclassical expression for  $m$ . Our results show that the magnetization has a non-zero average, which arises from corrections to the leading-order Weyl approximation to the mean staircase and which is independent of whether the classical motion is chaotic or not. Fluctuations about the average are due to classical periodic orbits and do represent a signature of chaos.

The computation of the susceptibility,  $\chi$ , for a wide range of magnetic field values  $B$  reveals that the chaotic ( $B = 0$ ) to regular ( $B \rightarrow \infty$ ) transition is dominated by bifurcations of short periodic orbits that become stable as  $B$  increases. Large contributions are observed near the bifurcations points, increasing the average susceptibility to values beyond those expected for regular systems.

# Conteúdo

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Propriedades do gás de elétrons.</b>	<b>14</b>
2.1	O estado fundamental do gás de Fermi . . . . .	15
2.2	Propriedades térmicas do gás de Fermi. . . . .	16
2.3	O comportamento magnético do gás de Fermi. . . . .	19
2.3.1	O diamagnetismo de Landau. . . . .	20
2.3.2	Os níveis de Landau. . . . .	24
2.3.3	Condições de validade do modelo. . . . .	27
<b>3</b>	<b>A Fórmula Semiclássica da Magnetização para um gás de elétrons bidimensional não-interagente.</b>	<b>30</b>
3.1	O limite semiclássico . . . . .	32
3.1.1	O denominador de $A_p$ na densidade oscilante e a estabilidade das órbitas periódicas. . . . .	35
3.2	A fórmula semiclássica da magnetização para o gás de elétrons.	38
3.2.1	Termodinâmica . . . . .	40
3.2.2	A magnetização e a função escada. . . . .	42
3.2.3	A magnetização originária do termo médio. . . . .	44
3.2.4	A magnetização originária das órbitas periódicas. . . . .	46

<b>4</b>	<b>O campo de Prova: Potencial Nelson.</b>	<b>50</b>
4.1	O Sistema Clássico. . . . .	52
4.2	O Sistema Quântico. . . . .	59
4.3	Degenerescências e “Avoided crossings”. . . . .	64
<b>5</b>	<b>Resultados Numéricos</b>	<b>69</b>
5.1	Resultados para o oscilador bidimensional . . . . .	69
5.2	Resultados para o potencial Nelson . . . . .	73
5.2.1	Magnetização e órbitas periódicas. . . . .	75
5.2.2	Flutuações na susceptibilidade. . . . .	77
5.2.3	Efeitos de tamanho. . . . .	79
<b>6</b>	<b>A resposta magnética de sistemas reais - A experiência.</b>	<b>98</b>
6.1	De correntes persistentes à susceptibilidade magnética. Uma nova experiência . . . . .	99
6.2	A susceptibilidade generalizada para sistemas mistos. . . . .	102
6.3	A diferença das médias canônica e grand-canônica e a validade dos nossos resultados. . . . .	109
<b>7</b>	<b>Conclusões</b>	<b>114</b>
<b>A</b>	<b>Obtenção da magnetização oscilante.</b>	<b>118</b>
<b>B</b>	<b>Base que diagonaliza o oscilador com campo aplicada ao po- tencial Nelson.</b>	<b>121</b>
<b>C</b>	<b>Correções para o termo médio da função escada espectral do potencial Nelson.</b>	<b>125</b>
C.1	A representação de Weyl . . . . .	128
	<b>Bibliografia</b>	<b>135</b>

# Capítulo 1

## Introdução

O efeito de um campo magnético em átomos vem sendo estudado há muito tempo e tem um papel crucial no entendimento da física atômica. Os campos magnéticos possíveis em laboratório são pequenos, de forma que sua ação no átomo pode ser estudada via teoria de perturbação e o termo dominante no Hamiltoniano é, comumente, aquele linear com o campo, que origina o efeito Zeeman. A evidência de campos magnéticos fortes foi primeiro observada por astrônomos em estrelas do tipo anãs brancas, há mais ou menos vinte anos, enquanto que se supôs a existência de campos magnéticos extremamente fortes em estrelas de nêutrons. O resultado dessas descobertas foi induzir experiências em laboratório, que tentassem imitar as extraordinárias condições dessas estrelas excepcionais.

Para isso, a idéia principal é preparar o átomo em um estado altamente excitado, porém ainda ligado, de forma que a órbita do elétron englobe uma grande área e, assim, possa se conseguir um fluxo magnético grande, mesmo em um campo relativamente pequeno. No caso de fluxo forte, a teoria de perturbação não é aplicável e o termo dominante, no Hamiltoniano, é o quadrático com o campo, que dá origem a uma pequena susceptibilidade

magnética negativa, chamada diamagnética, ao contrário da susceptibilidade paramagnética, originária do termo linear com o campo, que é grande e positiva. Para fluxos fortes, o termo diamagnético guia o movimento clássico e o termo paramagnético acaba sendo efetivamente eliminado.

Experiências com átomos próximos ao limite de ionização tornaram-se possíveis na última década, devido ao avanço no desenvolvimento da tecnologia óptica, tanto quanto na preparação de feixes atômicos. Considerando que o trabalho pioneiro foi feito em metais alcalinos e alcalinos terrosos, os últimos anos produziram detalhes para o espectro do hidrogênio. No início, parecia completamente confuso, mas agora esses detalhes são compreensíveis em termos de órbitas periódicas clássicas. O comportamento clássico, nesses casos, é provavelmente aquele do *soft chaos*, visto que o sistema é integrável em ambos os limites, campos magnéticos muito fracos e muito fortes [1].

Como consequência do processo tecnológico, na última década houve um crescente interesse nas propriedades eletrônicas de pequenos sistemas metálicos, uma vez que investigações detalhadas foram devotadas às propriedades paramagnéticas do spin e às propriedades elétricas. Uma das conclusões dessas pesquisas foi que as propriedades de transporte, em baixas temperaturas, dependem somente dos estados próximos à energia de Fermi e, assim, além de serem sensíveis à estrutura do espectro eletrônico, também mostram efeitos de tamanho. Uma outra classe de sistemas onde o efeito de campos magnéticos intensos podem ser estudados são os sistemas mesoscópicos. Esses sistemas são usualmente grandes o suficiente para conter um número de elétrons que possa ser considerado como termodinamicamente grande, mas ainda suficientemente pequenos para manter a coerência de fase para distâncias comparáveis ao seu tamanho. Nestes sistemas, o espalhamento elástico dos elétrons pelas impurezas e pelo contorno gera um comportamento que é usualmente caótico em seu limite clássico, havendo então, um crescente interesse no entendimento da influência da dinâmica clássica no

comportamento quântico [2, 1, 3]. No entanto, apesar dos vários estudos no complicado espectro de energia quântico, a maioria das atividades estavam concentradas em aspectos locais do espectro, como por exemplo, a distribuição dos espaçamentos dos níveis e a rigidez espectral em valores fixos de parâmetros de não-integrabilidade. Os aspectos globais, como por exemplo a sensibilidade do espectro em relação à mudança destes parâmetros, careciam de investigações mais profundas [4]. Recentes estudos teóricos e experimentais mostram que as propriedades estatísticas das flutuações do transporte em estruturas mesoscópicas irregulares, podem ser explicadas sob o ponto de vista da teoria de órbitas periódicas [5]. Mostrou-se ainda, teórica [6] e experimentalmente [7], que a condutância de microestruturas balísticas depende sensivelmente da dinâmica clássica ser integrável ou caótica. Assim, torna-se importante distinguir entre dois casos extremos. Uma é a situação em que a dinâmica de uma partícula no correspondente sistema clássico é integrável, enquanto que a outra é quando essa dinâmica é completamente caótica. Nakamura e Thomas [4] foram os primeiros a abordar este problema para a susceptibilidade. Eles calcularam, numericamente, as flutuações na susceptibilidade para um bilhar circular e um bilhar elíptico e concluíram que as flutuações eram maiores no sistema caótico que no sistema integrável. Essas conclusões foram criticadas por Németh [8], que também encontrou grandes oscilações em um simples modelo integrável, o oscilador harmônico. Entre esses dois casos, há os sistemas com dinâmica mista, nos quais a estrutura do espaço de fase está diretamente relacionada a magnitude das flutuações na susceptibilidade.

É importante lembrar aqui, que a principal diferença entre sistemas integráveis e caóticos está na natureza das órbitas periódicas. Enquanto elas formam famílias contínuas e estáveis sobre a superfície de energia em sistemas integráveis, a maioria das órbitas são isoladas e instáveis em sistemas caóticos. A contribuição, para a susceptibilidade, de famílias contínuas de

trajetórias periódicas, é amplificada por interferência construtiva e, portanto, a susceptibilidade de microestruturas integráveis deve ser maior que aquela de microestruturas completamente caóticas. No entanto, sistemas integráveis e sistemas completamente caóticos formam somente um subgrupo de todos os sistemas possíveis. Espera-se que, genericamente, os sistemas exibam uma dinâmica mista, com ambas regiões regular e caótica no espaço de fase. Como seria a susceptibilidade nesses casos? A amplitude da susceptibilidade mesoscópica destes sistemas é uma interessante questão ainda em aberto. As diferentes contribuições das órbitas periódicas isoladas e não-isoladas devem levar a uma interessante “transição de fase semiclássica” da susceptibilidade, por exemplo, na geometria do bilhar de Sinai [9].

Estudos deste tipo, não são só práticas acadêmicas, pois, como dito por Mühlischlegel [10], elétrons em pequenas partículas metálicas constituem um sistema físico interessante, onde rápidos progressos foram feitos do ponto de vista experimental. O modelo mais simples de um metal é aquele dos elétrons se movendo independentemente e o modelo mais simples de um núcleo também é aquele de um nucleon movendo independentemente em um campo médio. Estes modelos de partículas independentes, apesar de seu aspecto simples, são bastante bem sucedidos na explicação de fatos empíricos de um grande corpo. É, assim, natural perguntar se a natureza regular ou caótica do movimento clássico de elétrons (ou núcleos) em potenciais médios, ou em caixas, influencia as propriedades quânticas.

Nesse contexto, estudamos as propriedades magnéticas de um gás de  $2P$  elétrons não-interagentes<sup>1</sup>, movendo em um potencial bidimensional  $V(x, y)$  e sujeito a um campo magnético constante  $B$  na direção perpendicular. À temperatura zero, os elétrons ocupam os  $P$  primeiros níveis de energia per-

---

<sup>1</sup>desprezamos as interações do spin

mitidos [11, 12, 13]. Agora, mudam a intensidade  $B$  do campo magnético adiabaticamente, seguindo os níveis de energia como função de  $B$ . Se a Hamiltoniana é classicamente caótica, nenhuma degenerescência é esperada e os níveis flutuarão exibindo *avoided crossings*. Se, por outro lado, a Hamiltoniana é integrável, então os níveis podem (e tipicamente o fazem) cruzar-se, exibindo um comportamento mais suave (menos oscilatório) quando a intensidade  $B$  é variada.

A magnetização  $m_0$  e a susceptibilidade  $\chi_0$ , por elétron, à temperatura zero, são dadas pelas derivadas primeira e segunda da energia total com relação ao campo  $B$  [11], respectivamente:

$$m_0(B) = -\frac{1}{P} \sum_{n=1}^P \frac{\partial E_n}{\partial B},$$

$$\chi_0(B) = -\frac{1}{P} \sum_{n=1}^P \frac{\partial^2 E_n}{\partial B^2}.$$

Em um *avoided crossing* entre os níveis  $i$  e  $j$  em um campo  $B$ , ambas as derivadas  $\partial^2 E_i / \partial B_i^2$  e  $\partial^2 E_j / \partial B_j^2$  assumem grandes valores mas tem sinais opostos e, portanto, suas contribuições quase se cancelam. A contribuição do último nível em um *avoided crossing* com o próximo nível (não-ocupado) não é cancelada e isto produz grandes picos em  $\chi_0(B)$ . Estes picos, ao contrário do que afirma Nakamura e Thomas [4], não são uma manifestação de caos. De fato, sistemas integráveis ou quase-integráveis apresentam picos ainda mais agudos que os caóticos. Vale, no entanto, enfatizar, que a dinâmica dos níveis de energia como função do campo magnético geralmente é diferente para sistemas regulares e sistemas caóticos [2] e a questão é se isto realmente leva a um comportamento distinto na susceptibilidade.

Nosso trabalho consistiu em estudar as propriedades de  $\chi(B)$  e  $m(B)$  teórica e numericamente. Mostramos que a magnetização pode ser expressa

como uma soma de um termo suave (sua média), mais uma contribuição oscilatória associada com órbitas periódicas. O termo suave é relacionado às correções para a aproximação assintótica de Weyl para a função escada  $N(E)$  e o termo oscilatório é obtido usando-se a Fórmula do Traço de Gutzwiller [14]. À temperatura zero, todas as órbitas contribuem para  $m_0(B)$ , enquanto que para  $T$  finito, somente as órbitas curtas (com períodos  $\tau \leq \hbar/k_B T$ , sendo  $k_B$  a constante de Boltzmann e  $T$  a temperatura).

A teoria, por nós desenvolvida [15], mostra que a magnitude da susceptibilidade média em campo nulo é independente do sistema ser ou não caótico, ela depende somente dos termos de correção da série de Weyl e, assim, é determinada somente pelas propriedades globais que não estão relacionadas à estabilidade das trajetórias clássicas. Isto é confirmado por nossos resultados numéricos.

Para o estudo numérico, escolhemos uma Hamiltoniana não-escalável, não-integrável e suave, que exhibe comportamento regular em energias baixas e comportamento caótico em energias altas. Usando diferentes valores de  $\hbar$ , selecionamos os  $P$  primeiros níveis que permanecem na região mais regular ou na região mais caótica. Deste modo, todas as propriedades de simetria dos casos regular e caótico são exatamente as mesmas, pois correspondem ao mesmo sistema e portanto, diferenças no comportamento de  $\chi(B)$  ou  $m(B)$  podem ser atribuídas exclusivamente a dinâmica clássica subjacente. Apresentamos também resultados para o oscilador harmônico onde a magnetização média pode ser calculada analiticamente e comparada ao resultado exato.

Além da fórmula semiclássica, obtemos um outro resultado novo e importante neste trabalho: o efeito das bifurcações desencadeadas pelo campo no processo de estabilização do sistema caótico. O cálculo da susceptibilidade,  $\chi$ , para um amplo intervalo de campo magnético,  $B$ , mostra que a transição caótico ( $B = 0$ ) para regular ( $B \rightarrow \infty$ ) é dominada por bifurcações

de órbitas periódicas curtas, que se tornam estáveis quando o campo é aumentado. Grandes contribuições são observadas próximas aos pontos de bifurcações [16], aumentando a susceptibilidade para valores além daqueles esperados para sistemas regulares.

Como previamente mencionado, a susceptibilidade magnética de um sistema de partículas carregadas foi primeiramente estudada por Nakamura e Thomas em 1988 [4]. Apesar do pioneirismo, seus resultados foram criticados por Németh em 1990, que obteve resultados conflitantes, ao estudar um oscilador harmônico bidimensional.

Em 1993, Lévy [17] et al mediu a susceptibilidade de um conjunto de  $10^5$  quadrados microscópicos isolados em uma heterojunção de GaAs. Motivado por essa experiência, Oppen [9], fez uma teoria semiclássica para o bilhar quadrado, onde as predições para a amplitude e a dependência do campo magnético são consistentes com os resultados experimentais de Lévy et al. Contemporaneamente a Oppen [9], Agam [5] aplica também o método semiclássico para obter uma fórmula para a susceptibilidade que é expressa em termos de um número finito de órbitas periódicas clássicas para um gás de elétrons não-interagente, confinado em um bilhar caótico bidimensional de contorno arbitrário e com dependência da temperatura. As expressões semiclássicas obtidas independente e paralelamente por nós [15], Oppen [9] e Agam [5] são muito similares. No entanto, Oppen a aplicou para o bilhar quadrado e Agam para bilhares caóticos de forma arbitrária, porém ambos se restringiram, por razões óbvias, ao limite de campos muito baixos, isto é, o campo magnético é tal que as órbitas periódicas, envolvidas no problema, não tem a geometria significativamente modificada. Apesar das dificuldades computacionais, esses limites foram estendidos no nosso trabalho e regiões de campos mais intensos foram investigadas numericamente, elucidando então um fenômeno novo, mais uma vez associado com órbitas periódicas, que diz

respeito as suas bifurcações.

Esta dissertação foi organizada de forma a conter 6 capítulos. O capítulo 2 trata brevemente o gás de elétrons e o comportamento do gás em um campo magnético, incluindo o Diamagnetismo de Landau. No capítulo 3 a Fórmula Semiclássica da Magnetização é apresentada, tratando então o limite semiclássico, mostrando que a magnetização pode ser escrita como a soma de duas contribuições, um termo médio devido às correções do Termo de Weyl e um outro termo oscilante, devido às contribuições das órbitas periódicas do sistema clássico. Nesse capítulo é discutida a dependência da magnetização com a temperatura e como a temperatura trunca a soma sobre órbitas periódicas, fazendo com que, para temperaturas finitas, somente as órbitas mais importantes do sistema acabem contribuindo. O capítulo 4 consiste de uma revisão das propriedades clássicas e quânticas do potencial em que nossa Fórmula Semiclássica será provada. O potencial escolhido foi o potencial Nelson, que apresenta *soft chaos*. Seções de Poincaré em significativos valores de campo e de energia são mostradas, definindo então a região definida como regular e caótica e, também, a variação da ação da órbita periódica com o campo que, como veremos, representa o elo de ligação entre a dinâmica clássica e quântica. Do ponto de vista quântico, apresentamos os níveis de energia como função do campo, observando os *avoided crossings*. Deixamos para o capítulo 5 os resultados numéricos, começando com um exemplo, o oscilador harmônico bidimensional em campo magnético. Apresentamos, então, a susceptibilidade e a magnetização para o oscilador e para o potencial Nelson, comparando, neste caso, os resultados para os regimes regular e caótico. Verificamos também, a contribuição da órbita periódica mais curta, os efeitos de tamanho e a importância do processo de bifurcação desencadeado pelo campo no caso caótico. No capítulo 6 procuramos situar

nossos resultados no contexto de resultados anteriores para correntes persistentes em anéis metálicos submetidos a um campo magnético e, comparamos aos resultados obtidos por Oppen e Agam, que por sua vez estão em concordância com os resultados experimentais de Lévy. Mostramos, também, que à temperatura zero, nossos resultados são válidos, levando-se em consideração as diferenças que aparecem ao tratarmos o sistema usando o ensemble canônico (o número de partículas é fixo e o potencial químico varia com o campo) ou o ensemble grand-canônico (o potencial químico é fixo e o sistema troca partículas com um reservatório). Finalmente, nossas conclusões.

# Capítulo 2

## Propriedades do gás de elétrons.

O sistema mais simples de  $N$  partículas é aquele composto por  $N$  membros não-interagentes. A Hamiltoniana, nesse caso é:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m}$$

onde  $p_i^2 = \mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_i$  e  $\mathbf{p}_i$  é o operador momento da  $i$ -ésima partícula. A Hamiltoniana é independente das posições das partículas ou de quaisquer outras coordenadas, por exemplo, spin se existir.

Na natureza, um sistema de  $N$  partículas pode ser de dois tipos dependendo se elas são ou não distinguíveis: um sistema de Bose ou um sistema de Fermi. Uma série completa de autofunções para um sistema de Bose é um conjunto de autofunções de  $\mathcal{H}$  que são simétricas sob a permutação de quaisquer dois pares de coordenadas de uma partícula. Um conjunto completo de autofunções para um sistema de Fermi é o conjunto de autofunções de  $\mathcal{H}$  que são antissimétricas sob uma permutação de quaisquer par de coordenadas de uma partícula. Partículas que formam um sistema de Bose são chamadas

de bósons e partículas que formam um sistema de Fermi são chamadas de férmions.

Além destes dois tipos de sistemas, define-se para comparação matemática o chamado sistema de Boltzmann. Este é um sistema de partículas cujas autofunções são todas as autofunções de  $\mathcal{H}$ . O conjunto de autofunções para um sistema de Boltzmann inclui todas aquelas autofunções para o sistema de Bose e de Fermi.

Para partículas não-interagentes, temos três casos; o gás ideal de Bose, o gás ideal de Fermi e o gás ideal de Boltzmann.

Com o avanço da tecnologia, a fabricação de dispositivos sub-micrométrico tornou-se possível. Estes sistemas chamados mesoscópicos tem sido extremamente estudados na última década (Introdução). A física de pequenas partículas metálicas é um excelente campo de prova para as averigüações das muitas idéias no campo da física mesoscópica. O sistema que estudaremos, será (capítulo 3 e 4) um sistema composto de  $2P$  elétrons não-interagentes, movendo-se em um potencial bidimensional  $V(x, y)$  e submetido a um campo magnético constante  $B$  na direção perpendicular.

## 2.1 O estado fundamental do gás de Fermi

Para estudarmos as propriedades do estado fundamental de  $2N$  elétrons confinados, não-interagentes, observamos que o estado fundamental do sistema de  $2N$  elétrons pode ser obtido a partir dos níveis de energia de um único elétron, conhecidos como níveis de partícula única, no volume  $V$ . Estes níveis são então preenchidos de modo consistente com o Princípio de Exclusão de Pauli. De acordo com este princípio, podemos colocar no máximo um elétron em cada estado. Os estados de um elétron são especificados

pela projeção do spin do elétron ao longo de um eixo arbitrário, podendo então assumir dois valores possíveis  $\hbar/2$  ou  $-\hbar/2$ . Assim, associado a cada nível de energia, há dois estados eletrônicos, um para cada sentido do spin do elétron. Então, na construção do estado fundamental dos  $2N$  elétrons, começamos colocando dois elétrons em cada nível e continuamos a adicionar elétrons sucessivamente, preenchendo os níveis mais baixos que ainda não estão ocupados.

A superfície que separa os níveis ocupados dos níveis não-ocupados é chamada de *superfície de Fermi* e a energia do último nível ocupado é chamada de *energia de Fermi* “ $E_F$ ”. Resumidamente, para obtermos a energia total de  $N$  elétrons no estado fundamental na superfície de Fermi, devemos adicionar todas as energias  $E_n$  de todos os níveis de um elétron, ou seja:

$$E = 2 \sum_{n=1}^N E_n. \quad (2.1)$$

## 2.2 Propriedades térmicas do gás de Fermi.

Quando a temperatura é não nula, é necessário examinarmos os estados excitados do sistema de  $2N$ -elétrons tão bem quanto seu estado fundamental, de acordo com os princípios básicos da mecânica estatística. Se um sistema de  $2N$ -partículas está em equilíbrio térmico à temperatura  $T$ , então, suas propriedades devem ser calculadas por uma média sobre os estados estacionários das  $2N$  partículas, considerando que para cada estado de energia  $E$ , há um peso  $P_N(E)$  proporcional a  $e^{-E/k_B T}$ :

$$P_N = \frac{e^{-E/k_B T}}{\sum e^{-E_\alpha^N/k_B T}}. \quad (2.2)$$

onde  $E_\alpha^N$  é a energia do  $\alpha$ -ésimo estado estacionário do sistema de  $2N$  elétrons,  $k_B$  é a constante de Boltzmann e  $T$  a temperatura [11].

O denominador de (2.2) é conhecido como a função de partição e está relacionado à energia livre de Helmholtz,  $F = U - TS$  (onde  $U$  é a energia interna e  $S$  a entropia) por

$$\sum e^{-E_\alpha^N/k_B T} = e^{-F_N/k_B T}. \quad (2.3)$$

Podemos escrever (2.2) mais compactadamente como

$$P_N(E) = e^{-(E-F_N)/k_B T}. \quad (2.4)$$

Por causa do Princípio de Exclusão de Pauli, para construir um estado de  $2N$ -elétrons devemos ocupar os primeiros  $N$  diferentes níveis de partícula única. Então cada estado estacionário pode ser especificado listando-se quais dos  $N$  níveis de um elétron foram ocupados naquele estado. Uma quantidade muito útil é  $f_i^N$ , a probabilidade de um elétron estar em um particular nível de partícula única, quando o sistema de  $N$ -elétrons está em equilíbrio térmico. Esta probabilidade é simplesmente a soma das probabilidades independentes de encontrar o sistema de  $2N$ -elétrons em estados eletrônicos no qual o  $i$ -ésimo nível está ocupado;

$$f_i^N = \sum_{\alpha=1}^N P_N(E_\alpha^N) \quad (2.5)$$

(soma sobre todos os  $N$ -estados eletrônicos  $\alpha$ , em que há um elétron no nível  $i$  de um elétron).  $f_i^N$  pode ser calculado e obtêm-se:

$$f_i^N = \frac{1}{e^{(E_i - \mu)/k_B T} + 1} \quad (2.6)$$

onde  $\mu$  é o potencial químico.

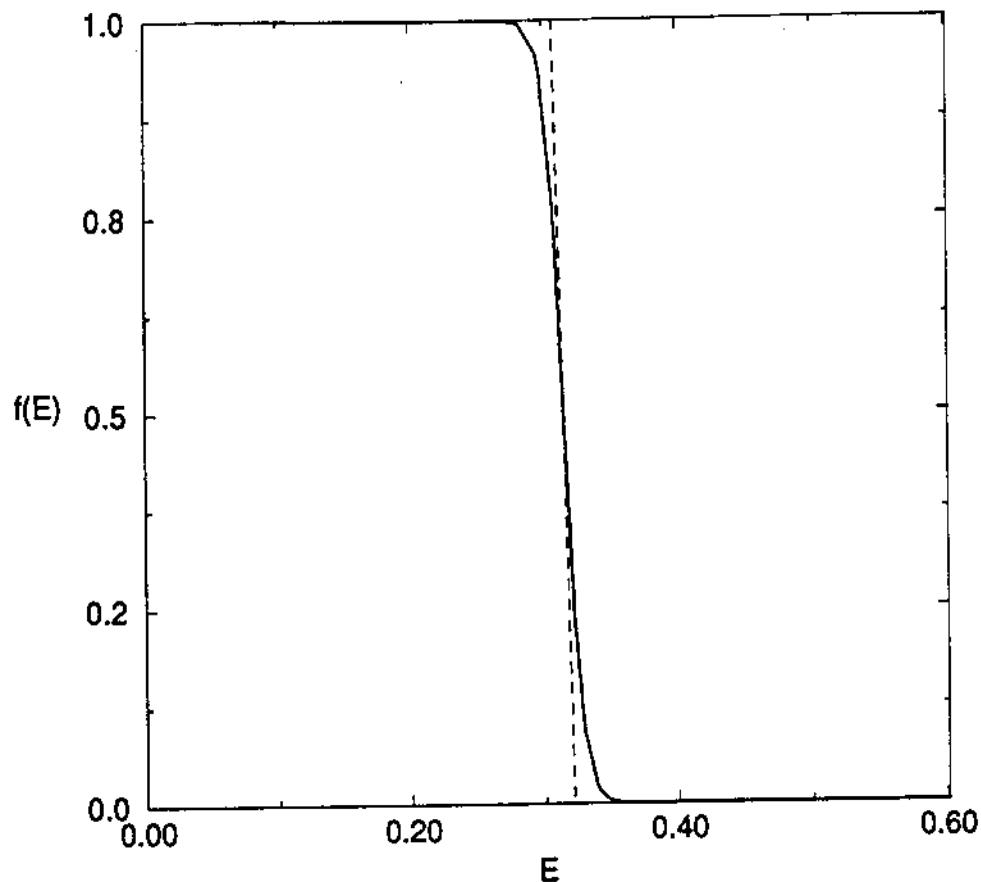


Figure 2.1: Distribuição de Fermi,  $f(E) = 1/(1 + e^{\beta(E-\mu)})$  para um dado  $\mu$ , onde  $\beta = 1/kT$ . A curva tracejada para  $T = 0$  e a curva sólida para  $K_B T \approx 0.02\mu$ . As duas curvas diferem somente na região da ordem de  $K_B T$  próxima a  $\mu$ .

Uma expressão de  $N$  pode ser obtida, uma vez que  $f_i$  é o número médio de elétrons no  $i$ -ésimo nível de um elétron. O número total de elétrons  $2N$  é dado por:

$$2N = 2 \sum_i f_i = 2 \sum_i \frac{1}{1 + e^{(E_i - \mu)/K_B T}} \quad (2.7)$$

que determina  $\mu$  como função da temperatura e de  $N$ , conforme ilustra a figura (2.1).

## 2.3 O comportamento magnético do gás de Fermi.

Voltemos agora nossa atenção para estudar o estado de equilíbrio de um gás de férmions, não-interagentes, na presença de um campo magnético  $B$ . O principal problema consiste em determinar o momento magnético resultante,  $M$ , adquirido pelo gás (como função da temperatura) e então calcular a susceptibilidade  $\chi(T)$ . De acordo com o tratamento de Boltzmann, obtemos uma susceptibilidade positiva que, em altas temperaturas, obedece á lei de Curie ( $\chi \propto T^{-1}$ ) e em baixas temperaturas, obtemos um estado de saturação. Porém, quando o sistema é tratado com base na estatística de Fermi, obtemos resultados significativamente diferentes, especialmente em baixas temperaturas. Em particular, visto que o gás de Fermi é ideal mesmo em temperatura zero, nenhuma saturação deve acontecer. Uma susceptibilidade limitante  $\chi_0$  é obtida, sendo ainda independente da temperatura, mas fortemente dependente da densidade do gás. Os primeiros estudos, nesta linha, foram feitos por Pauli em 1927. Por isso, este fenômeno é conhecido como *paramagnetismo de Pauli*.

Há ainda, em estatística quântica, outro efeito magnético que é totalmente ausente na estatística clássica. Este é diamagnético,  $\chi < 0$ , e surge da quantização das órbitas das partículas carregadas na presença de um campo magnético externo (ou para melhor dizer, da quantização da energia cinética das partículas associadas com seu movimento perpendicular à direção do campo). A existência deste efeito, foi estabelecida por Landau em 1930 e assim nos referimos a este fenômeno como o *Diamagnetismo de Landau*. Este efeito causa uma susceptibilidade adicional, que, embora de sinal negativo, comporta-se similarmente à susceptibilidade paramagnética,

obedecendo à Lei de Curie para altas temperaturas e tendendo a uma independência da temperatura, mas com valor limitante dependendo da densidade quando  $T \rightarrow 0$ . Além disso, se o campo for muito forte e se tivermos baixas temperaturas, aparecem termos oscilatórios que tornam a susceptibilidade do sistema periódica em  $1/B$ . Este efeito, conhecido como *efeito Haas-van Alphen*, foi primeiramente discutido por Peierls em 1933, embora tivesse sido observado anteriormente por Haas-van Alphen em 1930, para o gás de elétrons no bismuto.

Em geral, o comportamento magnético do gás de Fermi é determinado juntamente pelo momento magnético intrínseco das partículas e da quantização de suas órbitas. Se a interação spin-órbita é negligenciável, o comportamento resultante é dado por uma simples adição dos dois efeitos.

### 2.3.1 O diamagnetismo de Landau.

O teorema de Leuwen afirma que o fenômeno do diamagnetismo não existe na mecânica estatística clássica. Landau [18] mostrou como o diamagnetismo surge da quantização das órbitas de partículas carregadas em um campo magnético.

A susceptibilidade magnética por unidade de volume de um sistema é definida por:

$$\chi \equiv \frac{\partial \mathcal{M}}{\partial B}, \quad (2.8)$$

onde  $\mathcal{M}$  é o momento magnético médio induzido por unidade de volume do sistema ao longo da direção de um campo magnético externo  $B$ , dado por:

$$\mathcal{M} = \frac{1}{V} \left\langle -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial B} \right\rangle, \quad (2.9)$$

onde  $\mathcal{H}$  é a Hamiltoniana do sistema na presença do campo magnético  $B$ . Para campos fracos, a Hamiltoniana  $\mathcal{H}$  depende de  $B$  linearmente. No ensemble grand-canônico, temos:

$$\mathcal{M} = KT \frac{\partial}{\partial B} \frac{\log Q}{V} \quad (2.10)$$

e no ensemble canônico temos:

$$\mathcal{M} = KT \frac{\partial}{\partial B} \left( \frac{\log Z}{V} \right)_{T,V,z} \quad (2.11)$$

onde  $z = e^{\beta\mu}$  pode ser eliminado em termos de  $N$  por procedimentos usuais,  $Q$  e  $Z$  são as funções de partição grand-canônica (onde  $\mu$ -potencial químico é fixo e o número de partículas varia) e canônica (onde o número de partículas é fixo e  $\mu$  varia) respectivamente. Através da eq.(2.8), a susceptibilidade média pode ser obtida nestes dois ensembles e as diferenças físicas entre os ensembles são alguns dos importantes conceitos que emergiram, recentemente, no contexto de sistemas mesoscópicos [19]. O entendimento dessas diferenças é importante para a análise dos nossos resultados, sendo assim amplamente abordada no capítulo 6.

Um sistema é diamagnético se  $\chi < 0$  e paramagnético se  $\chi > 0$ . Para entender diamagnetismo nos termos mais simples, construímos um modelo idealizado de uma substância física que exiba diamagnetismo. As propriedades magnéticas de uma substância física são principalmente devidas aos elétrons na substância. Estes elétrons ou são ligados aos átomos ou são quase livres. Na presença do campo magnético externo, dois efeitos são importantes para as propriedades magnéticas da substância: a) Os elétrons, livres ou ligados, movem-se em órbitas quantizadas no campo magnético; b) Os spins dos elétrons tendem a alinhar-se paralelamente ao campo magnético. O núcleo atômico contribui pouco para as propriedades magnéticas, exceto pela sua influência nas funções de onda dos elétrons. Eles são maciços para

ter momentos magnéticos orbitais significativos e seus momentos magnéticos intrínsecos são cerca de  $10^{-3}$  vezes menor que o dos elétrons. O alinhamento do spin do elétron com o campo magnético dá margem ao paramagnetismo, enquanto que o movimento das órbitas dá margem ao diamagnetismo. Em uma substância física estes dois efeitos competem.

Seguindo o argumento de Peierls [13], na mecânica clássica, a projeção da órbita eletrônica no plano perpendicular ao campo é um círculo de raio

$$r = \frac{mcv}{eB} = \frac{v}{2\Omega} \quad (2.12)$$

onde  $v$  é a velocidade do elétron no plano transversal,  $c$  é a velocidade da luz e

$$\Omega = \frac{eB}{2mc} \quad (2.13)$$

é a frequência de Larmor. Sabendo que uma única órbita circular tem, num tempo médio, um momento magnético de

$$\frac{erv}{2c} = \frac{mv^2}{2B}, \quad (2.14)$$

se é induzido a considerar isto como o momento magnético por elétron. Olhando bem para esta expressão, vê-se que ela independe da carga e é inversamente proporcional ao campo  $B$ , o que torna a hipótese errada. O erro está em se assumir que há um número completo de órbitas circulares. Em um volume finito, contudo, os elétrons próximos à borda não podem completar o círculo. Além do número completo de círculos, deve-se considerar também alguns arcos circulares pertencentes a todos aqueles elétrons cujas órbitas interceptam a parede. Todos estes arcos junto à superfície cercam um volume num sentido oposto àquele da órbita completa individual e, como pode ser mostrado [13] cancelam o efeito das órbitas completas.

Este último argumento poderia dar a impressão que a existência de um diamagnetismo clássico seja questão de nosso problema ser sensível ao contorno e a natureza da superfície. Isso, contudo, pode ser evitado se, no lugar do momento associado a cada partícula, calcularmos a energia livre  $F$  do sistema e então usarmos a relação termodinâmica:

$$\mathcal{M} = -\frac{\partial F}{\partial B}. \quad (2.15)$$

Em mecânica clássica e usando estatística clássica,

$$F = -NkT \log \int \int d\mathbf{p}d\mathbf{q} v e^{-E(\mathbf{p},\mathbf{r})/kT}, \quad (2.16)$$

onde  $E(\mathbf{p}, \mathbf{r})$  é a função Hamiltoniana, expressando a energia de uma partícula como função do momento e das coordenadas. Por exemplo, para elétrons em um campo magnético,

$$E(\mathbf{p}, \mathbf{r}) = \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V(\mathbf{r}). \quad (2.17)$$

Se substituirmos como variável de integração

$$\mathbf{\Pi} = \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}, \quad (2.18)$$

em lugar de  $\mathbf{p}$  ( $\mathbf{\Pi}$  é  $m\mathbf{v}$ , onde  $\mathbf{v}$  é a velocidade do elétron) e fizermos a integração primeiro sobre  $\mathbf{\Pi}$ , é evidente que o vetor potencial  $\mathbf{A}$ , e com ele o campo magnético, desaparecem da equação. Dessa forma, a energia livre não depende do campo  $B$  e pela eq.(2.15) não há momento magnético. O mesmo argumento pode ser usado se empregarmos a estatística de Fermi para a função de energia clássica e fica claro, então, que algum momento magnético em equilíbrio térmico deve ser devido aos efeitos quânticos no movimento das partículas.

### 2.3.2 Os níveis de Landau.

A Hamiltoniana de um elétron não-relativístico em um campo magnético externo é

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 \quad (2.19)$$

onde  $e$  é positivo (a carga do elétron é  $-e$ ) e  $\mathbf{A}$  é o vetor potencial.

A equação de Schrödinger  $\mathcal{H}\psi = E\psi$  é invariante sob a transformação de Gauge

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{r}) &\rightarrow \mathbf{A}(\mathbf{r}) - \nabla\omega(\mathbf{r}) \\ \psi(\mathbf{r}) &\rightarrow \exp\left[-\frac{ie}{\hbar c}\omega(\mathbf{r})\right] \psi(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (2.20)$$

$$(2.21)$$

onde  $\omega(\mathbf{r})$  é uma função contínua arbitrária. Consideremos um campo magnético uniforme de intensidade  $B$ , paralelo a  $z$  e escolhemos o vetor potencial, via uma transformação de Gauge, tal que:

$$A_x = -By, \quad A_y = A_z = 0. \quad (2.22)$$

A Hamiltoniana fica:

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2m} \left\{ \left[ p_x - \left( \frac{eB}{c} \right) y \right]^2 + p_y^2 + p_z^2 \right\}. \quad (2.23)$$

Podemos resolver a equação de Schrödinger, assumindo uma função de onda da forma

$$\psi(x, y, z) = e^{i(k_x x + k_z z)} f(y). \quad (2.24)$$

Em tal caso,  $f(y)$  satisfaz a equação para o oscilador harmônico:

$$\left[ \frac{1}{2m} p_y^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 (y - y_0)^2 \right] f(y) = \epsilon' f(y)$$

$$\omega_0 = eB/mc, \quad y_0 = (\hbar c/eB) k_x \quad (2.25)$$

onde  $\epsilon' = \epsilon(p_z, j) - \hbar^2 k_z^2/2m$ . A frequência natural do oscilador harmônico  $\omega_0$  é a “frequência ciclotrônica”, aquela de uma carga clássica movendo-se em uma órbita circular normal ao campo magnético uniforme. Os autovalores de energia são então:

$$\epsilon(p_z, j) = \frac{p_z^2}{2m} + \hbar \omega_0 \left( j + \frac{1}{2} \right); (j = 0, 1, 2 \dots) \quad (2.26)$$

onde  $p_z = \hbar k_z$ . Estes são os níveis de Landau. Uma vez que eles são independentes de  $k_x$ , eles tem degenerescência igual ao número de valores permitidos de  $k_x$ , uma vez que  $y_0$  é limitado às dimensões do sistema. Por exemplo, colocamos o sistema em um cubo grande de tamanho  $L$  e impomos condições periódicas. Os valores permitidos de  $k_x$  são da forma  $2\pi n_x/L$  onde  $n_x = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ . Para  $y_0$  permanecer entre 0 e  $L$ , os valores de  $n_x$  devem ser positivos e limitados por:

$$g = \left( \frac{eB}{\hbar c} \right) L^2 \quad (2.27)$$

que é a degenerescência de um nível de Landau. A proporcionalidade com  $L^2$  reflete o fato de que a projeção da órbita do elétron sobre o plano  $xy$  pode ser centrada em qualquer lugar do plano sem alteração na energia. Assim, quando o campo externo é aplicado, o espectro de energia associado com o movimento no plano  $xy$  muda de um espectro contínuo para um espectro discreto e o espaçamento do nível e a degenerescência aumentam com o campo externo, conforme a figura (2.2).

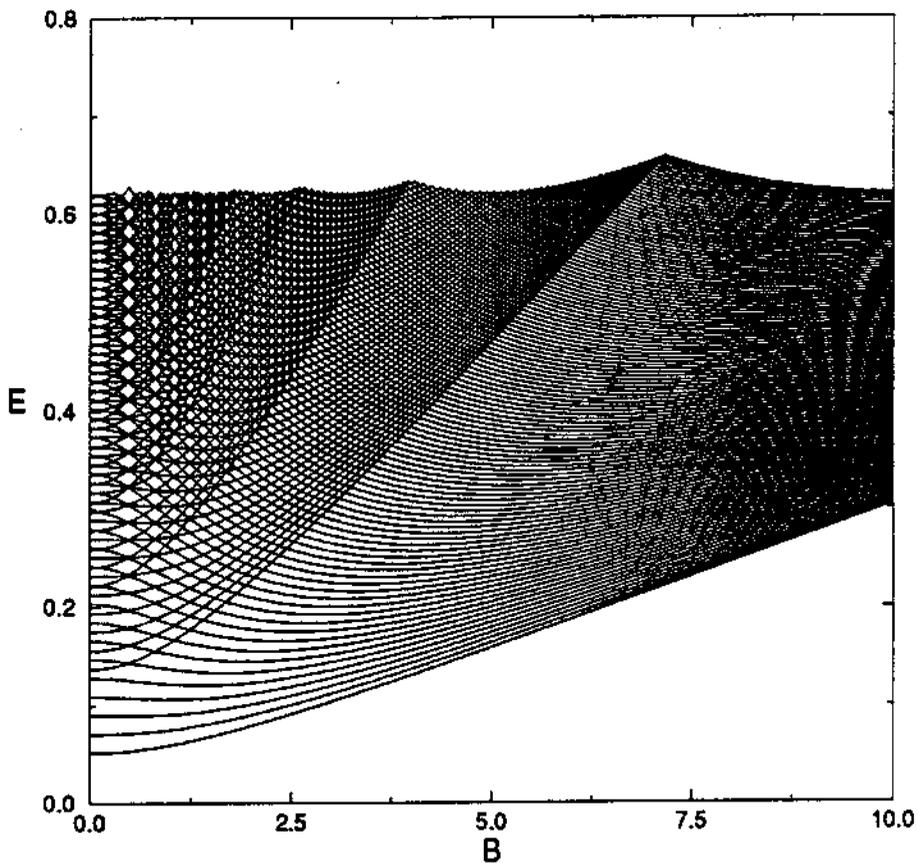


Figure 2.2: Os 120 primeiros níveis do oscilador bidimensional da eq.(5.1), como função do campo. Para campos fortes, os níveis tendem aos níveis de Landau.

Resumidamente, podemos dizer que um gás de elétrons livres à temperatura  $T$  e campo magnético  $B$  tal que  $k_B T \gg \hbar\omega$  ( $\omega = eB/mc$ ) exhibe uma resposta diamagnética dada por [18],

$$\chi_{Landau} = -\frac{\mu_B^2}{3\Delta}. \quad (2.28)$$

Sendo  $\mu_B = e\hbar/2m$  o *magneton de Bohr* e  $\Delta = 1/\bar{d}(E)$ ;  $d(E) = \sum_n \delta(E - E_n)$  é a densidade espectral,  $E_n$  são as autoenergias de partícula única e  $\bar{d}(E)$  é a densidade média.

Este comportamento persiste quando os elétrons são colocados em potenciais periódicos ou fracos. Quando o sistema é confinado em um volume finito, uma nova escala de energia é introduzida, a saber, o espaçamento médio dos níveis  $\Delta$  e leva a modificação da susceptibilidade de Landau, isto é o efeito de tamanho. O estudo das correções de efeito de tamanho foi motivado por experiências em pequenas amostras metálicas de vários modelos teóricos, círculos, cilindros, confinamento por potenciais quadrático, circular e retangular. O interesse nessa área foi renovado pelos resultados experimentais de Lévy [17], como já citado na Introdução. As medidas no *ensemble* de  $10^5$  quadrados microscópicos, com coerência de fase e balísticos, litograficamente definidos em uma heterojunção de GaAs de alta mobilidade deram uma grande susceptibilidade paramagnética em campo zero, cerca de 100 vezes a susceptibilidade de Landau (de fato, a susceptibilidade mesoscópica típica é semiclassicamente maior que a susceptibilidade de Landau). Este experimento foi importante na orientação de estudos teóricos para as questões fisicamente relevantes associadas com a resposta magnética de pequenos sistemas.

### 2.3.3 Condições de validade do modelo.

Nosso modelo teórico ignora interações elétron-elétron, possíveis rugosidades da parede que um potencial real apresenta e espalhamento por impurezas. Não levamos em conta também, a susceptibilidade devida às interações do spin com o campo. Contudo, nesse caso, Oppen [9] estimou essa susceptibilidade e para um sistema típico podemos dizer que ela é semiclassicamente pequena. Seriam nossos resultados úteis para o entendimento de propriedades de algum sistema real?

Correções para o digamagnetismo de Landau e efeitos de tamanho de-

pendem das relações entre o tamanho típico  $a$  do sistema e de outras escalas relevantes, por exemplo:

- comprimento térmico  $L_T = \hbar v_F \beta / \pi$ , onde  $v_F$  é a velocidade de Fermi,
- livre caminho médio  $l$ ,
- comprimento de coerência de fase  $L_\phi$  (levando-se em conta processos inelásticos como espalhamento elétron-fônon).

A maioria dos trabalhos, até então, negligenciavam outros mecanismos de espalhamento a não ser aquele devido ao contorno e tratavam o caso  $L_T \ll a$ , caso macroscópico ou altas temperaturas. Opostamente ao limite macroscópico, há estudos no extremo limite quântico, onde a temperatura é baixa o suficiente para permitir a resolução de níveis individuais ( $kT < \Delta$ ). No regime mesoscópico, a situação é intermediária entre esses dois prévios limites, isto é, as temperaturas são tais que  $L_T/a > 1 > \beta\Delta$  e os processos inelásticos não inibem os efeitos de interferência quântica ( $L_\phi > a$ ). Hoje em dia, como já mencionado, amostras com tais características são experimentalmente possíveis e como já citado, tem recebido considerável atenção devido à riqueza de propriedades físicas.

Quando  $L_\phi > a > l$ , dizemos que o regime é difusivo e nesse caso, o movimento do elétron é dominado por espalhamento por impurezas, enquanto que para  $L_\phi > l > a$ , o regime é dito balístico e os elétrons são principalmente espalhados pelo contorno. Visto que o número de elétrons em um sistema mesoscópico é sempre grande, partículas na energia de Fermi tem um comprimento de onda  $\lambda_F$  muito menor que o tamanho típico  $a$  do sistema ( $a/\lambda_F \propto k_F a \propto N^{1/d}$ ,  $k_F$  é o vetor de onda de Fermi,  $d$  o número de graus de liberdade e  $N$  o número de elétrons) e podem ser tratadas semiclassicamente. Amostras semicondutoras mesoscópicas de alta mobilidade são apropriadas neste contexto. Heterojunções semicondutoras altamente puras

combinadas com técnicas litográficas permite a obtenção de amostras pequenas o suficiente para se ter o regime mesoscópico balístico onde  $l > a$ . Obviamente, inevitáveis desordens ocorrem nesses sistemas reais, mas se as negligenciarmos, temos um sistema ideal. Como será mostrado no próximo capítulo, um dos resultados desse trabalho é que a aplicação de expressões semiclássicas à temperatura finita permite nos considerar somente as órbitas periódicas mais curtas. Assim, esse modelo ideal é adequado para o regime balístico de fraca e suave desordem.

## Capítulo 3

# A Fórmula Semiclássica da Magnetização para um gás de elétrons bidimensional não-interagente.

*" I [20] had intended to end ... by expressing astonishment at the power of the semiclassical way of thinking about these quantum phenomena, where one gets understanding about the real world of finite  $\hbar$  by imagining the asymptotic limite  $\hbar \rightarrow 0$ . Then, I discovered that Ulam [21] said it already:*

*"...why are asymptotic theorems so much simpler than finite approximations? Infinity does not correspond to the popular image. It is a guiding light, a star that draws us to finite ways of thinking. God knows why." "*

Recentes progressos na teoria semiclássica tem superado barreiras colocadas pelo caos clássico e lançado luz no princípio de correspondência. Idéias

semiclássicas tem também se tornado centrais para novos experimentos em física atômica, molecular e mesoscópica.

A mecânica semiclassical tem uma longa e ilustre história de prover profundos *insights* físicos em uma variedade de problemas mecânico-quânticos que abrangem muitos campos da física. Sendo uma mecânica ondulatória, firmemente baseada na dinâmica clássica, ela focaliza toda a sua atenção em um análogo clássico do sistema quântico. A observação de algumas trajetórias clássicas é suficiente para começar a desenvolver uma intuição para muitos comportamentos quânticos. Embora freqüentemente vista deste modo, a mecânica semiclassical é muito mais que uma descrição qualitativa. Como uma aproximação, ela pode ser suficientemente precisa mesmo em circunstâncias onde a dinâmica clássica é extremamente intrincada. Apesar disso, ainda existem problemas na teoria. Estes problemas surgem na presença da dinâmica não-integrável. As aproximações semiclassicas para sistemas com caos foram confrontadas, pela primeira vez, quando Gutzwiller [14] obteve sua fórmula do traço semiclassical para os autovalores de um sistema caótico, em 1970.

Hoje, o sistema mesoscópico, cuja dinâmica está situada entre os comportamento clássico e quântico, é o foco de muitas pesquisas. Nestes sistemas, as idéias semiclassicas são uma necessidade. Muitos experimentos novos com sistemas atômicos excitados e sistemas moleculares provam o domínio de números quânticos altos ou movimento classicamente caótico.

Os domínios clássicos e quânticos são relacionados por conexões que existem entre os fenômenos ondulatórios e caminhos de raios geométricos. Estas conexões são comuns em muitos campos e problemas essencialmente idênticos existem em mecânica ondulatória. Em muitas áreas da física ondulatória, o limite geométrico tem sido considerado simplesmente como uma aproximação útil para o verdadeiro comportamento ondulatório. Em mecânica quântica, nada é bastante simples. Controvérsias cercam o limite clássico. Questões

matemáticas de raios-ondulatórios assintóticos são entrelaçadas com questões da teoria de medida quântica, a interpretação de Copenhagen, o princípio da correspondência e mesmo a completeza da mecânica quântica. Entretanto, é difícil visualizar ou calcular o movimento de uma onda quântica em seis dimensões, mas é fácil imaginar ou calcular trajetórias para dois elétrons movendo-se em torno de um núcleo de hélio. Inevitavelmente, pensamos classicamente acerca de sistemas de mais de um par de partículas. Seria esplêndido se mais da física de tais problemas pudesse ser calculada com mecânica clássica e algumas regras. Além disso, métodos semiclássicos podem ser a base de cálculos que são computacionalmente não-factíveis para um tratamento totalmente quântico [22].

### 3.1 O limite semiclássico

O método semiclássico é baseado na hipótese que, quando a constante de Planck vai a zero, as grandezas quânticas podem ser expressas através de grandezas calculadas na mecânica clássica. O método *WKB* unidimensional serve como um bom exemplo deste tipo de aproximação.

Em mais de um grau de liberdade, o método *WKB* padrão só pode ser generalizado para os chamados sistemas integráveis, para os quais todas as trajetórias clássicas permanecem no toro invariante. Porém, para sistemas genéricos, uma parte finita das trajetórias clássicas cobrem regiões de dimensionalidade maior que a do toro invariante. Em particular, para sistemas ergódicos, quase todas as trajetórias clássicas espalham-se uniformemente sobre toda a superfície de energia. Nestes casos, o único método semiclássico geral é a Fórmula do Traço de Gutzwiller. De acordo com essa fórmula, a densidade de estados de um sistema bidimensional no limite de  $\hbar \rightarrow 0$ , tem a seguinte forma:

$$d(E) \stackrel{def}{=} \sum_n \delta(E - E_n) \approx \bar{d}(E) + d^{osc}(E), \quad (3.1)$$

onde  $\bar{d}(E)$  é a parte suavizada, ou média, da densidade de níveis, sendo a parte principal dada pelo termo de Weyl:

$$\bar{d}(E) = \int \frac{dp_x dx}{(2\pi\hbar)^2} \delta(E - H(p_x, x)) \quad (3.2)$$

e  $d^{osc}(E)$  é a parte oscilante que pode ser formalmente expressa como uma soma sobre todas as órbitas periódicas  $p$  com uma dada energia  $E$ :

$$d^{osc}(E) = \sum_p \sum_{n=1}^{\infty} A_p(E, n) \cos \left[ n \left( \frac{S_p(E)}{\hbar} - \frac{\pi\nu_p}{2} \right) \right] \quad (3.3)$$

onde

$$A_p(E, n) = \frac{T_p(E)}{\pi\hbar\sqrt{|\text{Det}(M_p^n - 1)|}} \quad (3.4)$$

sendo:

$$S_p(E) = \oint p dx \text{ a ação clássica calculada ao longo da órbita periódica primitiva } p,$$

$$T_p(E) = \frac{\partial S_p(E)}{\partial E} \text{ é o período da órbita periódica primitiva}$$

$\nu_p$  é uma fase adicional que surge devido à existência de pontos na  $p$  onde a aproximação semiclássica deve ser modificada

$M_p$  é a matriz monodromia  $2 \times 2$  e

$$\sqrt{|Det(M_p^n - 1)|} = \begin{cases} 2 \sinh(v_n/2) & \text{para órbita hiperbólica direta} \\ 2 \cosh(v_n/2) & \text{para órbita hiperbólica inversa} \\ 2 \sin(u_n/2) & \text{para órbita elíptica} \end{cases}$$

onde  $v_n$  e  $u_n$  são autovalores da matriz monodromia  $M$ , discutidos na próxima seção e a soma em  $n$  leva em conta as repetições. .

Tendo a fórmula para a densidade de níveis, podemos encontrar outras funções espectrais importantes, como, por exemplo, a função escada, que conta o número de níveis com energia menor que um dado valor  $E$ .

A função escada é definida por:

$$N(E) \stackrel{def}{=} \int_{-\infty}^E d(E') dE' \approx \bar{N}(E) + N^{osc}(E), \quad (3.5)$$

onde  $\bar{N}(E)$  é o termo de Weyl dado por:

$$\bar{N}(E) = \int \frac{dpdq}{(2\pi\hbar)^2} \Theta(E - H(p, q)) \quad (3.6)$$

e  $N^{osc}(E)$  é o termo oscilante dado por:

$$N^{osc}(E) = \frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n \sqrt{|Det(M_p^n - 1)|}} \sin \left[ n \left( \frac{S_p(E)}{\hbar} - \frac{\pi}{2} \nu_p \right) \right]. \quad (3.7)$$

As fórmulas (3.1,3.2,3.5) e (3.7) formam a base da aproximação semiclássica para sistemas não-integráveis, muito embora, em geral, elas não sejam exatas. As correções para o termo de Weyl podem ser calculadas, mas a forma explícita de uma correção para o termo oscilatório ainda não é bem conhecida.

### 3.1.1 O denominador de $A_p$ na densidade oscilante e a estabilidade das órbitas periódicas.

Como vimos,  $A_p$  pode ser escrito em termos dos autovalores da matriz monodromia  $M$ . Para entender um pouco melhor, como esses autovalores aparecem na fórmula do Traço, vamos imaginar uma seção de Poincaré que corta a órbita periódica no ponto  $(\bar{q}, \bar{p})$ . Para  $f$  graus de liberdade, a seção nada mais é que uma variedade de  $2 \times (f - 1)$  dimensões na superfície de energia, cortando a órbita periódica transversalmente em  $(\bar{q}, \bar{p})$ . O mapa da seção tem um ponto fixo em  $(\bar{q}, \bar{p})$  e queremos calcular este mapa até a primeira ordem no deslocamento  $(\delta q, \delta p)$  em torno do ponto fixo, assim:

$$\begin{aligned}\delta q'' &= A\delta q' + B\delta p' \\ \delta p'' &= C\delta q' + D\delta p',\end{aligned}\tag{3.8}$$

onde  $A, \dots, D$  são matrizes  $(f - 1) \times (f - 1)$ . A matriz total deste mapa  $2(f - 1) \times 2(f - 1)$  é a chamada *matriz monodromia*.

Partindo das fórmulas gerais:

$$p' = -\frac{\partial S(q', q'', E)}{\partial q'} \quad \text{e} \quad p'' = \frac{\partial S(q', q'', E)}{\partial q''},\tag{3.9}$$

a transformação com preservação de área, pode ser escrita como:

$$\begin{aligned}\delta p'_i &= -\sum_{j=2}^3 \frac{\partial^2 S}{\partial q'_i \partial q'_j} \delta q'_j - \sum_{j=2}^3 \frac{\partial^2 S}{\partial q'_i \partial q''_j} \delta q''_j = -a\delta q'_i - b\delta q''_i \\ \delta p''_i &= \sum_{j=2}^3 \frac{\partial^2 S}{\partial q''_i \partial q'_j} \delta q'_j + \sum_{j=2}^3 \frac{\partial^2 S}{\partial q''_i \partial q''_j} \delta q''_j = b^\dagger \delta q'_i + c\delta q''_i\end{aligned}\tag{3.10}$$

onde o índice  $i$  assume os valores  $2, 3, \dots, f$ . O índice 1 se refere à coordenada  $q_1$  que segue ao longo da órbita periódica, enquanto que  $q_2, q_3, \dots, q_f$  são

perpendiculares a órbita e  $S$  é a ação;  $a, b, c$  são as abreviações para as várias derivadas mistas escritas como matrizes e  $b^\dagger$  é a transposta de  $b$ . As matrizes  $A, \dots, D$  e  $a, b, c$  estão relacionadas através de

$$\begin{aligned} A &= -b^{-1}a, & B &= -b^{-1}, \\ C &= b^\dagger - cb^{-1}a, & D &= -cb^{-1}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Somente a existência da inversa  $b^{-1}$  é requerida ou, equivalentemente, a regularidade da matriz  $\partial^2 S / \partial q' \partial q''$  para variações na seção. Esta condição implica que  $q''$  não deve ser um ponto conjugado de  $q'$  em uma energia fixa.

Os autovalores da matriz monodromia são dados pelas raízes do determinante característico,  $F(\lambda)$ :

$$F(\lambda) = \text{Det} \begin{pmatrix} A - \lambda I & B \\ C & D - \lambda I \end{pmatrix}$$

As expressões (3.11) são agora inseridas e o determinante  $2(f-1) \times 2(f-1)$  é reduzido a um determinante  $(f-1) \times (f-1)$  por algumas manipulações das linhas e colunas. Desta maneira encontramos que

$$F(\lambda) = \frac{\det(b^\dagger + \lambda a + \lambda c + \lambda^2 b)}{\det(b)}. \quad (3.12)$$

Como  $F(\lambda) = \det|M - \lambda I|$ , então,

$$\sqrt{|\text{Det}(M - I)|} = \sqrt{|F(\lambda)|},$$

de forma que, as características mais importantes da matriz monodromia podem ser vistas da eq.(3.12). Dado que o polinômio  $F(\lambda)$  é real, seus zeros aparecem em pares de complexos conjugados. Ainda mais, se  $\lambda$  é uma solução de  $F(\lambda) = 0$ , então  $F(1/\lambda) = 0$ , pois as matrizes  $a$  e  $c$  são simétricas, enquanto que  $b^\dagger$  é a transposta de  $b$  e o determinante é invariante sob transposição. Assim, para dois graus de liberdade  $f = 2$ , podemos distinguir os três casos mais importantes:

1.  $F(\lambda)$  tem duas raízes reais,  $\lambda = e^u$  e  $\lambda = e^{-u}$  e a órbita periódica é instável ou hiperbólica direta fig.(3.1), sendo

$$F(\lambda) = -4 \sinh^2 \frac{u}{2} \quad (3.13)$$

2.  $F(\lambda)$  tem duas raízes no círculo unitário,  $\lambda = e^{iv}$  e  $\lambda = e^{-iv}$  e a órbita periódica é estável ou elíptica fig.(3.1), sendo

$$F(\lambda) = 4 \sin^2 \frac{v}{2} \quad (3.14)$$

3.  $F(\lambda)$  tem duas raízes reais,  $\lambda = e^{-u}$  e  $\lambda = -e^{-u}$  e a órbita periódica é instável inversa ou hiperbólica inversa fig. (3.1), sendo

$$F(\lambda) = 4 \cosh^2 \frac{u}{2} \quad (3.15)$$

O caso limite  $\lambda = 1/\lambda = 1$  corresponde a mapas parabólicos na vizinhança da órbita periódica e indicam que o sistema é, pelo menos localmente, integrável e nesse caso, a fórmula do Traço não é aplicável. Se observarmos a órbita elíptica, percebemos também que temos singularidades toda vez que  $nv =$  um múltiplo de  $2\pi$ . Porém essas singularidades são não-físicas e podem ser representadas por uma função mais razoável de  $v$ , sendo assim removíveis, como Gutzwiller argumenta em [14] e Ozorio de Almeida e Hannay mostram em [16].

Um exercício relativamente simples, porém muito ilustrativo, consiste em fazermos a soma de uma única órbita periódica e todas as suas repetições no caso de uma órbita estável e outra instável [14]. A comparação dos resultados obtidos nos dois casos, mostra que as órbitas periódicas estáveis que obedecem à condição

$$S = (2m\pi + v/2)\hbar$$

contribuem com singularidades (funções delta) na densidade semiclássica, enquanto que as órbitas periódicas instáveis dão picos mais alargados cujos máximos estão localizados em

$$S = (m + 1/4)2\pi\hbar$$

e cuja largura é dada por  $u\hbar$ .

### 3.2 A fórmula semiclássica da magnetização para o gás de elétrons.

A aproximação semiclássica é central na análise que será apresentada agora. Ela diz respeito aos termos principais da expansão em que  $\hbar$  faz o papel de um parâmetro pequeno e, assim, reflete a dinâmica do correspondente sistema clássico. A caracterização desta dinâmica é crucial, uma vez que o método semiclássico de quantização apropriado depende desta dinâmica.

A susceptibilidade magnética de um sistema de partículas carregadas foi proposto primeiramente por Nakamura e Thomas [4] como uma quantidade cujo comportamento quântico dependeria sensivelmente da natureza regular ou caótica do sistema clássico associado. Para estudar esta possível dependência, nós consideramos um sistema de  $2P$  elétrons não-interagentes,

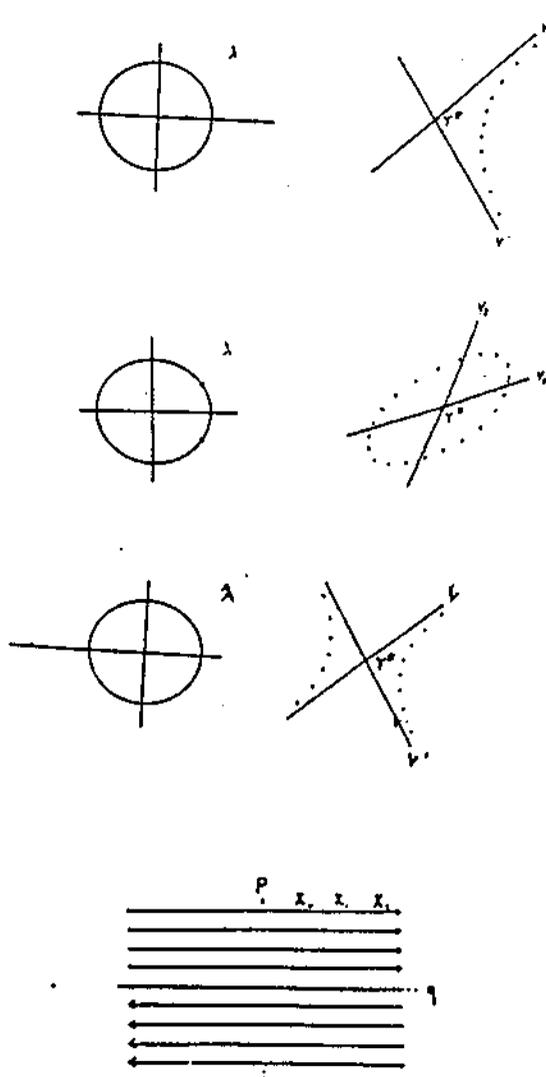


Figure 3.1: À esquerda temos a representação geométrica para os autovalores da matriz monodromia no plano complexo, tendo o círculo raio unitário. À direita, a distribuição de pontos na proximidade do ponto fixo, ou seja da órbita periódica. De cima para baixo, estão ilustrados os casos: hiperbólica direta, estável, hiperbólica inversa e parabólica.

movendo-se em um potencial bidimensional não-integrável  $V(x, y)$  e sujeitos a um campo magnético  $B$  na direção perpendicular a  $z$ . A formulação para este sistema será apresentada a seguir.

### 3.2.1 Termodinâmica

A definição termodinâmica da magnetização a temperatura  $T$  é de acordo com (2.15):

$$\mathcal{M}_T(B) = -\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial B} \quad (3.16)$$

onde

$$\mathcal{F} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \log \mathcal{Z} \quad (3.17)$$

é a energia livre de Helmholtz,  $\mathcal{Z}$  é a função de partição e  $\beta = 1/k_B T$ , onde  $k_B$  é a constante de Boltzmann. Para um sistema de  $2P$  férmions não-interagentes, à temperatura nula,  $\mathcal{F}$  é a energia do estado fundamental, dada por  $2 \sum_{n=1}^P E_n(B)$ , onde  $E_n(B)$  são as energias de partícula independente no campo magnético  $B$  (ver seção 2.1). Neste caso, a magnetização por partícula é simplesmente

$$m_0(B) \equiv \frac{1}{2P} \mathcal{M}_0(B) = -\frac{1}{P} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\partial E_n}{\partial B}. \quad (3.18)$$

Para levarmos em conta temperaturas finitas, é necessário incorporar a função de Fermi (2.7):

$$g_T(E) = \frac{1}{1 + z^{-1} e^{\beta E}}. \quad (3.19)$$

onde  $z = e^{\beta \mu}$  é o potencial químico, que depende do campo magnético e da temperatura através do vínculo

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{1 + z^{-1} e^{\beta E_n}} = P. \quad (3.20)$$

Em termos de  $g_T(E)$ , a magnetização por partícula em temperaturas finitas é dada por

$$m_T(B) = -\frac{1}{P} \sum_{n=1}^{\infty} g_T(E_n) \frac{\partial E_n}{\partial B}. \quad (3.21)$$

Note que, de acordo com (3.19), quando  $T \rightarrow 0$ ,  $g_T(E_n)$  tende à função degrau centrada na energia de Fermi,  $E_f = \log z/\beta$ , que satisfaz  $E_P \leq E_f \leq E_{P+1}$ . Assim, neste limite, (3.21) se reduz a (3.18). Pode-se também deduzir a expressão (3.21) diretamente a partir do potencial grand-canônico

$$\Omega = -\frac{1}{P} \int dE d(E) \ln(1 + e^{\beta(\mu - E)})$$

e da relação termodinâmica

$$\left( \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial B} \right)_N = \left( \frac{\partial \Omega}{\partial B} \right)_{\mu = \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial N} |_B}.$$

Embora seja mais fácil o uso do potencial grand-canônico, visto que neste a densidade  $d(E)$  aparece explicitamente, há diferenças que tornam sutil o uso de um ou outro potencial. Nós discutiremos a questão de se usar o ensemble canônico ou o grand-canônico no capítulo 6.

### 3.2.2 A magnetização e a função escada.

Vamos definir aqui, uma função degrau suavizada, dependente da temperatura

$$N_T(E, B) = \frac{1}{\underbrace{1 + z^{-1} e^{\beta E}}_{g(E)}} \sum_{n=1}^{\infty} \Theta(E - E_n(B)), \quad (3.22)$$

onde  $g(E)$  é a função de Fermi (3.19) e  $z$  depende de  $B$  via (3.20).

Derivamos (3.22) em relação a  $B$ :

$$\frac{\partial N_T}{\partial B} = \sum_n -\frac{\partial E_n}{\partial B} \delta(E - E_n(B)) g(E) + \sum_n \Theta(E - E_n(B)) \frac{\partial z}{\partial B} e^{\beta E} z^{-2} [g(E)]^2.$$

Integrando em  $E$  e dividindo por  $P$  obtemos:

$$\frac{1}{P} \int_0^{\infty} \frac{\partial N_T}{\partial B} dE = \underbrace{-\frac{1}{P} \sum_n \frac{\partial E_n}{\partial B} g(E_n)}_{m_T} + \sum_n \frac{1}{P z^2} \frac{\partial z}{\partial B} \underbrace{\int_{E_n}^{\infty} e^{\beta E} g^2(E) dE}_{\frac{2}{3} g(E_n)}. \quad (3.23)$$

De forma que,

$$\begin{aligned} \frac{1}{P} \int_0^{\infty} \frac{\partial N_T}{\partial B} dE &= m_T + \sum_n \frac{1}{P z \beta} \frac{\partial z}{\partial B} g(E_n) \\ &= m_T + \frac{1}{\beta z} \frac{\partial z}{\partial B} \\ &= m_T + \frac{\partial E_f}{\partial B}. \end{aligned} \quad (3.24)$$

sendo  $z$  dado por  $z = e^{\beta E_f}$  e  $E_f$  é a energia de Fermi.

Podemos ainda fazer:

$$\begin{aligned} N_T &= g(E) N \\ \frac{\partial N_T}{\partial B} &= \frac{\partial g}{\partial B} N + g(E) \frac{\partial N}{\partial B}. \end{aligned}$$

Vamos integrar em  $E$  e dividir por  $P$ , cada um dos termos desta equação. O resultado do termo da esquerda foi calculado em (3.24). Vamos fazer então, a integral para o primeiro termo à direita.

$$\begin{aligned}
\frac{1}{P} \int_0^\infty \frac{\partial g(E)}{\partial B} N dE &= \frac{1}{P} \int_0^\infty \frac{1}{z^2} \frac{\partial z}{\partial B} g^2(E) e^{\beta E} N(E) dE & (3.25) \\
&= \frac{1}{P z^2} \frac{\partial z}{\partial B} \sum_{n=1}^\infty \int_{E_n}^\infty e^{\beta E} g^2(E) dE \\
&= \frac{\partial E_f}{\partial B}
\end{aligned}$$

de forma que temos:

$$\frac{1}{P} \int_0^\infty \frac{\partial N_T}{\partial B} dE = \left\{ \begin{array}{l} m_T + \frac{\partial E_f}{\partial B} \\ \frac{\partial E_f}{\partial B} + \frac{1}{P} \int_0^\infty g(E') \frac{\partial N}{\partial B} dE' \end{array} \right. \quad (3.26)$$

Da comparação destes dois resultados em (3.26), obtemos:

$$m_T = \frac{1}{P} \int_0^\infty g(E) \frac{\partial N}{\partial B} dE \quad (3.27)$$

Ou seja, a magnetização está relacionada à derivada da função escada (3.5) com relação ao campo  $B$ , via uma integral em  $E$ . O fator  $g(E)$  é a distribuição de Fermi, levando em conta o comportamento da magnetização com a temperatura. De acordo com (3.5), podemos escrever:

$$N(E, B) = \sum_{n=1}^\infty \Theta(E - E_n(B)) \approx \bar{N} + N^{osc}. \quad (3.28)$$

Podemos usar o fato que quando  $\hbar \rightarrow 0$ , o termo médio de  $N$  pode ser representado na forma:

$$\bar{N} = N_{Weyl} + \text{correções} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int \Theta(E - H(p, q)) d^2 p d^2 q + \text{correções}, \quad (3.29)$$

onde os termos da correção constituem uma série assintótica, em potências de  $\hbar$ , e a parte oscilatória é dada por (3.7):

$$N^{osc}(E, B) = \frac{1}{\pi} \sum_p \sum_{j=1}^{\infty} \frac{A_{p,j}}{j} \sin \left( j \frac{S_p}{\hbar} - \frac{\pi}{2} \sigma_{p,j} \right) \quad (3.30)$$

com

$$A_{p,j}(E, B) = \frac{1}{\sqrt{|Det(M_p^j - 1)|}},$$

onde  $M$ ,  $S$  e  $\sigma$  são a matriz monodromia, a ação e o índice de Maslov respectivamente, da órbita primitiva, indexada por  $p$  e suas repetições por  $j$ .

De (3.27) e (3.28) vemos que a magnetização por partícula é composta pela contribuição de dois termos:

$$m_T \approx \bar{m}_T(B) + m_T^{osc}, \quad (3.31)$$

onde  $\bar{m}_T$  é a parte média originária do termo de Weyl e  $m_T^{osc}$  é uma parte oscilante, relacionada à contribuição de órbitas periódicas.

### 3.2.3 A magnetização originária do termo médio.

Vamos considerar primeiramente as contribuições do termo  $\bar{N}$  para a magnetização  $\bar{m}$ . Conforme discutido na seção 2.3.1, o termo de Weyl (3.2,3.6) não contribui para a magnetização de sistemas com um Hamiltoniano do tipo energia cinética mais energia potencial, pois

$$\bar{d}(E) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int \delta \left( E - \frac{1}{2m} \left( (\mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A})^2 - V(q) \right) \right) d^2 p d^2 q,$$

fazendo  $\Pi = \mathbf{p} - e\mathbf{A}(\mathbf{q})/c$ ,  $R = q$

temos que  $J = \partial(\Pi, R)/\partial(p, q) = 1$  e assim,

$$\bar{d}(E) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int \delta \left( E - \frac{1}{2m} \Pi^2 - V(R) \right) d^2 R d^2 \Pi \Rightarrow \text{independe de } \mathbf{A}.$$

Ou seja,  $N_{Weyl}$  independe de  $B$ . Fica claro, aqui, que as correções quânto-mecânicas, pelo menos o termo dominante, precisam ser calculadas. É evidente que, dependendo do potencial, o cálculo poderá ser mais ou menos complicado. Para ilustrar, vamos mostrar como fica o termo médio para um oscilador harmônico em um campo magnético.

A Hamiltoniana é dada por ( $m = c = e = 1$ )

$$H = \frac{1}{2}(p_x - \frac{B}{2}y)^2 + \frac{1}{2}(p_y + \frac{B}{2}x)^2 + \frac{1}{2}\varphi_1^2 x^2 + \frac{1}{2}\varphi_2^2 y^2 \quad (3.32)$$

Em termos da função de partição

$$\mathcal{Z}(\beta) = \text{tr}(e^{-\beta H}), \quad (3.33)$$

podemos escrever  $N(E)$  como a transformada de Laplace inversa de  $\mathcal{Z}(\beta)/\beta$  [23]. Para o oscilador, temos:

$$\mathcal{Z}(\beta) = \frac{1}{4 \sinh(\beta \hbar \omega_1) \sinh(\beta \hbar \omega_2)} = \frac{1}{\hbar^2 \beta^2 \omega_1 \omega_2} \left[ 1 - \frac{\hbar^2 \beta^2}{4!} (\omega_1^2 + \omega_2^2) + \mathcal{O}(\hbar^4 \beta^4) \right] \quad (3.34)$$

sendo

$$\begin{aligned} \omega_1 &= \frac{1}{2} \left[ \sqrt{B^2 + (\varphi_1 + \varphi_2)^2} + \sqrt{B^2 + (\varphi_1 - \varphi_2)^2} \right] \\ \omega_2 &= \frac{1}{2} \left[ \sqrt{B^2 + (\varphi_1 + \varphi_2)^2} - \sqrt{B^2 + (\varphi_1 - \varphi_2)^2} \right]. \end{aligned} \quad (3.35)$$

Portanto, encontramos que

$$\begin{aligned} \overline{N}(E) &= \frac{E^2}{2\hbar^2 \omega_1 \omega_2} - \frac{(\omega_1^2 + \omega_2^2)}{4! \omega_1 \omega_2} \\ &= \frac{E^2}{2\hbar^2 \varphi_1 \varphi_2} - \frac{(B^2 + \varphi_1^2 + \varphi_2^2)}{4! \varphi_1 \varphi_2}. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Conforme previsto, o primeiro termo (termo de Weyl) em (3.36) não depende de  $B$ . Portanto, a única contribuição para a magnetização média (3.31) vem do segundo termo, que dá:

$$\bar{m}_0(B) = \frac{BE_f}{12P\varphi_1\varphi_2}. \quad (3.37)$$

(3.37) é a magnetização média à temperatura zero, para  $P$  níveis ocupados, e  $E_f$  é a energia de Fermi, ou a energia do último nível ocupado. O que é interessante de ser observado aqui, é que esta média não depende da estabilidade das órbitas clássicas, ela é determinada somente pelas propriedades globais do sistema.

Voltemos para a eq.(2.28). Fazendo  $m = e = 1$  e lembrando que  $\bar{d}(E) = d\bar{N}(E)/dE$  ( $\bar{N}(E)$  dada em (3.36) vemos que a eq.(3.37) é a susceptibilidade de Landau por partícula do oscilador bidimensional com  $2P$  elétrons.

### 3.2.4 A magnetização originária das órbitas periódicas.

De (3.27) e (3.30) temos:

$$m_T^{osc} = \sum_p \sum_{j=1}^{\infty} \frac{1}{\pi\hbar P} \int_0^{\infty} \frac{1}{1 + z^{-1}e^{\beta E}} a_{p,j} A_{p,j} \cos\left(j\frac{S_p}{\hbar} - \frac{\pi}{2}\sigma_{p,j}\right) dE \quad (3.38)$$

onde

$$a_p = \frac{\partial S_p}{\partial B} \quad (3.39)$$

é o análogo do período primitivo  $\tau_p$  (3.4), que aparece na densidade semiclassical de estados. Assumindo que  $K_B T \ll E_f$ , a integral em (3.38) pode ser calculada (Apêndice A) no limite semiclassical, dando:

$$m_T^{osc} \approx \frac{2}{P\hbar\beta} \sum_p \sum_{j=1}^{\infty} A_{p,j} a_p \sin\left(j\frac{S_p}{\hbar} - \frac{\pi}{2}j\sigma_p\right) \frac{\exp(-\pi\tau_{pj}/(\hbar\beta))}{[1 - \exp(-2\pi\tau_{pj}/(\hbar\beta))]} \quad (3.40)$$

onde todas as grandezas são calculadas na energia de Fermi  $E = E_f$ . É claro, nesta expressão, que cada órbita periódica contribui para  $m_T^{osc}$  com uma oscilação sinusoidal de período  $2\pi\hbar/ja_p$ . Podemos ver, também, que o efeito de temperaturas finitas é truncar a soma de órbitas periódicas em um período  $\tau$ . Órbitas longas, com  $\tau_{pj} > \hbar\beta/\pi$  não contribuem e, portanto, a soma (3.40) é essencialmente finita.

Se tomarmos o limite de (3.38) quando  $T \rightarrow 0$ , obtemos:

$$m_0^{osc} \approx \frac{1}{\pi P} \sum_p \sum_{j=1}^{\infty} \frac{A_{p,j}}{j\tau_p} a_p \sin\left(j\frac{S_p}{\hbar} - \frac{\pi}{2}j\sigma_p\right) \quad (3.41)$$

sendo novamente, todas as grandezas calculadas na energia de Fermi.

A fim de estudar as flutuações na magnetização, é útil calcular a transformada de Fourier de  $m_T^{osc}$ . Uma vez que  $m_T(B)$  é uma função par de  $B$ , a transformada pode ser definida como

$$\tilde{m}_T^{osc}(a) = \int_0^{\infty} m_T^{osc}(B) \sin\left(\frac{aB}{\hbar}\right) dB. \quad (3.42)$$

Para baixas temperaturas, podemos substituir (3.40) para  $m_T^{osc}(B)$  na eq.(3.42) e obtemos no limite semiclássico, para  $i$  indexando as soluções de  $ja_p(B_i) = a$ :

$$\begin{aligned} \tilde{m}_T^{osc}(a) &= \frac{\pi}{P\beta} \sum_p \sum_{j=1}^{\infty} \sum_i \frac{A_{p,j} a_p \exp(-\pi\tau_{pj}/(\hbar\beta))}{[1 - \exp(-2\pi\tau_{pj}/(\hbar\beta))]} \\ &\times \cos\left(j\frac{S_p}{\hbar} - \frac{\pi}{2}\sigma_{pj}\right) \{\delta(ja_p - a) - \delta(ja_p + a)\} \quad (3.43) \end{aligned}$$

que mostra picos em  $a = ja_p(E_f)$  em analogia com os picos em  $\tau = j\partial S_p/\partial E$  da transformada de Fourier da densidade de estados [3], [24], [25].

Para isolar contribuições de órbitas com  $a_p$ 's menores que um certo valor, é necessário suavizar  $m_T^{osc}(B)$  com relação a  $B$ . Portanto, tomamos a convolução de (3.40) com uma gaussiana de largura  $\lambda$ , definida como:

$$m_{T,\lambda}^{osc}(B) \equiv \frac{1}{\lambda\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} m_T^{osc}(B') e^{-(B-B')^2/2\lambda^2} dB'. \quad (3.44)$$

Para temperaturas baixas, a forma semiclássica de  $m_{T,\lambda}^{osc}$  pode ser obtida substituindo-se a soma de órbitas periódicas (3.40). Obtemos então como resultado:

$$m_{T,\lambda}^{osc}(B) \approx \frac{2}{\hbar P \beta} \sum_{p,j} A_{p,j} a_p \frac{\exp(-\pi\tau_{pj}/\hbar\beta)}{[1 - \exp(-2\pi\tau_{pj}/(\hbar\beta))]} \times \sin\left(j\frac{S_p}{\hbar} - \frac{\pi}{2}\sigma_{pj}\right) \exp\left(\frac{-\lambda^2 j^2 a_p^2(E_f, B)}{2\hbar^2}\right) \quad (3.45)$$

que mostra claramente o truncamento desejado em  $a_p$ .

Concluindo, temos que o espectro de potência de  $m_{T,\lambda}^{osc}(B)$  dá picos em  $ja_p = j\partial S_p/\partial B$  e trunca a contribuição das órbitas longas de  $T \neq 0$  e de órbitas de grande  $a_p$  se  $\lambda \neq 0$ . Expressões equivalentes podem ser obtidas para a susceptibilidade magnética, diferenciando-se (3.40) e (3.41) em relação ao campo  $B$ . Claramente, isto implica que termos oscilatórios em  $\chi(B)$  são  $\mathcal{O}(1/\hbar)$  maiores que os termos correspondentes em  $m(B)$  e, assim, as flutuações serão significativamente ampliadas neste caso.

Uma teoria similar para bilhares foi feita por Agam [5]. Ele considera as ressonâncias do tipo Riemann-Siegel [26], obtendo a susceptibilidade via uma soma finita sobre pseudo órbitas periódicas. Contudo, ele não considera as correções do termo de Weyl, que como vimos, acabam tendo um papel importante na determinação das propriedades diamagnéticas.

No próximo capítulo, estudaremos as características do potencial em que essa teoria será aplicada.

# Capítulo 4

## O campo de Prova: Potencial Nelson.

Os sistemas usualmente estudados, em termos de propriedades diamagnéticas, [4], [5] e [9], consistiram de gases ideais confinados em potenciais bidimensionais do tipo bilhares ou integráveis ou totalmente caóticos. Naturalmente, existem ótimas razões para se estudar bilhares magnéticos, pois eles são modelos primitivos para os mais variados tipos de sistemas ligados, tais como átomos em campo magnético. Do ponto de vista clássico, há também, segundo Robnik e Berry [27], uma série de motivos para estudá-los, uma delas é que o campo magnético quebra a simetria de reversão temporal e isso poderia dar margem a novos fenômenos na distribuição dos níveis de energia. Além disso, suas propriedades magnéticas poderiam ajudar no melhor entendimento da mecânica estatística do diamagnetismo [28].

Toda essa motivação conduziu uma década de pesquisas bem sucedidas. Mostrou-se teórica [6] e experimentalmente [7] que a condutância de microestruturas balísticas é sensível à dinâmica clássica caótica ou integrável. Ficou então uma pergunta: “Seria a susceptibilidade também sensível a

dinâmica clássica?” Embora criticado por Németh [8], o trabalho de Nakamura e Thomas [4] foi pioneiro no sentido de tentar responder essa questão. Os trabalhos nosso [15], de Oppen [9] e Agam [5] acabaram por resolver o impasse criado até então, pelas conclusões divergentes de Nakamura e Thomas e Németh. Dos trabalhos de Oppen e de Agam, temos que no limite de campos muito baixos a susceptibilidade semiclássica de bilhares integráveis é muito maior que a daqueles completamente caóticos.

Por outro lado, sabemos que os sistemas mais reais, devem corresponder a, pelo menos, bilhares que exibam uma dinâmica mista, com ambas regiões caótica e regular no espaço de fase. Como seria a amplitude da susceptibilidade nestes sistemas? Esta ainda era uma questão em aberto, que vamos agora tentar responder. Veremos que a transição de um sistema caótico a regular, pelo aumento do campo magnético, tem uma física nova e interessante.

A Hamiltoniana, escolhida para nossos cálculos numéricos, descreve o comportamento de uma partícula carregada, de massa unitária, numa superfície bidimensional e sujeita a um campo magnético  $B_0$  perpendicular a esta superfície.

$$\mathcal{H}(x, y, p_x, p_y) = \frac{1}{2} \left( p_x - \frac{B}{2} y \right)^2 + \frac{1}{2} \left( p_y + \frac{B}{2} x \right)^2 + V(x, y), \quad (4.1)$$

onde  $B = eB_0/2c$ ,  $e$  é a carga da partícula e  $c$  a velocidade da luz. O potencial escolhido foi:

$$V(x, y) = \left( y - \frac{x^2}{2} \right)^2 + \mu \frac{x^2}{2} \quad (4.2)$$

conhecido por Potencial Nelson [29]. Para  $B = 0$ , as equações (4.1 e 4.2) representam esse sistema não-genérico, bem conhecido, clássica [29], [30] e

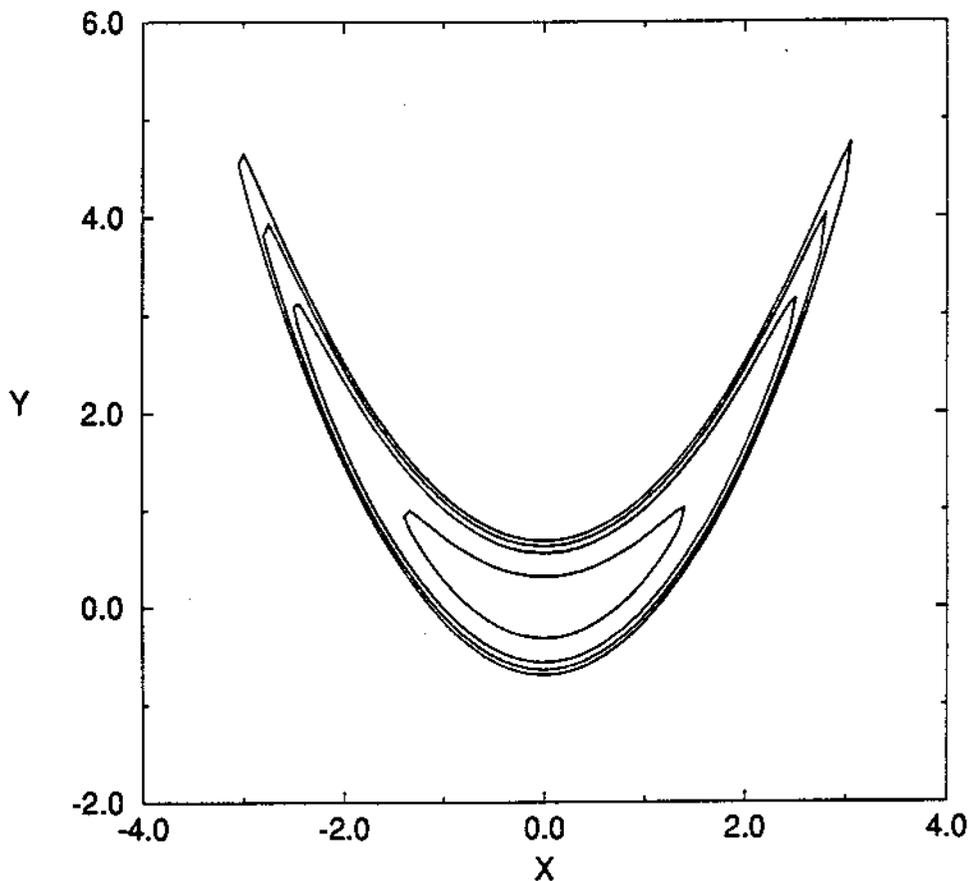


Figure 4.1: Curvas equipotenciais do potencial Nelson para as seguintes energias 0.1, 0.314, 0.403 e 0.475 da mais interna para fora.

quanticamente [25] , [31].

## 4.1 O Sistema Clássico.

O potencial Nelson tem aspecto parabólico e é simétrico em relação ao eixo- $y$ , fig. (4.1). A Hamiltoniana não é integrável e apresenta um caos suave (soft chaos). Assim como todos os sistemas genéricos de dois graus de liberdade, as órbitas periódicas deste potencial formam famílias a um parâmetro,

sendo o parâmetro o período  $\tau$  ou a energia  $E$ . Quando o parâmetro é variado, nos movemos ao longo da família e existem valores deste parâmetro, para os quais novas famílias são geradas. Os pontos  $(E_b, \tau_b)$ , onde isso acontece são chamados pontos de bifurcação. Os períodos das trajetórias bifurcadas são um múltiplo inteiro da trajetória inicial. As trajetórias periódicas podem ou não tornarem-se hiperbólicas, quando sofrem uma bifurcação e as novas famílias ramificadas podem ser elípticas ou hiperbólicas. Estudos numéricos e analíticos de bifurcações das soluções periódicas foram feitos por Aguiar et al [32], [33] e Baranger et al [29]. Na ref. [32], há um resumo de todas as possíveis bifurcações nas famílias de órbitas periódicas para Hamiltonianos possuindo 0, 1 ou 2 simetrias. A maioria das órbitas periódicas mais simples do Nelson, foram encontradas e estudadas por Baranger e Davies [29] e estão dispostas na fig. (4.2). Dado que o potencial é harmônico ao longo do plano invariante definido por  $x = p_x = 0$ , este plano é foliado por uma família de oscilações verticais (direção- $y$ ) de período constante  $\tau = 2\pi/\sqrt{2}$ , nomeada  $V$  na fig. (4.2).

No intervalo de energia (0.0,0.3), a família vertical,  $V$ , apresenta três bifurcações importantes:

- Uma quadruplicação de período ( $E \approx 0.019$ ),  $TrM = 2$ , gerando duas novas famílias: a família estável  $A$  e a família instável  $H$ . Ambas são librações simétricas.
- Uma triplicação de período ( $E \approx 0.077$ ),  $TrM = 1$ , gerando duas novas famílias degeneradas: a família estável  $C$  (rotação simétrica) e a família instável  $P$  (libração assimétrica).
- Uma duplicação de período em  $E \approx 0.136$ ,  $TrM = 0$ , gerando a família estável  $B$  (libração simétrica). Neste ponto, a família vertical torna-se instável.

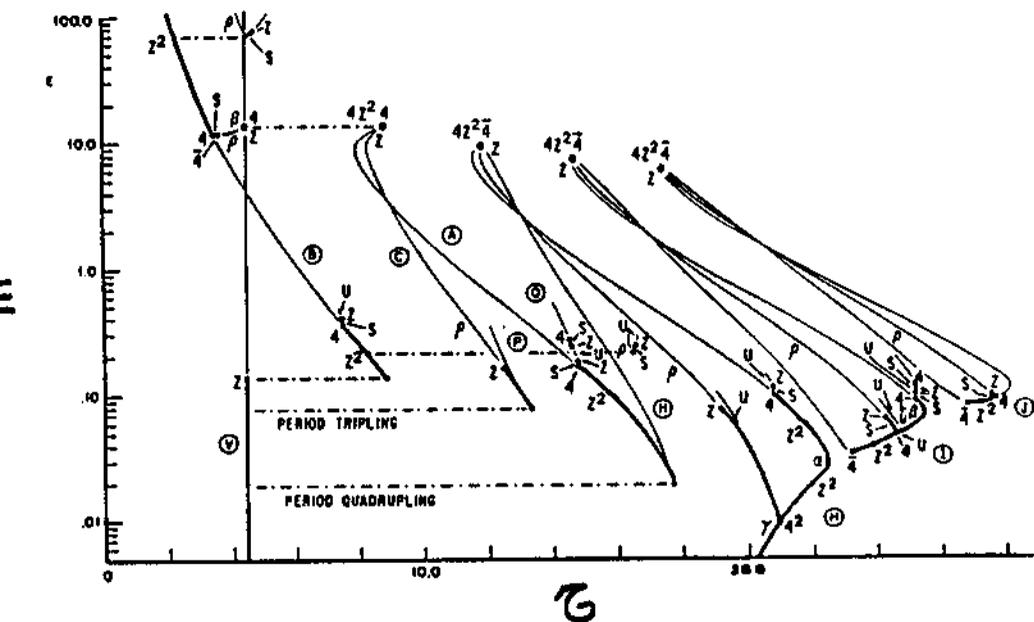


Figure 4.2: Principais famílias de órbitas periódicas do potencial Nelson (sem campo magnético). As linhas mais grossas indicam famílias estáveis, enquanto que as mais finas indicam as famílias instáveis. Figura tirada da ref. [27]

Uma outra família importante é a família horizontal  $H$ . Neste intervalo de energia  $(0.0, 0.300)$ , ela apresenta duas bifurcações isócronas (sem mudança no período) [29], [33], gerando uma família estável de rotações simétricas e uma família instável de librações assimétricas. Este ponto de bifurcação está indicado pelo símbolo  $4^2$ , próximo de  $\tau \approx 21$  na figura (4.2). É importante observar também nesta figura que, para energias relativamente baixas, o sistema tem um comportamento regular, pois, nesse caso, temos praticamente um oscilador- $x$  e um oscilador- $y$  independentes. Aumentando um pouco a energia, o acoplamento fica mais efetivo, tornando o sistema cada vez mais caótico. Convém ressaltar, também, que as bifurcações da família Vertical ocorrem para energias relativamente mais altas que as energias das principais bifurcações da família Horizontal  $H$ , mantendo-se estáveis para energias mais altas em relação a  $H$ .

Como podemos ver, o potencial Nelson já é bastante complicado na ausência de campo magnético. Há várias bifurcações dos vários tipos (isócronas, duplicação, triplicação, quadruplicação ...). Além disso, na fig. (4.2), estamos vendo somente as principais famílias e que como é de se esperar, para um sistema não-integrável, há um aumento exponencial no número de órbitas à medida que se aumenta o período. Vamos acionar, agora, o campo magnético  $B$  e estudar no que isto implica.

A quebra da simetria de reversão temporal ( $t \rightarrow -t$ ), provocada pela ação do campo magnético, tem conseqüências importantes, tanto do ponto de vista clássico quanto quântico. Existem, por exemplo, alterações qualitativas em certas bifurcações de órbitas periódicas [34]. Um estudo numérico do comportamento das principais famílias do Nelson com campo magnético, foi feito por nós em [30]. Neste trabalho, estudamos a ação de um campo magnético muito fraco, de forma que ele poderia ser tratado por teoria de

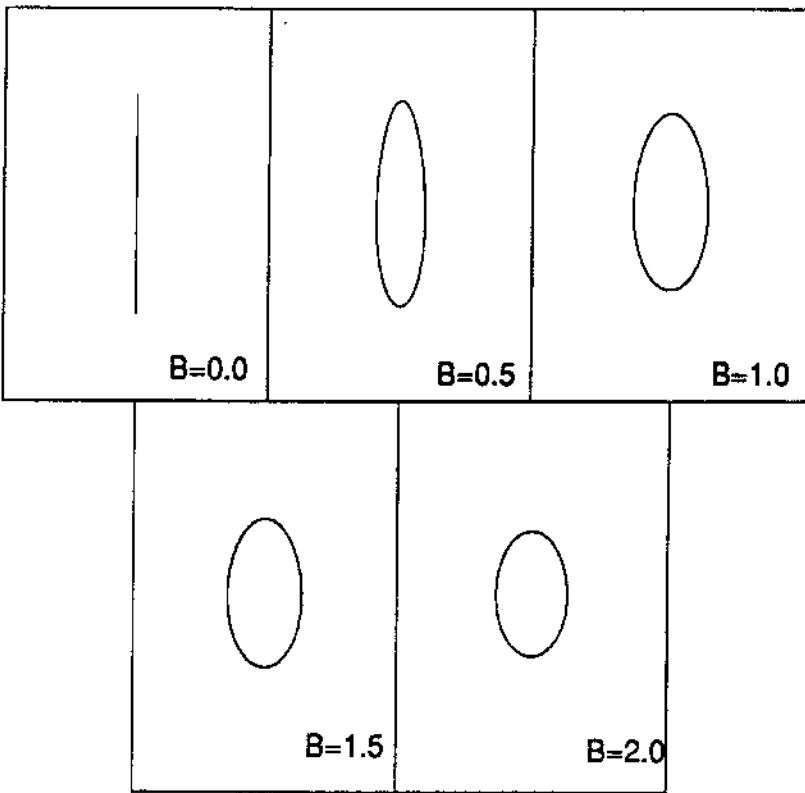


Figure 4.3: Projeção  $x - y$  da órbita da família Vertical, em  $E = 0.3146$  para os cinco valores de campo indicados na parte inferior da figura.

perturbação. Nosso interesse era saber como se comportariam as bifurcações isócronas das principais famílias. Nós verificamos, primeiramente, que a ação do campo, faz com que só tenhamos rotações (as librações desaparecem devido a quebra da simetria de reversão temporal, como é mostrado na fig. (4.3)). Em segundo lugar, a família vertical, que na fig. (4.2) é vertical de fato, não o é mais, quando  $B \neq 0$ . Vemos também que as bifurcações isócronas são bem mais raras mas, ainda são possíveis devido à conservação de algumas simetrias (esta questão das simetrias foi bem estudada em [30], onde vimos que, mesmo com o campo magnético, conservamos uma simetria no potencial Nelson, aquela obtida fazendo  $(x \rightarrow -x$  e  $p_y \rightarrow -p_y)$ , entretanto, a maioria

das bifurcações que acontecem agora, são genéricas.

Um estudo em termos de seção de Poincaré, mostra também que a ação de um campo muito fraco, num primeiro momento, aumenta a caoticidade do sistema, pois, a ação do campo perturba o sistema, quebrando alguns toros racionais, provocando assim bifurcações, que dão origem a órbitas instáveis. Por outro lado, sabemos também que a ação de campos muito fortes é de regularizar o sistema, uma vez que o termo quadrático em  $B$  na Hamiltoniana, acaba dominando os termos do potencial. Esse processo de regularização pode não ser tão simples, uma vez que vem acompanhado de inúmeras bifurcações. Percebemos, então, que temos uma transição de regularidade para caoticidade, dependente do aumento da energia que é intrínseca do potencial e uma transição de caoticidade para regularidade dependente do campo, sendo a regularidade conseguida, neste caso, para campos muito fortes.

Dos resultados clássicos do potencial Nelson, dois são particularmente importantes para a nossa magnetização semiclássica (capítulo 3). Primeiramente, precisamos definir bem os intervalos de energia regular e caótico, numa faixa de campo considerável. Como dito anteriormente, energia e campo atuam em termos da transição regular $\leftrightarrow$ caótico, de forma que, devemos garantir que, no intervalo de campo escolhido, a maior parte do espaço de fase permaneça caracterizado pelo comportamento dinâmico desejado. Precisamos, também, conhecer a função,

$$a_p = \frac{\partial S_p}{\partial B},$$

como vimos na seção 3.2.3, eq.(3.39).  $S_p$  é a ação clássica da órbita periódica, calculada na energia de Fermi.

Começamos por definir o intervalo do campo  $0 \leq B \leq 1.5$  e os dois intervalos de energia, para o comportamento regular  $E_{max} = 0.062$  e para o comportamento caótico  $E_{max} = 0.403$ . Fizemos seções de Poincaré  $x - p_x$ ,

nos intervalos de comportamento regular, mostradas nas figuras (4.4) e de comportamento caótico, apresentadas nas figuras (4.5). Nas seções regulares para  $E = 0.062$  em campo zero, são visíveis a família Vertical (a ilhota no centro da seção) e sua quadruplicação (as quatro ilhotas cercando a ilhota central). Apesar da porção de instabilidade existente nesta energia, notamos que a maior parte da seção ainda é regular. Além disso, verificamos que essa porção de instabilidade diminui à medida que o campo aumenta, até que, para  $B \geq 1.0$ , a seção é, dentro da resolução visual, totalmente regular. Em contrapartida, vemos nas seções caóticas para  $E = 0.314$ , que no intervalo de campo estudado, as seções permanecem quase integralmente caóticas. Alguma regularidade começa a surgir para  $B \approx 0.5$ , onde com um pouco de atenção, podemos ver duas pequenas ilhotas na região central. Essas ilhotas correspondem a duplicação da família Vertical que aparece estável em  $B = 1.0$ , onde podemos verificar novamente a sua quadruplicação. Para  $B > 1.0$  as regiões de regularidade tornam-se cada vez maiores.

Tivemos também que estudar a variação da ação com o campo, eq.(3.39), conforme já dito anteriormente, para cada uma das principais famílias do potencial Nelson. Este cálculo é mostrado na fig. (4.7), onde usamos  $V$  para indicar a família Vertical,  $V2, V3$  e  $V4$  para a duplicação, a triplicação e a quadruplicação respectivamente. As letras  $H, R$  e  $L$  referem-se a família Horizontal e suas duas bifurcações principais, uma família de rotações e uma família de librações (originalmente). Nessas figuras, trazemos algumas informações adicionais (elas serão importantes na análise dos resultados), como, por exemplo, a região de campo em que as famílias são estáveis (linhas contínuas) ou instáveis (linhas tracejadas) e os valores de campo onde a transição acontece. Nessa figura a energia foi fixada em 0.314 na parte (a) e 0.403 na parte (b). A família incompleta em (b) é uma bifurcação isócrona de  $V2$ . Ela nasce em  $B \approx 0.24$  onde o  $TrM = 4$  inicialmente instável tornando-se logo em seguida  $B \approx 0.35$  estável ao passar por  $TrM = 0$ . Veremos

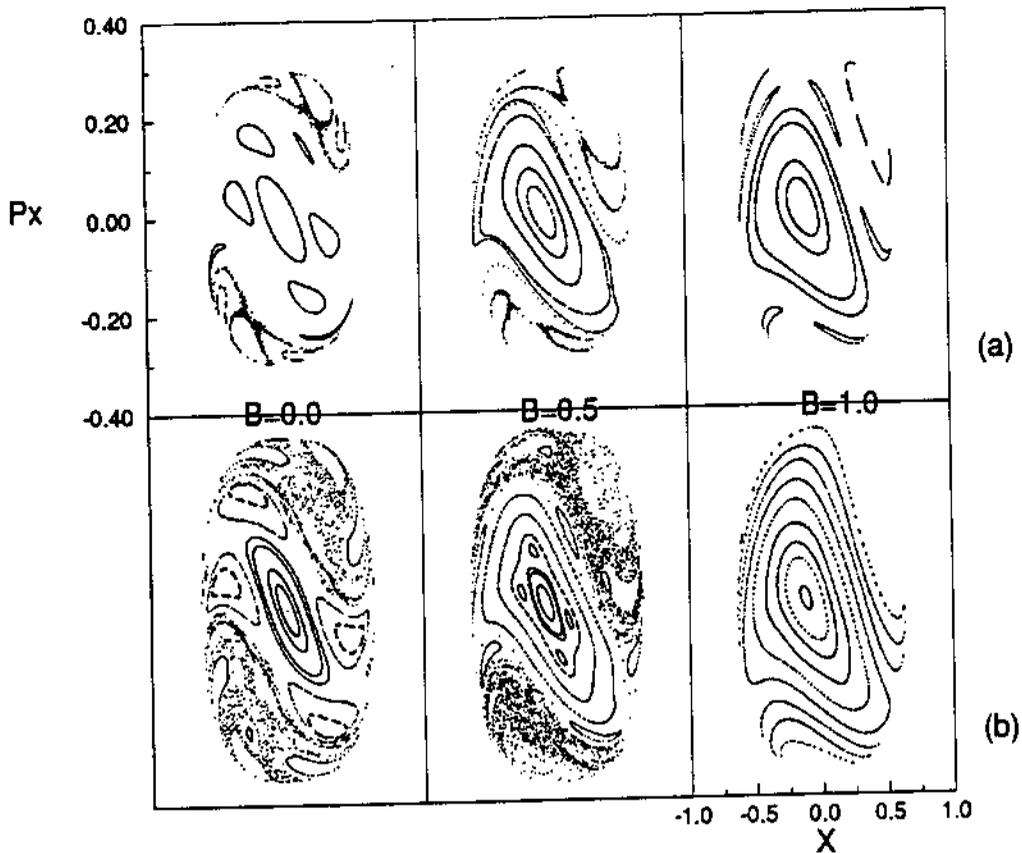


Figure 4.4: Seções de Poincaré  $x - p_x$  para os campos indicados na figura, na região de energia regular. A série (a) para  $E = 0.043$  e (b) para  $E = 0.062$ .

posteriormente que essa bifurcação será importante na análise dos nossos resultados.

Em posse destes resultados clássicos, passamos agora a um estudo do Nelson quântico.

## 4.2 O Sistema Quântico.

Para campo nulo, os autovalores do potencial Nelson foram obtidos

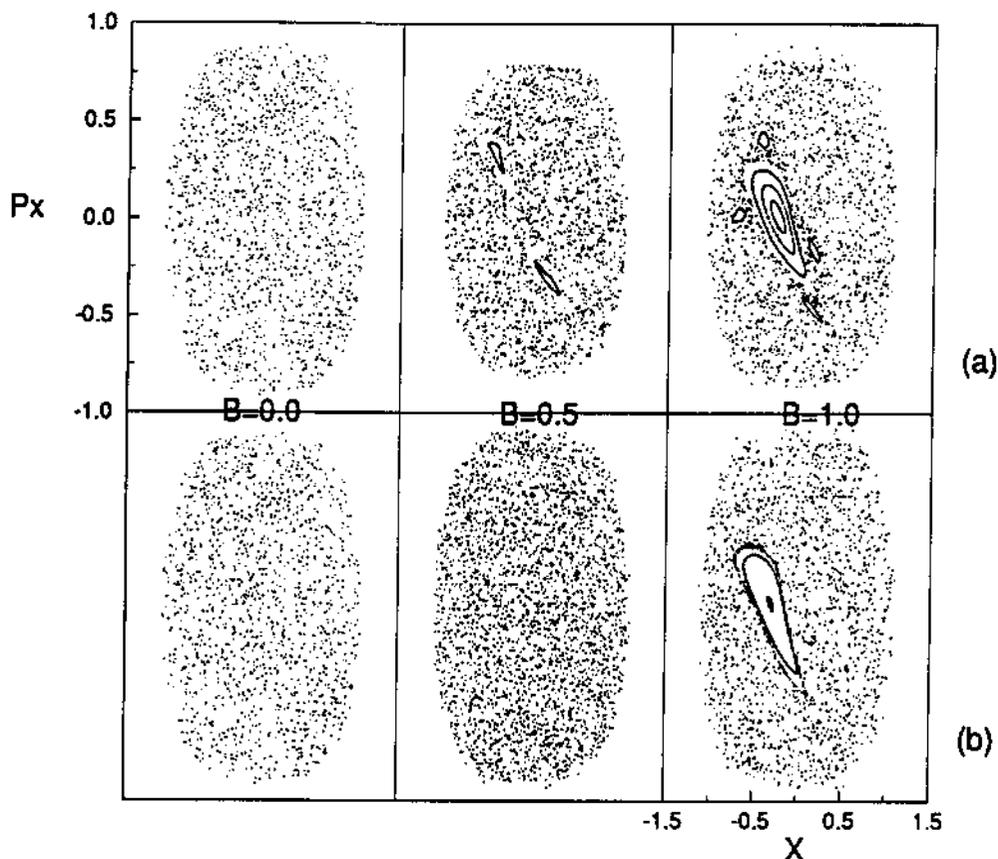


Figure 4.5: Seções de Poincaré  $x - p_x$  para os campos indicados na figura, na energia caótica. A série (a) para  $E = 0.314$  e (b) para  $E = 0.403$ .

usando uma diagonalização da Hamiltoniana na base de oscilador harmônico em  $\xi_1$  e  $\xi_2$  [35], com

$$\xi_1 = x \quad \xi_2 = y - \frac{x^2}{2}.$$

A transformação de coordenada de  $\{x, y\}$  para  $\{\xi_1, \xi_2\}$  é uma transformação não-ortogonal, de forma que a equação de Schrödinger em  $\{x, y\}$  original, dada por

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right\} + \frac{\mu x^2}{2} + \left( y - \frac{x^2}{2} \right)^2 \right] \psi(x, y) = E \psi(x, y)$$

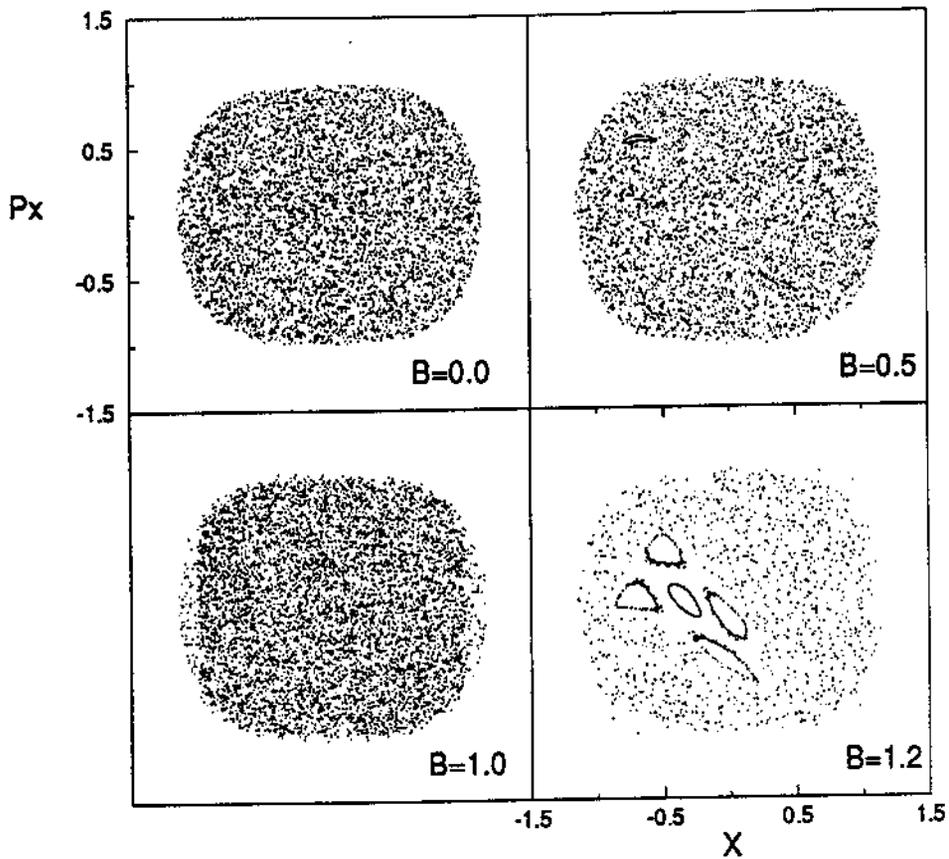


Figure 4.6: Seções de Poincaré  $x - p_x$  para os campos indicados na figura, na energia caótica para  $E = 0.475$ .

torna-se:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial \xi_1^2} + (1 + \xi_1^2) \frac{\partial^2}{\partial \xi_2^2} - (2\xi_1 \frac{\partial}{\partial \xi_1} + 1) \frac{\partial}{\partial \xi_2} \right\} + \frac{\mu}{2} \xi_1^2 + \xi_2^2 \right] \psi(\xi_1, \xi_2) = E \psi(\xi_1, \xi_2)$$

Tomamos então, os elementos de matriz do Hamiltoniano em base de oscilador harmônico com as variáveis  $\xi_1$  e  $\xi_2$  fazendo a identificação

$$p_1 = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \xi_1} \quad p_2 = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \xi_2}$$

Conseguindo dessa forma:

$$\left[ \frac{\hat{p}_1^2}{2} + (1 + \xi_1^2) \frac{\hat{p}_2^2}{2} - (\xi_1 \hat{p}_1 - i \frac{\hbar}{2}) \hat{p}_2 + \frac{\mu}{2} \xi_1^2 + \xi_2^2 \right] \psi = E \psi,$$

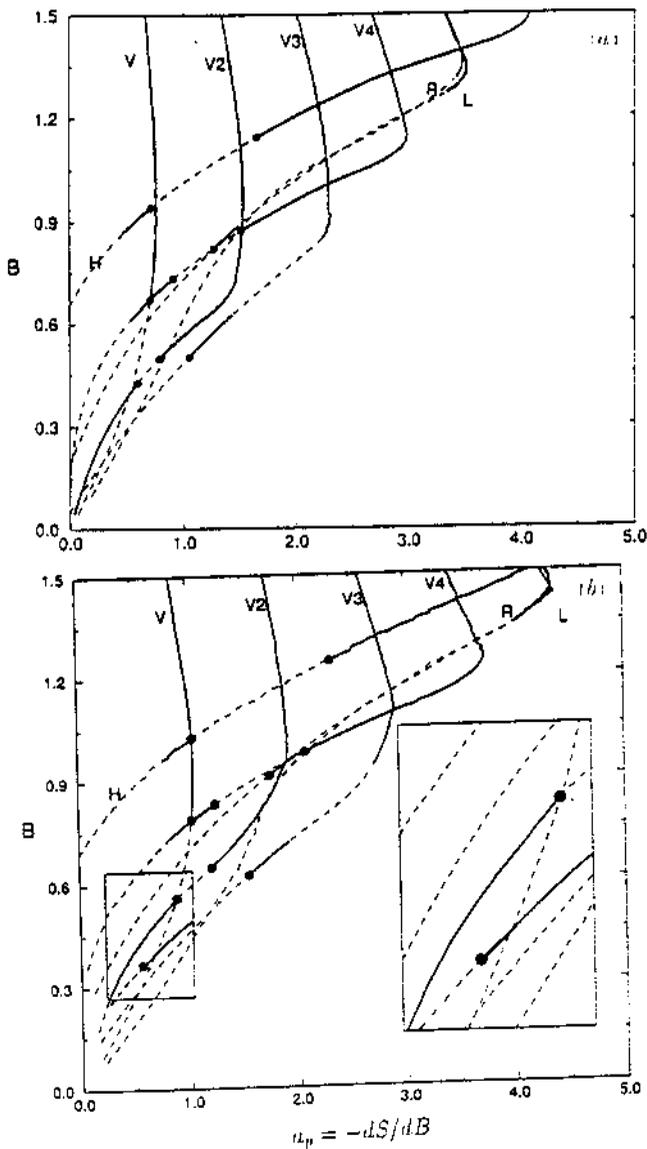


Figure 4.7: Variação da ação da órbita periódica, calculada na energia  $E_{max} = 0.314$  e  $E_{max} = 0.403$ , no regime caótico, em função do campo para as principais famílias do potencial Nelson. As linhas grossas(tracejadas) indicam os campos em que a família é estável(instável). A transição estável-instável acontece quando  $TrM = 0$  (círculos) e  $TrM = 4$ .

com

$$\hat{p}_1 = \sqrt{\frac{\hbar\omega_1}{2}}i(\hat{a}_1^\dagger - \hat{a}_1) \quad \hat{\xi}_1 = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_1}}i(\hat{a}_1^\dagger + \hat{a}_1)$$

e

$$\hat{p}_2 = \sqrt{\frac{\hbar\omega_2}{2}}i(\hat{a}_2^\dagger - \hat{a}_2) \quad \hat{\xi}_2 = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega_2}}i(\hat{a}_2^\dagger + \hat{a}_2)$$

e  $\psi$  expandimos na base de oscilador harmônico

$$|\psi\rangle = \sum_n \sum_m b_{nm} |n\rangle_{\xi_1} |m\rangle_{\xi_2}$$

obtendo-se, assim, facilmente, os elementos de matriz de  $\hat{H}$ . Devemos lembrar que estamos trabalhando com um potencial que é um poço infinito, de forma que precisamos em algum momento, truncar a matriz a ser diagonalizada. Os resultados semiclássicos são obtidos usando-se um pequeno  $\hbar$ , porém, quanto menor o valor de  $\hbar$ , maior deverá ser o tamanho da matriz a ser diagonalizada, se quisermos atingir um certo valor de  $E$ .

Colocamos, agora, um campo magnético variando adiabaticamente, de forma que cada autovalor de energia  $E_n$  seja uma função de  $B$ . Para obtermos os níveis, agora com o campo, o procedimento usado foi o mesmo do potencial com campo zero só que, agora, o campo provoca uma quebra na simetria de reversão temporal e a primeira consequência visível é que a matriz a ser diagonalizada fica complexa. Contudo, isso não representa nenhuma grande dificuldade, exceto pela convergência que piora à medida que o campo aumenta, de forma que para  $B \geq 0.6$  passamos a usar a base que diagonaliza o oscilador bidimensional com o campo (Apêndice B) e assim, os níveis foram obtidos da mesma forma. Neste trabalho, escolhemos dois valores de  $\hbar$ , 0.006 e 0.06 e calculamos os níveis  $E_n(B)$ , conforme mostra a figura (4.8). Estes valores de  $\hbar$  garantem que os 120 primeiros níveis de (4.8a) permaneçam na região de energia que o comportamento clássico é regular (de acordo com as

figuras (4.4)) e que os 50 níveis de (4.8b) permaneçam na região em que a dinâmica clássica é caótica, de acordo com as figuras (4.5). Se as figuras (4.8) correspondessem a um sistema integrável e outro não integrável, deveríamos esperar entre elas acentuadas diferenças, no sentido que, no caso da Hamiltoniana classicamente caótica, não esperaríamos degenerescências, os níveis oscilariam exibindo *avoided crossings*, enquanto que no caso da Hamiltoniana integrável, poderia haver cruzamento de níveis. Esse não é o nosso caso, estamos trabalhando com uma Hamiltoniana não-integrável, cuja principal característica está no fato de que ela apresenta *soft chaos*. Nossos níveis não apresentarão cruzamentos; as diferenças entre as duas regiões de energia selecionadas pelos correspondentes  $\hbar$ , para os regulares e para os caóticos fig.(4.9), só acentuarão uma maior ou menor oscilação dos níveis, isto é, *avoided crossings* mais ou menos pronunciados. Esta questão da diferença no comportamento dos níveis, tem direcionado as pesquisas no sentido de verificar se existe diferença na resposta quântica dos correspondentes sistemas, dado que a dinâmica clássica está embutida no comportamento dos níveis. Esta é uma das diretrizes do nosso trabalho, de forma que vamos tentar entender melhor o comportamento dos níveis nestas duas regiões de energia, regular e caótica.

### 4.3 Degenerescências e “Avoided crossings”.

Há uma grande quantidade de detalhes no espectro quântico, que não pode ser imediatamente apreciada se olharmos para uma lista de todos os autovalores de energia. Esta estrutura está incorporada nas correlações e *clusters* dos níveis. Em uma escala mais fina, tais correlações dizem respeito aos níveis vizinhos.

Se o operador Hamiltoniano  $\hat{H}$  tem alguma simetria, isto pode produzir

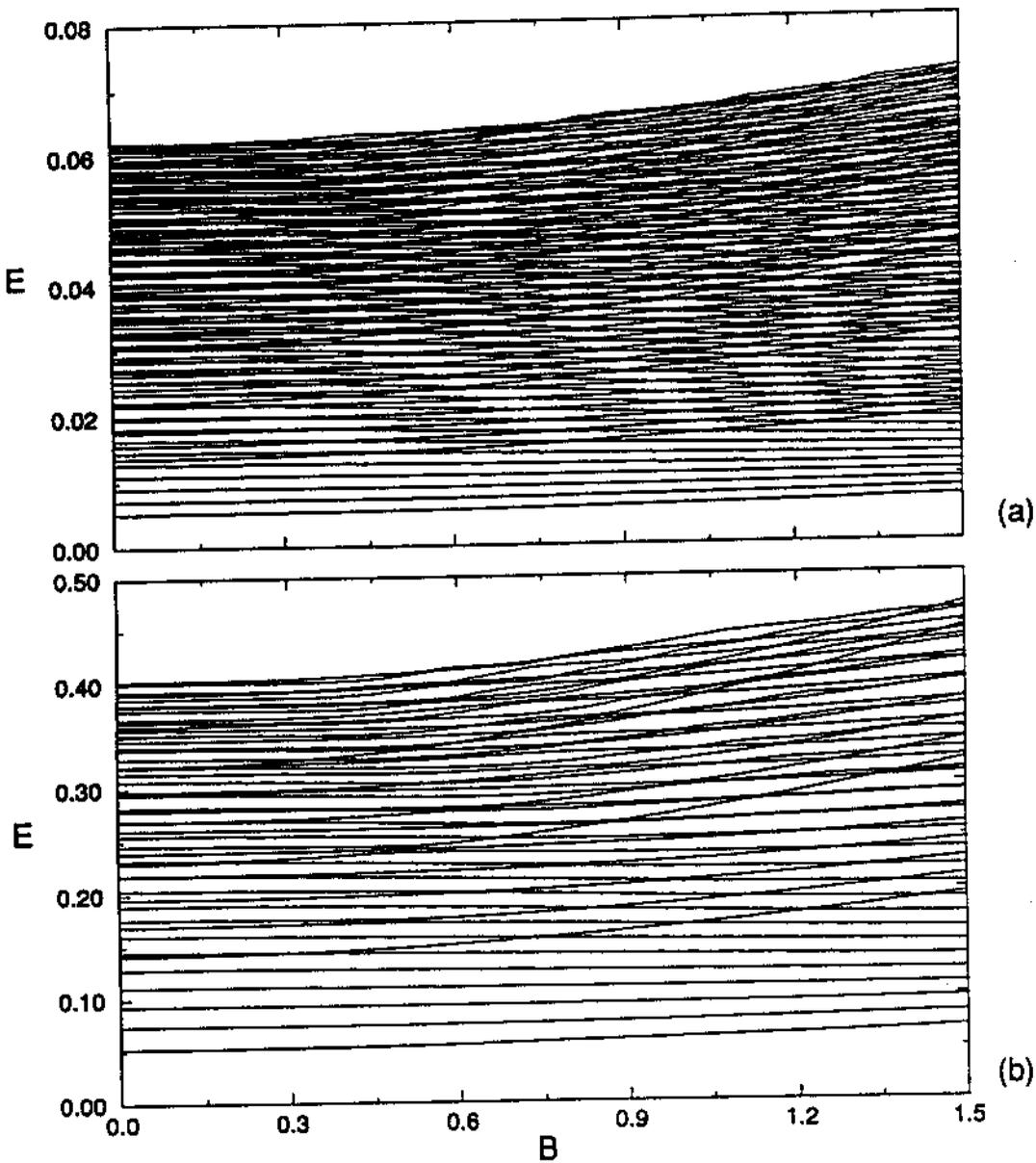
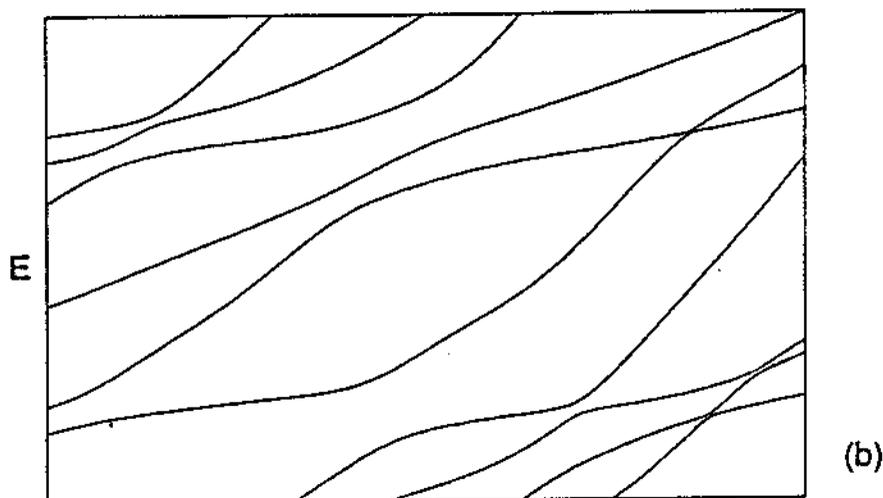
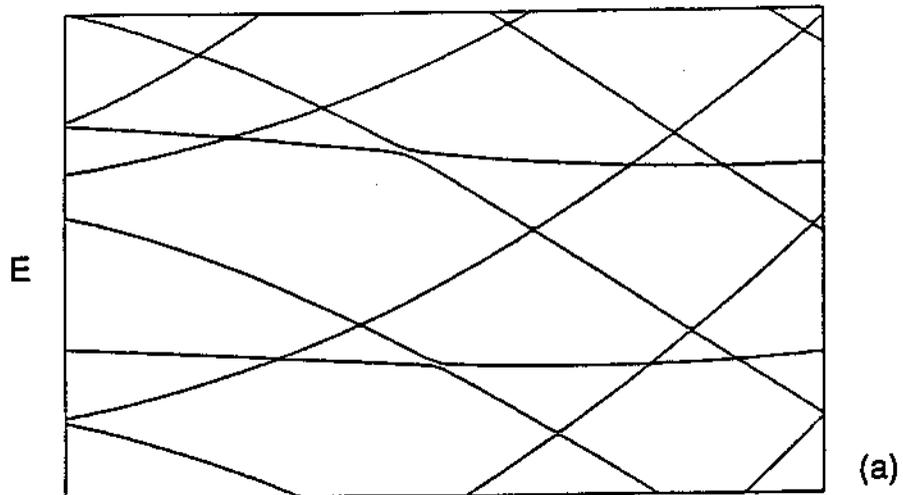


Figure 4.8: Em (a) os 120 primeiros n veis regulares  $E_{120} \approx 0.062$  e em (b) os 50 primeiros n veis ca ticos  $E_{50} = 0.403$  do potencial Nelson.



B

Figure 4.9: Um *zoom* dos níveis regulares (a) e caóticos (b). Não há cruzamento de níveis, somente *avoided crossings* mais ou menos pronunciados.

degenerescências, que podem ser estudadas usando-se teoria de grupo. Não queremos estudar as degenerescências deste tipo e assim, quando  $\hat{H}$  tem simetria, podemos considerar somente estados que tem a mesma classe de simetria. Este procedimento é equivalente a considerar todos os estados em um apropriado Hamiltoniano “dessimetrizado”. Para os mais interessados, [2] é uma boa referência.

Para resumir, podemos dizer que no espaço de todas as Hamiltonianas, aquelas com níveis degenerados, formam um conjunto de codimensão 2 (2 cones ligados), enquanto que no espaço de Hamiltonianas com todo ou parte do espectro dado pela quantização do toro, aquelas com níveis degenerados formam uma série de codimensão 1 (curvas que se cruzam). Para a classe de sistemas separáveis, os quais são todos integráveis e tem, portanto, o espaço de fase foliado por toros, é simples mostrar, exatamente, que níveis degenerados formam um conjunto de codimensão 1, como a quantização do toro prediz. Mas, para sistemas não-separáveis, mesmo aqueles que são integráveis, as degenerescências a um parâmetro, que a quantização do toro prevê, provavelmente serão separadas e se espera que o espectro exato para esta classe de sistemas tenha degenerescências a 2 parâmetros. Ao variarmos somente um parâmetro, eles deverão exibir *avoided crossings* com separações extremamente estreitas.

Marcus [36] sugeriu que a presença de muitas quase-degenerescência, em curvas de níveis de energia como função de um parâmetro, é uma indicação de que os correspondentes estados quânticos são irregulares, isto é, estão associados com órbitas clássicas caóticas da superfície de energia de dimensão  $(2N - 1)$ . No entanto, esta implicação pode não ser justificada no caso do “square torus billiard” (que se parece com o bilhar de Sinai, exceto pelo fato que o disco refletor é representado por um quadrado), pois nesse caso, há muitas quase-degenerescências sendo que todas as órbitas permanecem na superfície  $(N - 2)$ -dimensional e a exploram sem caos exponencial. Uma

sugestão posterior de Marcus, diz que a implicação vale no sentido inverso, ou seja, os níveis de energia de estados quânticos associados com movimento classicamente caótico mostrará muitos *avoided crossings*, o que Berry diz ser muito provavelmente correta [2].

Os múltiplos *avoided crossings* ou repulsões de níveis de energia são um mecanismo essencial para espectros complicados com uma simetria definida em sistemas quânticos ligados que são classicamente não-integráveis e caóticos. Para entender um aspecto estatístico deste espectro, um considerável esforço tem sido concentrado em estudos numéricos, para ajustar os dados para as propriedades de flutuação dos níveis prevista pelos ensembles ortogonais ou unitários. No entanto, estes estudos se concentraram em aspectos locais do espectro. Os aspectos globais, por exemplo, sensibilidade dos níveis às mudanças destes parâmetros, começaram a ser estudados a partir de 1988, por Nakamura e Thomas [4]. A grandeza, estudada por eles, foi a susceptibilidade magnética. Seria ela afetada pela natureza regular ou caótica do movimento clássico? A resposta para tal pergunta, já pode ser dada para sistemas integráveis e completamente caóticos. A susceptibilidade é maior para sistemas integráveis (ver introdução a este capítulo). Como ficaria a susceptibilidade para o potencial Nelson, no regime regular e caótico? Haveria alguma possível generalização, também aqui, uma vez que esse sistema é suave. No próximo capítulo apresentaremos os resultados numéricos da magnetização e susceptibilidade e verificaremos também a validade da nossa fórmula semiclássica (capítulo 3). Como já foi que nosso potencial não é integrável, portanto, muitos dos cálculos só podem ser feitos numericamente.

# Capítulo 5

## Resultados Numéricos

Uma vez obtidos os níveis de energia de um elétron (seção 2.1), diagonalizando o Hamiltoniano (seção 4.2) para um determinado intervalo de campo, a magnetização e a susceptibilidade podem ser facilmente obtidas, para temperatura nula. Contudo, antes de mostrarmos esses resultados para o potencial Nelson (capítulo 3), vamos começar ilustrando com um confinamento quadrático, o oscilador harmônico bidimensional. A vantagem deste modelo simples é que esse sistema pode ser resolvido exatamente, além de servir de base para futuras comparações.

### 5.1 Resultados para o oscilador bidimensional

O oscilador harmônico bidimensional em um campo magnético uniforme, foi bastante estudado por Németh [8]. A Hamiltoniana é dada por:

$$H = \frac{1}{2}(p_x + \frac{B}{2}y)^2 - \frac{1}{2}(p_y + \frac{B}{2}x)^2 + \frac{1}{2}\varphi_1^2x^2 + \frac{1}{2}\varphi_2^2y^2 \quad (5.1)$$

e os níveis de energia [8] e [37] dados por

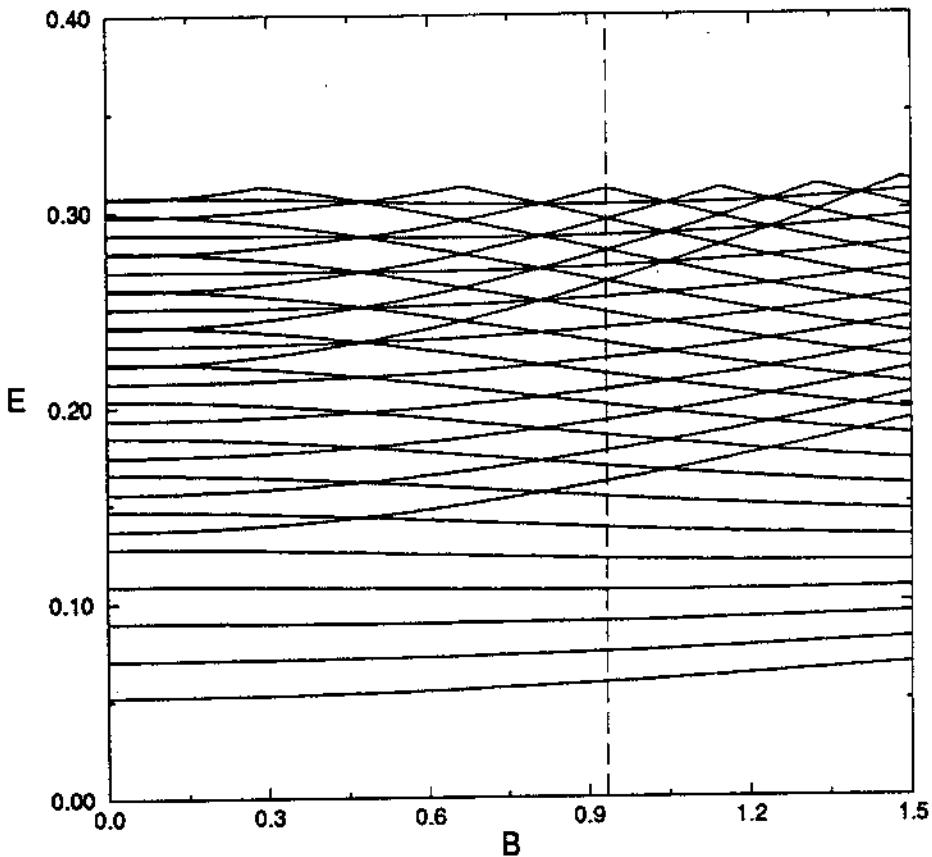


Figure 5.1: Os 30 primeiros níveis de energia como função do campo para o oscilador bidimensional. A vertical tracejada, corresponde a um dos valores  $\bar{B}$  onde há picos na magnetização e na susceptibilidade.

$$E_{n_1, n_2} = \hbar\omega_1 \left( n_1 + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_2 \left( n_2 + \frac{1}{2} \right) \quad (5.2)$$

onde

$$\begin{aligned} \omega_1 &= \frac{1}{2} \left[ \sqrt{B^2 + (\varphi_1 + \varphi_2)^2} + \sqrt{B^2 + (\varphi_1 - \varphi_2)^2} \right] \\ \omega_2 &= \frac{1}{2} \left[ \sqrt{B^2 + (\varphi_1 + \varphi_2)^2} - \sqrt{B^2 + (\varphi_1 - \varphi_2)^2} \right] \end{aligned} \quad (5.3)$$

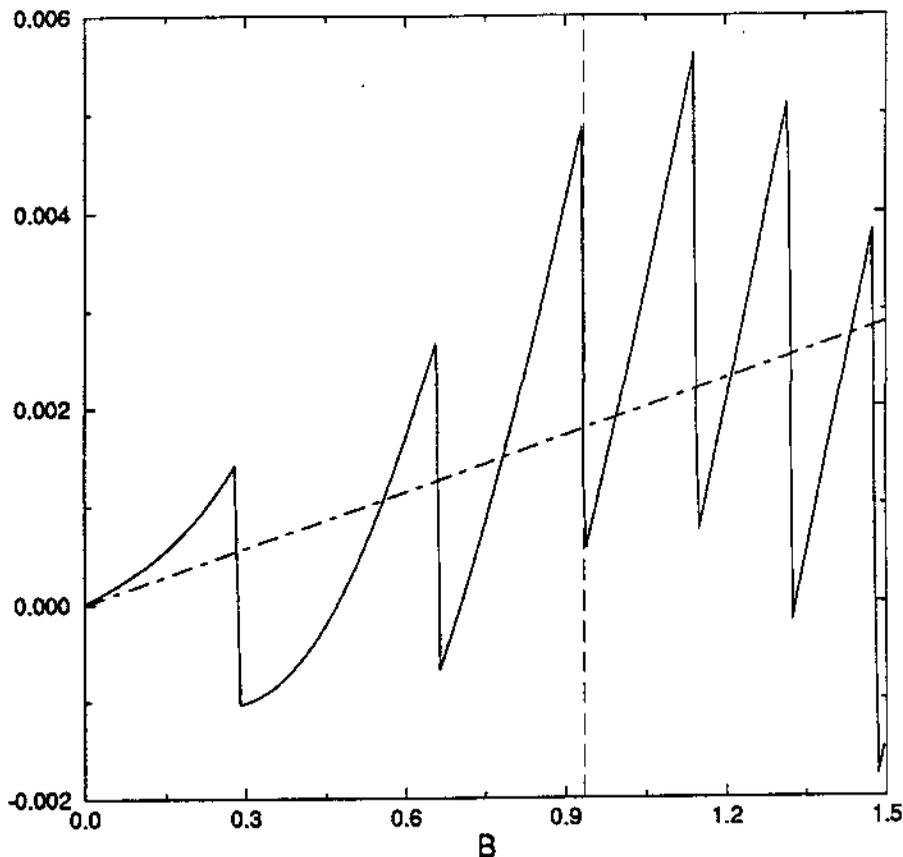


Figure 5.2: Magnetização, como função do campo, à temperatura zero, para os 30 primeiros níveis do oscilador. A linha pontilhada corresponde à magnetização média, originária das correções do termo de Weyl (eq. (3.37)) e, a vertical tracejada mostra um dos valores de campo  $\bar{B}$  onde  $E_{30}$  causa brusca variação em  $m$

Infelizmente, a magnetização e a susceptibilidade não podem ser calculadas analiticamente, de forma que, o resultado para  $m_0$  dos 30 primeiros níveis fig. (5.1), é mostrado nas fig. (5.2) e (5.3), como função de  $B$  e de  $\omega_1/\omega_2$  respectivamente, para  $\hbar = 0.06$ ,  $\varphi_1 = \sqrt{0.1}$  e  $\varphi_2 = \sqrt{2}$ . Esses valores de frequência correspondem a parte harmônica do potencial Nelson eq.(4.2). Como já foi dito, tanto a magnetização como a susceptibilidade para, temperatura zero, dependem fortemente do comportamento do nível de Fermi. Se observarmos na fig. (5.1), todos os valores de campo,  $\bar{B}$ , onde

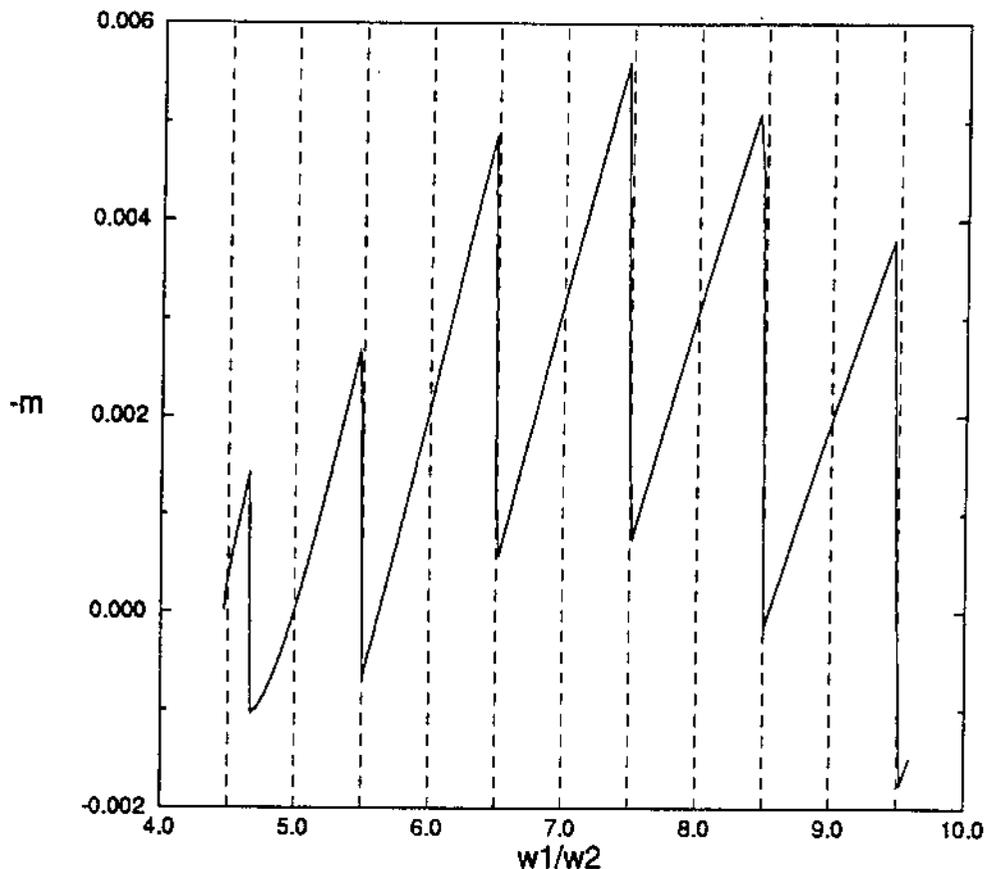


Figure 5.3: Magnetização, como função de  $\omega_1/\omega_2$ , à temperatura zero, para os 30 primeiros níveis do oscilador. Os picos correspondem a valores de  $B$  onde os toros são ressonantes.

o último nível apresenta uma mudança brusca na curvatura, acarretam picos em  $m_0 \times B$  (fig. (5.2)) e em  $\chi_0 \times B$  (fig.(5.4)), como está ilustrado em um dos  $\bar{B}$ , pela vertical tracejada destas figuras. A curva ponto-tracejada corresponde à magnetização média originária das correções do termo de Weyl, discutida na seção (3.2.3). Na fig. (5.3), mostramos que os os picos em  $m_0$  correspondem a valores de  $B$  em que os toros no espaço de fase são racionais. (Vale lembrar, aqui, que em sistemas integráveis, as órbitas periódicas permanecem em toros invariantes, de forma que a densidade de níveis pode ser escrita não como uma soma sobre órbitas periódicas, mas como uma soma

sobre toros ressonantes que são definidos pela condição de que todas as suas frequências sejam comensuráveis).

Mostramos na fig. (5.5) que, se considerarmos uma temperatura finita (aqui fizemos  $K_B T = 0.02 \times E_{30}$ ) temos que levar em conta contribuições dos níveis excitados, de acordo com a distribuição de Fermi (fig. (2.1)). A contribuição desses níveis excitados, mesmo em baixas temperaturas, acaba amenizando os picos na susceptibilidade, de forma que, em experiências reais, esses picos não são importantes.

As figuras (5.6) e (5.7) tem um caráter mais ilustrativo aqui, no sentido de dar idéia de campos fracos e fortes, pois campos tão altos não são viáveis, no momento, para o potencial Nelson, principalmente no caso caótico, como veremos a seguir. Apesar disso, vamos olhar atentamente para as figuras. Primeiramente, vemos na magnetização fig.(5.6), as esperadas oscilações de Haas-van Alphen que são mais evidentes para  $P$ 's maiores. É, também, para  $P$ 's maiores, que observamos um interessante efeito na susceptibilidade fig.(5.7). Há uma subida, relativamente rápida, em função de  $P$ , na região de  $B \approx 1.0$ , cuja posição em  $B$  independe de  $P$ , ou seja, à medida que aumentamos  $P$ , aumentamos a magnitude da susceptibilidade, numa região fixa em  $B$ .

## 5.2 Resultados para o potencial Nelson

Os autovalores do potencial Nelson foram obtidos da diagonalização de matrizes de  $700 \times 700$  para o caso regular e  $2500 \times 2500$  para a região caótica, em uma base apropriada (seção 4.2). Para testar a convergência, comparamos os autovalores de alguns campos, com aqueles obtidos de matrizes de  $1000 \times 1000$  no caso regular e  $1600 \times 1600$  e  $2800 \times 2800$ , no caso caótico, observando assim, o número de casas estáveis. Este teste, pode garantir quantos níveis temos com uma dada precisão, mas isso não assegura bons

resultados, uma vez que, para para calcular a magnetização e a susceptibilidade, temos que calcular a alteração de  $E_n$  gerada por um pequeno passo no campo  $\Delta B = 0.005$ . Dessa forma, comparamos também a diferença entre as diagonalizações em  $B = 0$  (i. e.  $E_n^{1000}(0) - E_n^{700}(0)$ , com a diferença  $E_n^{700}(\Delta B) - E_n^{700}(0)$ , para os estados regulares e entre as matrizes de 1600 e 2500 para os estados caóticos. Esta última análise das diferenças no nível de energia, mostra que o número de níveis convergidos é 150 no caso regular e 90 no caso caótico.

Para garantir realmente a convergência, calculamos a susceptibilidade média em campo zero, que nada mais é que a derivada em relação ao campo da magnetização média, originária das correções do termo de Weyl, discutida na seção 3.2.3. O resultado para o potencial Nelson, é o mesmo do oscilador, ou seja,

$$\bar{\chi}_0(0) = \frac{E_f(0)}{12P\varphi_1\varphi_2},$$

com  $\varphi_1 = \sqrt{0.1}$  e  $\varphi_2 = \sqrt{2}$ , mais correções de ordem  $\mathcal{O}(\hbar^4)$  (Apêndice C). Essa é exatamente a susceptibilidade de Landau, eq.(2.28). De fato, usando  $\Delta = \hbar^2\varphi_1\varphi_2/E$  e  $\mu_B^2 = \hbar/2$  vemos que essa expressão coincide com  $-\mu_B^2/6\Delta P$ .

Podemos também escrever esta expressão em termos de  $P$ , usando a relação de  $\bar{N}(E)$  (seção 3.23), pois, a média em relação a  $P$  corresponde a uma média em relação à energia de Fermi  $E_f$ , de forma que:

$$\bar{\chi}_0(0) = \frac{E_f(0)}{12P\varphi_1\varphi_2} = \frac{\hbar}{12\sqrt{\varphi_1\varphi_2}\bar{P}}. \quad (5.4)$$

Comparamos a susceptibilidade em função de  $P$ , obtida numericamente, a susceptibilidade média analítica (ambas em campo zero). Como podemos ver na fig. (5.8), a curva  $\chi_0(0) \times P$  representa um teste de convergência mais completo. Os resultados mostram, entã, que podemos usar até  $\approx 120$  níveis para  $\hbar = 0.006$  (regulares) e até  $\approx 70$  para  $\hbar = 0.06$  (caóticos).

A eq.(5.4) torna-se mais interessante, ao percebermos que o valor de  $\chi_0(0)$  não está relacionado à dinâmica clássica caótica ou regular do sistema. Esta equação sugere que, ao fazermos uma média em  $P$ ,  $\chi_0(0)$  depende somente das características gerais do sistema em questão, características estas que não estão relacionadas à estabilidade de órbitas. Em particular, (5.8) envolve a média geométrica entre  $\varphi_1$  e  $\varphi_2$ . Assim, quanto menor essa média, maior será  $\chi_0(0)$ .

### 5.2.1 Magnetização e órbitas periódicas.

Calculamos a magnetização por partícula,

$$m_0(B) \equiv -\frac{1}{P} \sum_{n=1}^P \frac{\partial E_n}{\partial B},$$

à temperatura zero, para ambos os espectros regular e caótico. Os resultados para o caso regular, figura (5.9a), são muito similares àqueles da seção (5.1) para o oscilador harmônico, onde o toro periódico tem um papel importante. No caso caótico, figura (5.9b) a situação é diferente e nós vamos analisá-la em termos da teoria semiclássica do capítulo 3.

De acordo com nossa teoria, (capítulo 3), a natureza caótica, do fluxo clássico associado, deverá aparecer nas flutuações da magnetização em torno da média. Isto pode ser facilmente obtido, fazendo-se uma transformada de Fourier da parte oscilante da magnetização. Numericamente, obtemos a parte oscilante subtraindo  $m_0$  de sua média, calculada via uma suavização gaussiana, visto que nossa aproximação analítica, eq.(3.37), só é válida para pequenos valores de campo. Embora facilmente obtido, o resultado da transformada de Fourier pode ser difícil de ser analisado, como podemos ver nas figuras (5.10) para  $P = 30$  e (5.11) para  $P = 50$ . Embora nestes dois casos, o pico principal corresponda à contribuição da família Vertical é difícil dizer

algo mais, visto que cada órbita contribui mais que uma vez, eq.(3.43). Refinamos então a transformada de Fourier, obtendo um teste melhor de nossa teoria semiclássica. Consideramos uma transformada de Fourier local sobre um intervalo  $\Delta B$ , definida por:

$$\tilde{m}_T^{osc}(a, B, \Delta B) = \int_{-\infty}^{+\infty} m_T^{osc}(B+x) e^{iax/\hbar} e^{-x^2/(2\Delta B^2)} dx. \quad (5.5)$$

Usando a eq.(3.40) para  $m_T^{osc}$  e assumindo  $\Delta B \ll B$ , temos semiclassicamente,

$$m_T^{osc} \approx \frac{2}{\hbar\beta P} \sum_P \sum_{j=1}^{\infty} A_{p,j} a_p \frac{e^{-\pi\tau_{p,j}/\hbar\beta}}{1 - e^{-2\pi\tau_{p,j}/\hbar\beta}} I(a, B, \Delta B) \quad (5.6)$$

onde a função

$$I(a, B, \Delta B) = \frac{\sqrt{2\pi}\Delta B}{2i} \times \left[ e^{ij(S_p/\hbar - \pi\sigma_p/2)} e^{-(a - ja_p(B))^2 \Delta B^2 / 2\hbar^2} - e^{-ij(S_p/\hbar - \pi\sigma_p/2)} e^{-(a + ja_p(B))^2 \Delta B^2 / 2\hbar^2} \right]$$

tem picos gaussianos em  $a = \pm ja_p(B)$ . Esta seleciona, então, da  $i$ -soma em (3.43), uma particular contribuição com  $B_i \approx B$ .

Fizemos a transformada da eq. (5.5), para  $T = 0$  para dois valores de  $P$ ,  $P = 30$  e  $P = 50$ . Para cada valor de  $B$ , foi feita uma transformada de Fourier local e a posição  $a_p(B)$  dos maiores picos foram sobrepostas aos resultados  $a_p$  clássicos, como é mostrado nas figuras (5.10) e (5.11). À primeira vista, os círculos destas figuras não acrescentam muito à transformada de Fourier tradicional, pois, até  $B = 0.9$ , em ambas as figuras, seria difícil precisar a que órbita corresponde o máximo obtido. Entretanto, um olhar mais cuidadoso revela a predominância da família Vertical, principalmente em (5.11). Na fig. (5.10), podemos identificar a contribuição de  $V2$  e  $V4$  no intervalo  $0.75 \leq B \leq 1.1$  aproximadamente e a contribuição de  $V3$  para  $B > 1.1$ . Exceto

pela família Vertical  $V$ , a fig. (5.11) parece ainda mais complicada, o que é razoável, visto que além de  $a_p$  variar com o campo, esperamos que em energias mais altas, mais órbitas estejam contribuindo para  $m_0^{osc}$ . Observe, na região de  $B = 1.0$  e  $B = 1.35$  na fig. (5.11), o “arraste” provocado pelo cruzamento de  $a_p$  da família Vertical  $V$  com  $a_p$  da família Horizontal  $H$ . Apesar disso, esses resultados podem ser filtrados se impusermos a condição que só os  $a_p$ 's de maior amplitude seja graficado. Essa condição permitirá somente a visualização da família Vertical em ambos os casos  $P = 30$  e  $P = 50$  como em [15].

## 5.2.2 Flutuações na susceptibilidade.

Tendo calculado a magnetização, podemos obter facilmente a susceptibilidade

$$\chi(B) = \frac{\partial m}{\partial B}$$

para os regimes regular e caótico. Como podemos ver nas figuras (5.12), (5.13) e 5.14), a natureza da dinâmica clássica também tem forte influência em  $\chi(B)$ . De fato, as diferenças entre os dois regimes é muito mais evidente aqui, do que em  $m(B)$ , pois, aqui, as flutuações são mais fortes (como discutido na seção 3.2.4). Olhando primeiramente para  $\chi(B)$ , figura (5.14 a), do caso regular para  $P = 120$ , observamos que os picos associados aos “avoided crossings” são extremamente agudos, muito parecidos com a susceptibilidade do oscilador harmônico (fig. 5.4). Contudo, sabemos que essas anomalias não são tão importantes, pois, como vimos, para uma temperatura mesmo pequena, eles tendem a desaparecer (fig.(5.5)). Outra evidência de sua pouca importância, é o fato de que eles não estão associados à presença ou à ausência de caos, como podemos ver nas fig. (5.13 e 5.14) para o caso caótico. Nestas figuras, os picos mais agudos, embora numa região de energia

caótica, estão associados a “avoided crossings” estreitos. Temos ainda um terceiro argumento, se o passo no campo  $\Delta B$  for feito muito pequeno, estes picos ficam cada vez mais finos, de forma que ficam altamente localizados em certos valores de campo, o que em uma média, acabaria sendo ignorado. Tendo isso em mente, ignoramos os picos e colocamos as fig. (5.12 e 5.13) na mesma escala, a fim de comparar, por exemplo, o comportamento mais ou menos oscilatório e a magnitude da susceptibilidade para os mesmos  $P$ 's nos dois regimes, regular e caótico.

Olhando então, para a fig. (5.12), percebemos que, em média, a susceptibilidade regular aumenta suavemente com o campo, enquanto que, no caso caótico, esse aumento acontece com fortes oscilações. Este comportamento pode ser facilmente entendido, se observarmos que, no caso regular, seguramente os 30 primeiros níveis estão em um regime quase-integrável, por isso a semelhança da susceptibilidade regular com aquela do oscilador harmônico. Em contrapartida, no caso caótico, os níveis estão quase que integralmente na região caótica e, dessa forma, os *avoided crossings* são mais fortes, produzindo então as oscilações. Podemos olhar agora para a fig. (5.13); a mesma análise vale neste caso, porém, podemos observar uma pequena oscilação em  $B \approx 1.2$ . Isso decorre do fato que, aumentando  $P$ , estamos aumentando nosso intervalo de energia, o que em algum momento pode trazer algum caos. Essa situação fica bem evidente na figura (5.14), onde oscilações aparecem no caso regular e picos mais agudos aparecem no caso caótico. Esta última figura, no entanto, deve ser olhada com alguma reserva, visto que estamos usando níveis de energia no limite da precisão necessária. De fato, acreditamos que o crescimento rápido de  $\chi$  em campos baixos seja erro numérico.

As seções de Poincaré (4.4 e 4.5) evidenciam um porção caótica no regime regular para campos baixos e uma porção regular no regime caótico para campos altos. Como já vimos, as órbitas de período mais curto são as

que mais contribuem para a magnetização e decorrentemente para a susceptibilidade, e assim, a seção  $xp_x$  acaba retratando bem as porções de energia regular e caótica. No entanto, há várias outras famílias no potencial Nelson, que podem estar estáveis ou instáveis, nessas regiões de energia, acarretando uma mistura de “avoided crossings” com quase-degenerescência, que torna o espectro bem mais complicado do que aquele visto na fig.(4.9), para os regulares e os caóticos, como mostra a fig.(5.15).

### 5.2.3 Efeitos de tamanho.

Estudamos, também, a dependência de  $\chi$  em relação ao tamanho do sistema ou melhor, em relação ao número  $2P$  de elétrons. Na figura (5.16), mostramos esta dependência para três valores de campo. Olhando para esta figura, podemos concluir que, em ambos os casos, regular e caótico,  $\chi$  flutua com  $P$ . Em ambos os casos há flutuações anômalas, que podem ser identificadas com *avoided crossings* estreitos nos correspondentes valores de  $P$  e  $B$  (ver figura 4.7 e 4.8). Este efeito é mais pronunciado quando  $B = 1.0$ , que representa o caso mais regular. A figura (5.17), refere-se ao regime caótico e ilustra o comportamento em  $B = 1.5$ , onde vemos novamente anomalias, mais pronunciadas que em  $B = 1.0$ , visto que o sistema vai se regularizando à medida que o campo aumenta.

Neste capítulo, os resultados numéricos foram apresentados, evidenciando, em alguns momentos, as diferenças no comportamento da magnetização e da susceptibilidade no regime regular e caótico. Em linhas gerais, vimos que o comportamento de  $\chi$  para campos baixos, entre 0 e 0.2 aproximadamente, segue as previsões de Oppen e Agam no sentido que  $\chi_{reg} \gg \chi_{caot}$ , como ilustra a figura (5.19). Para campos maiores, no entanto, o comportamento de  $\chi$  é bem mais complicado para o regime caótico. Em particular, observamos que, para campos “intermediários”, tipicamente entre 0.5 e 1.0,  $\chi_{caot}$  é da mesma ordem, ou até maior, que  $\chi_{reg}$ , como ilustrado

nas figuras (5.12) e (5.13). Esse resultado reflete-se também na análise dos efeitos de tamanho, figura (5.17): na região “intermediária”  $\chi_P$  tende a ficar maior. Assim para  $P \approx 10$  a energia de Fermi é bem baixa (o sistema ainda é regular) e essa região complicada só é atingida para  $B \approx 1.5$ . Para  $P \approx 20$  o campo  $B \approx 1.0$  tem  $\chi$  maior e para  $P > 35$  o campo  $B = 0.5$  (o mesmo onde  $\chi$  na fig. (5.12) começa oscilar) é quem ganha.

Uma questão que ainda poderia ser levantada aqui, é que a susceptibilidade do oscilador, fig.(5.4), portanto, a susceptibilidade de um sistema integrável, também apresenta um aumento na região de  $\bar{B} \approx 1.5$  mais pronunciado para  $P$ 's maiores, que independe de bifurcações, evidentemente. Não seria esse o caso do aumento da  $\chi_{caot}$ ? De fato não é. Observamos, nesta mesma figura, que o máximo da susceptibilidade é atingido praticamente no mesmo valor de campo  $\bar{B}$  em todos os  $P$ 's. Vemos, também, que, para  $B < \bar{B}$  a susceptibilidade aumenta linearmente com o campo e que, para  $B > \bar{B}$ , ela tende a uma independência do campo, ou seja, para  $B < \bar{B}$ , a susceptibilidade é proporcional à área (a geometria é mais importante) e para  $B > \bar{B}$  o campo domina a competição. Essa mesma situação pode ser verificada no regime regular do potencial Nelson fig.(5.18). Observamos nesta figura que, para  $P = 30$ ,  $\chi$  é muito semelhante à do oscilador, pois, conforme já discutido anteriormente, o regime regular está quase integrável. À medida que aumentamos  $P$ , a comparação torna-se mais complicada (o potencial Nelson não é integrável), mas vemos que, a grosso modo, a susceptibilidade máxima é sempre atingida na região de  $\bar{B} \approx 1.5$ , exceto para  $P = 120$  onde já temos algum caos [fig.(4.4)] e, o crescimento rápido de  $\chi$  para  $B$ 's menores, só vem a confirmar que a situação nesse caso é diferente.

O comportamento de  $\chi$  nesses campos intermediários entre o regime  $B \rightarrow 0$  e o de Landau ( $B \rightarrow \infty$ ) será analisado em detalhe no próximo capítulo. Veremos também a conexão entre nossos resultados e os resultados teóricos obtidos para bilhares, assim como a relação com o experimento de



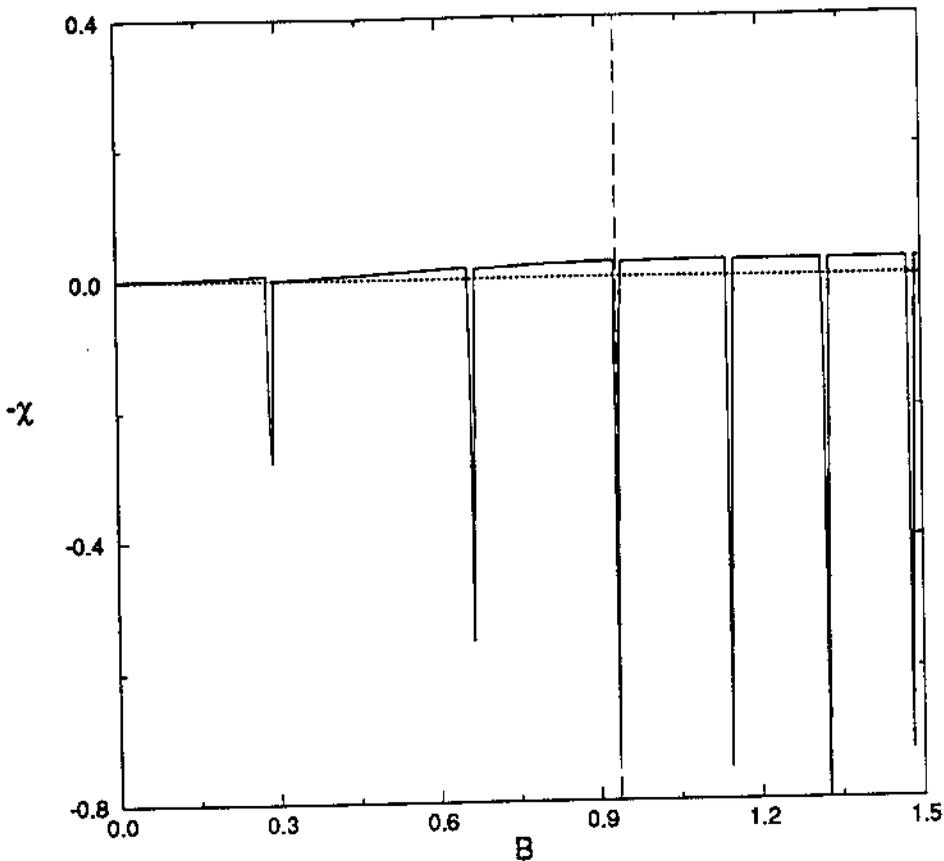


Figure 5.4: Susceptibilidade, como função do campo, à temperatura zero, para os 30 primeiros níveis do oscilador. A linha pontilhada corresponde à susceptibilidade média originária das correções do termo de Weyl (eq. (3.37)) e a vertical tracejada mostra um dos valores de campo  $\bar{B}$  onde  $E_{30}(\bar{B})$  causa brusca variação em  $\chi$

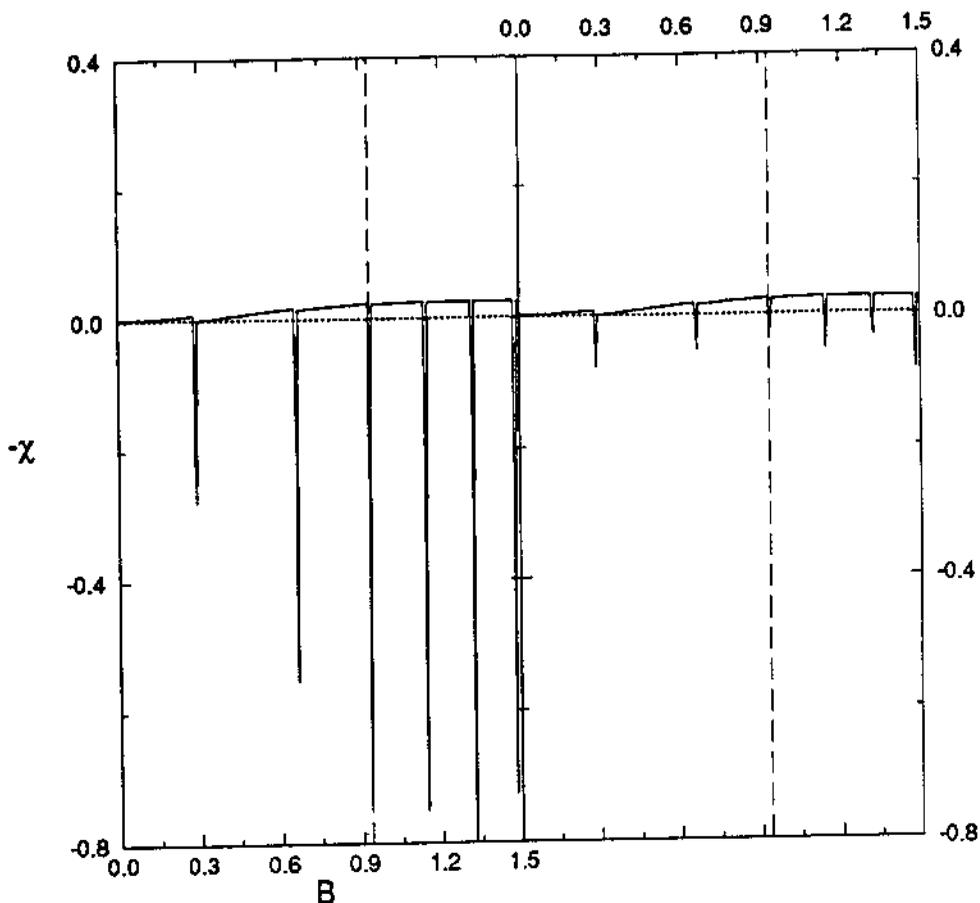


Figure 5.5: A temperatura suavizando a susceptibilidade. À esquerda  $T = 0$  e à direita  $K_B T = 0.02 \times \mu$ ,  $\mu = E_{30}$ .

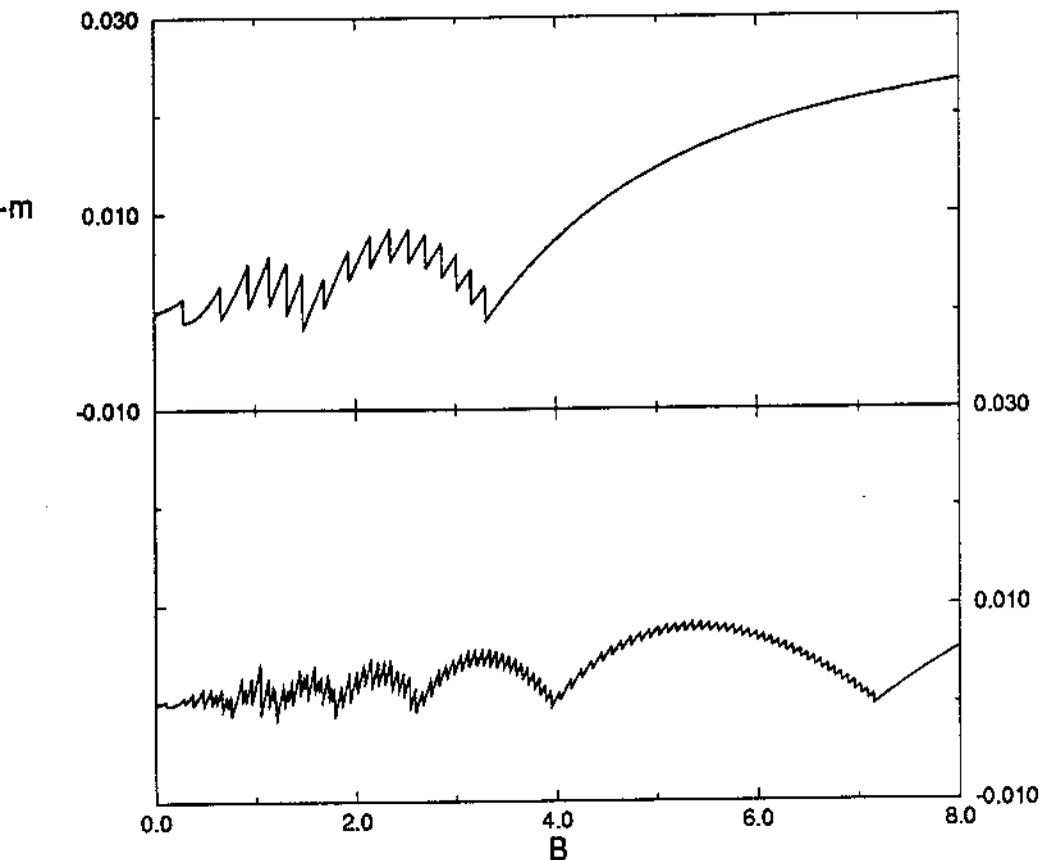


Figure 5.6: Magnetização como função do campo, para o oscilador harmônico. Em (a) temos  $P = 30$  e em (b)  $P = 120$  (mesma escala), evidenciando as oscilações de Haas-van Alphen.

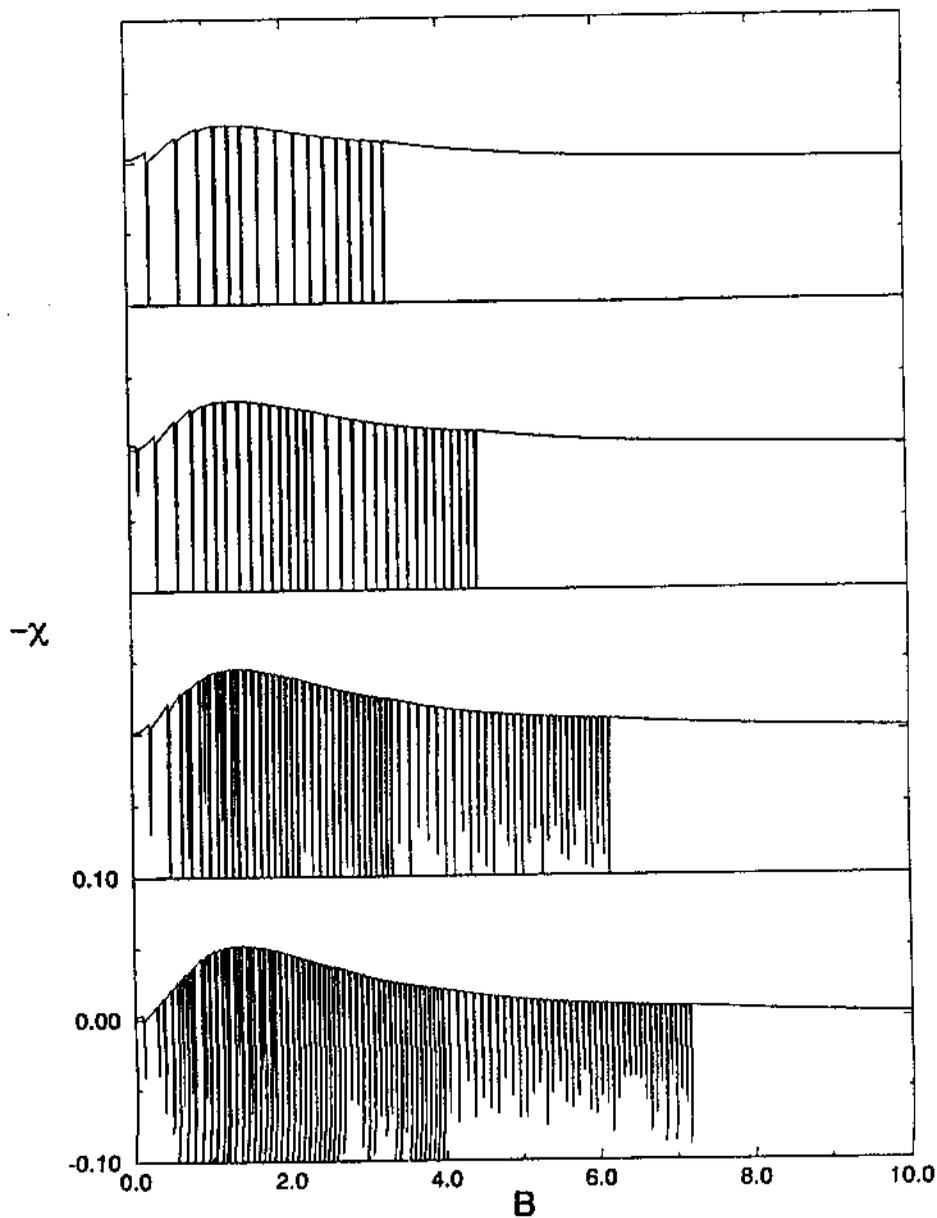


Figure 5.7: Susceptibilidade como função do campo, para o oscilador harmônico. De cima para baixo temos  $P = 30$ ,  $P = 50$ ,  $P = 90$  e  $P = 120$  ( $\hbar = 0.06$ ). Ver fig.(2.2).

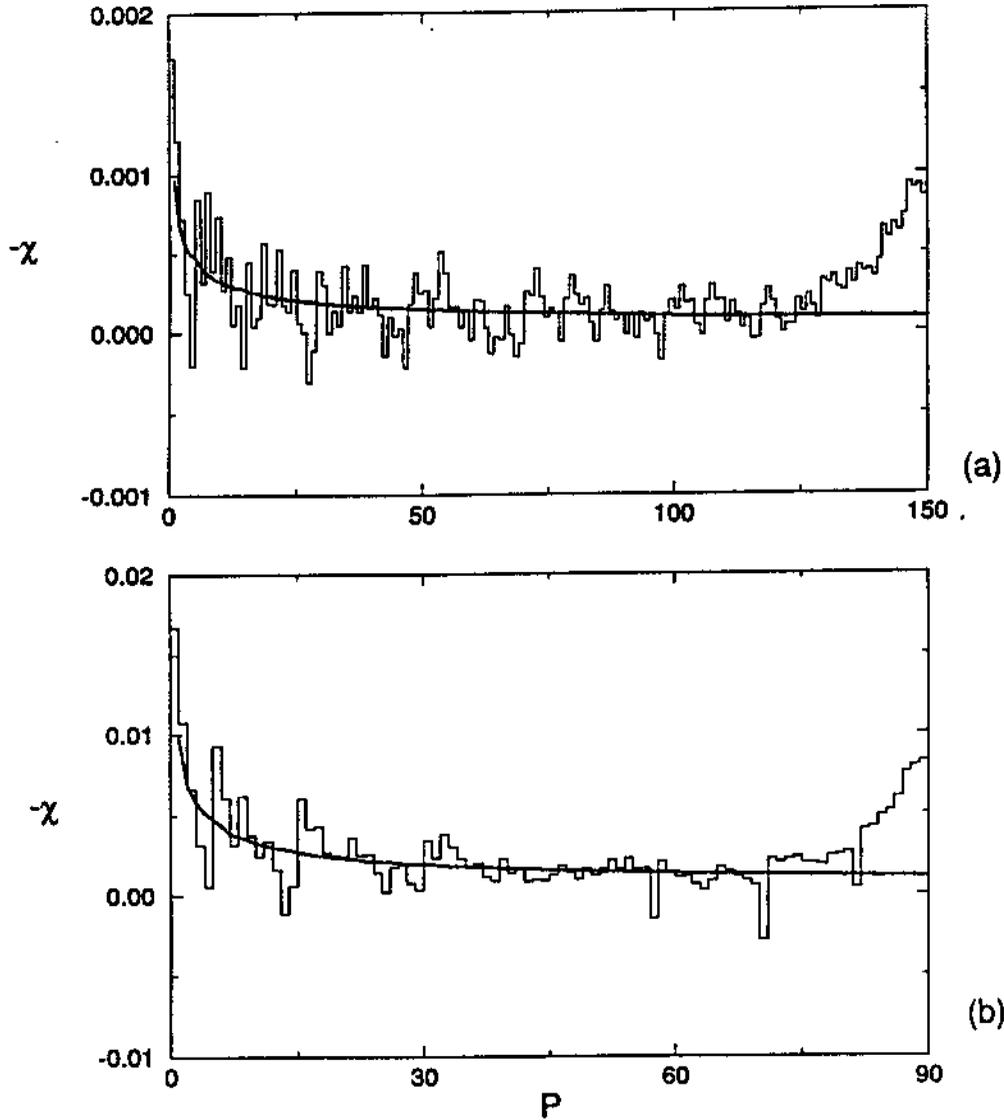


Figure 5.8:  $-\chi$  como função de  $P$ . Em (a) níveis regulares  $1 \leq P \leq 150$  e (b) níveis caóticos  $1 \leq P \leq 90$ . A curva representa o resultado analítico (5.4).

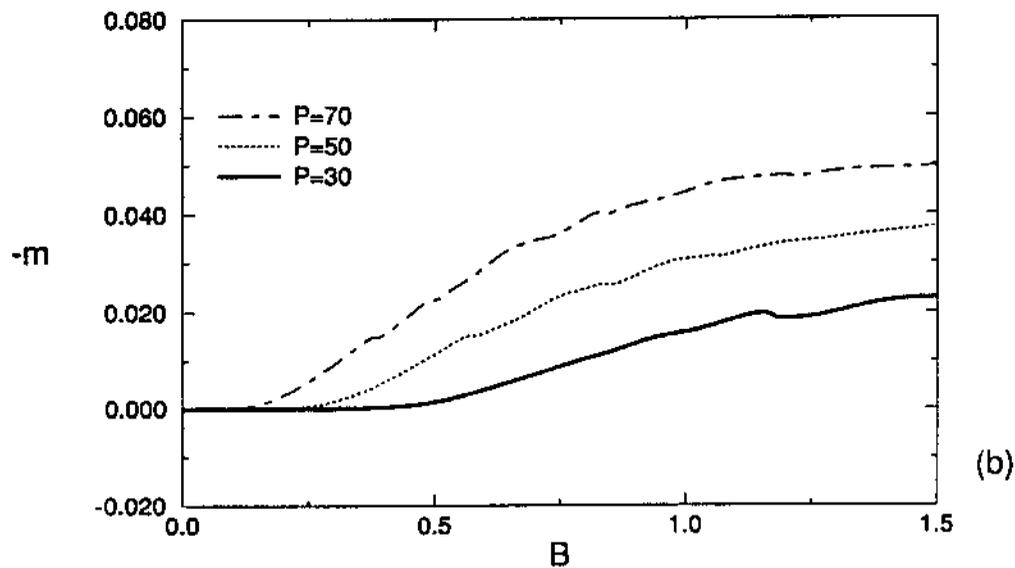
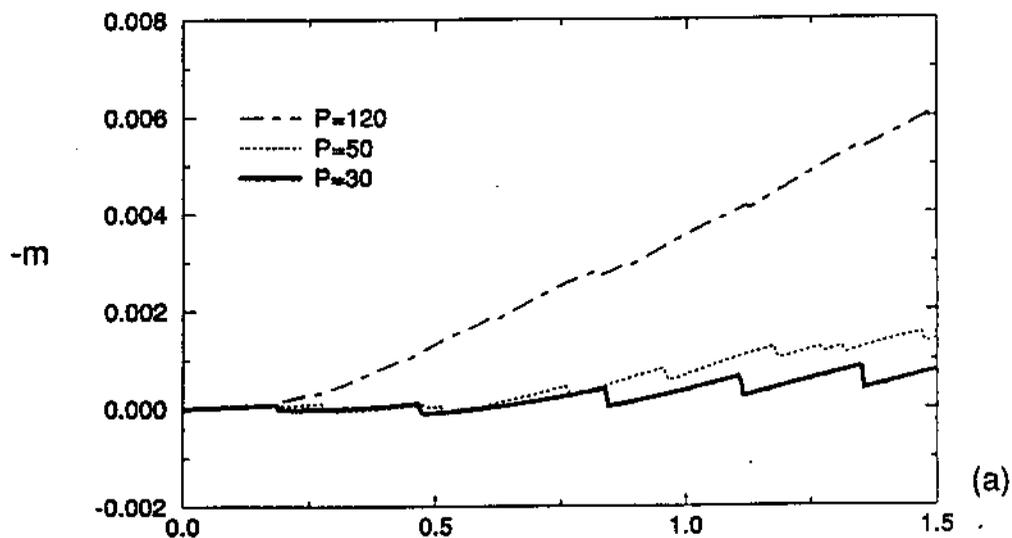
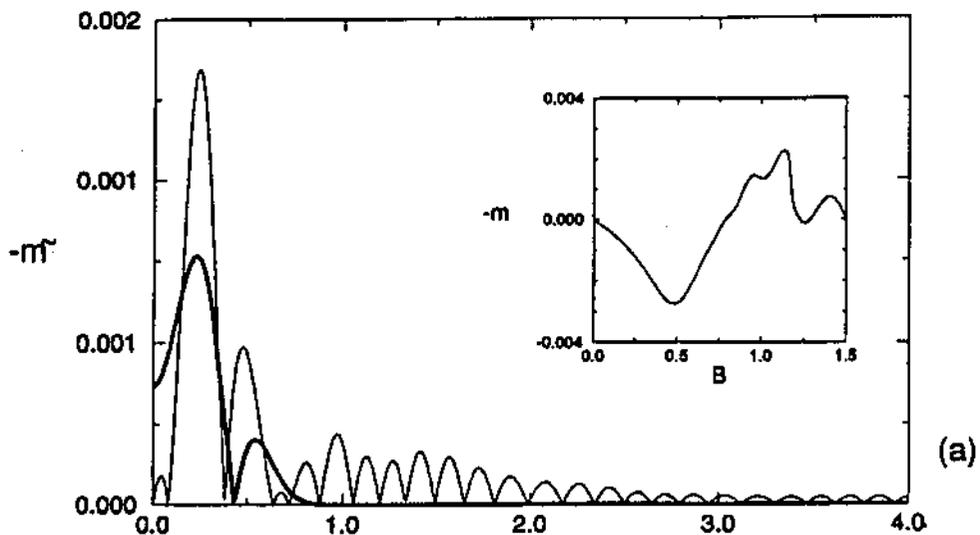
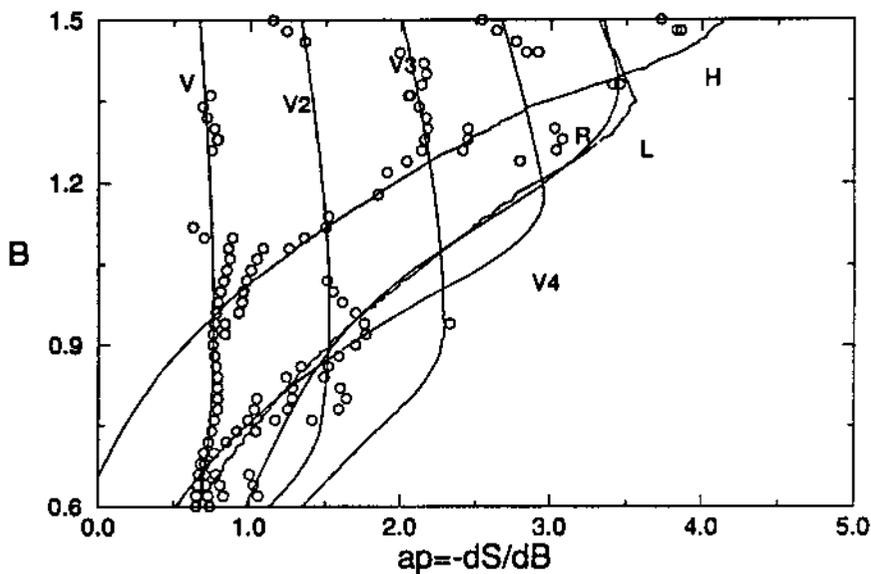


Figure 5.9:  $-m_0$  como função de  $B$ . A figura (a) corresponde ao níveis regulares e (b) aos caóticos, para os valores de  $P$  indicados na legenda.



(a)



(b)

Figure 5.10: Em (a) temos a transformada de Fourier de  $m_0^{osc}$  (linha fina), a transformada obtida via eq.(3.43) para a família Vertical sem repetição (linha cheia) e, no inset,  $m_0^{osc}$ . Em (b) temos campo  $\times$  máximo local da transformada de Fourier para  $P = 30$ .

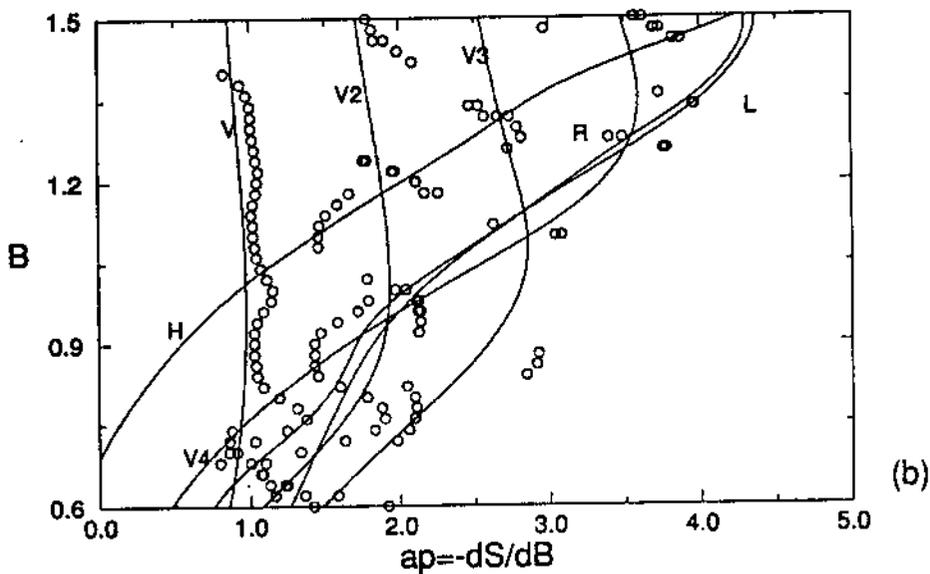
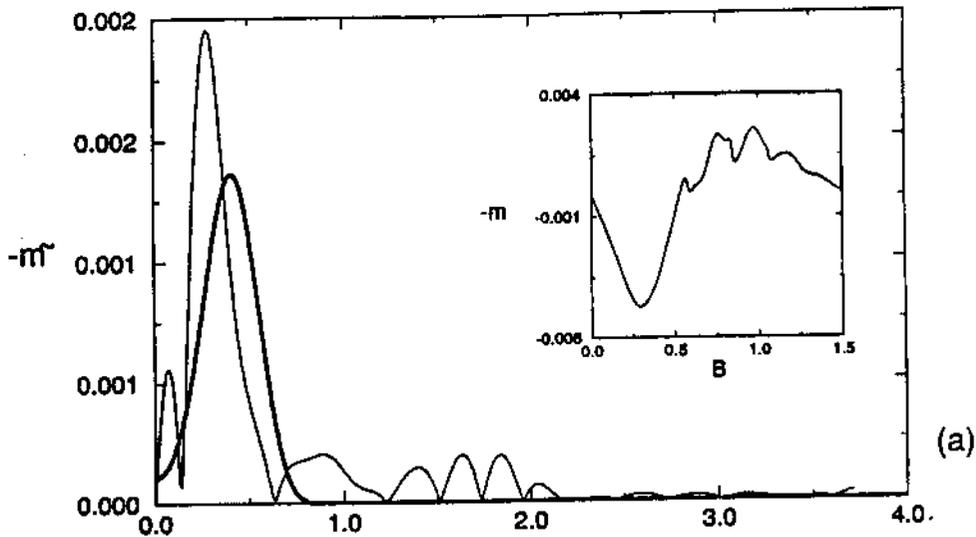


Figure 5.11: Em (a) temos a transformada de Fourier de  $m_0^{osc}$  (linha fina), a transformada obtida via eq.(3.43) para a família Vertical sem repetição (linha cheia) e, no inset,  $m_0^{osc}$ . Em (b) temos campo  $\times$  máximo local da transformada de Fourier para  $P = 50$ .

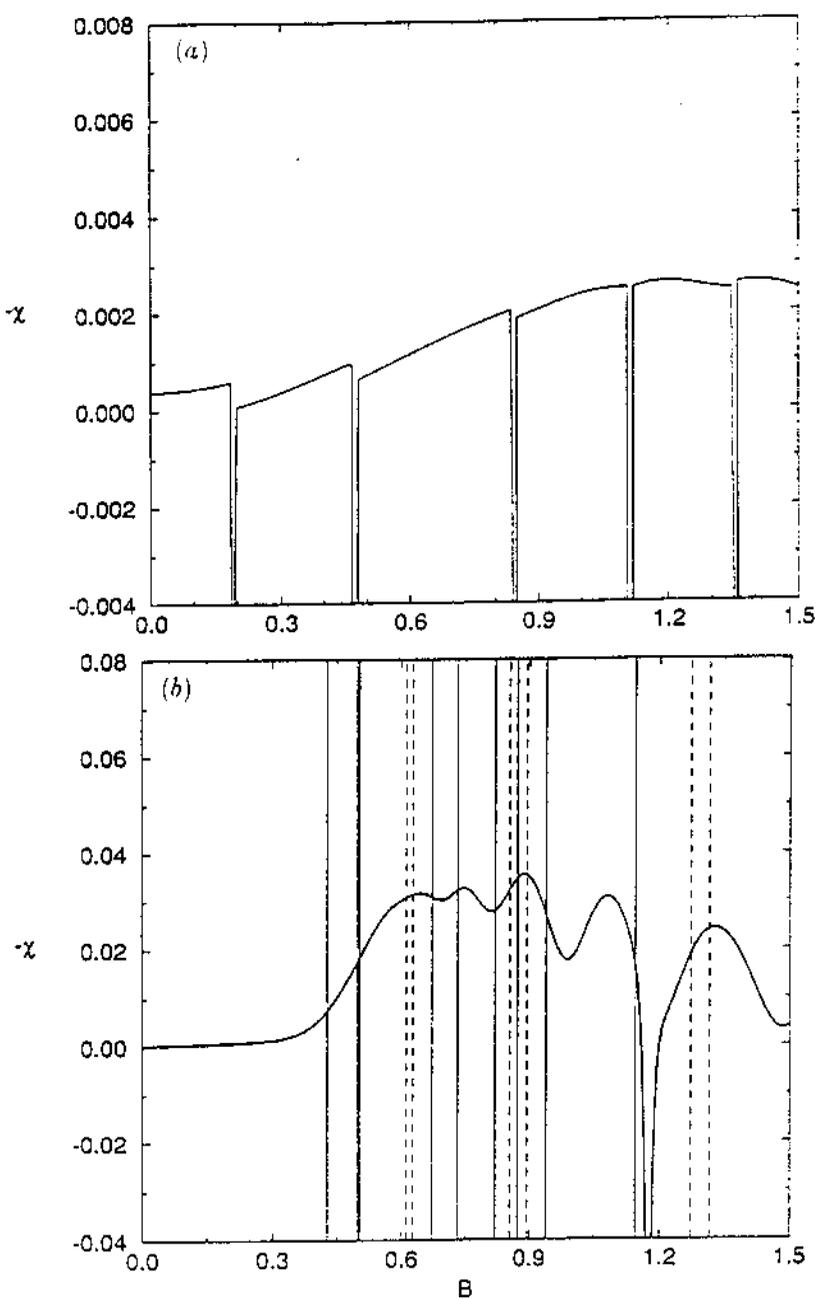


Figure 5.12: Susceptibilidade em função do campo para  $P = 30$ . Em (a) o caso regular e em (b) o caso caótico. As verticais (tracejadas), nesse caso, correspondem a valores de campo onde o  $TrM = 0$  ( $TrM = 4$ ), de acordo com a figura (4.6).

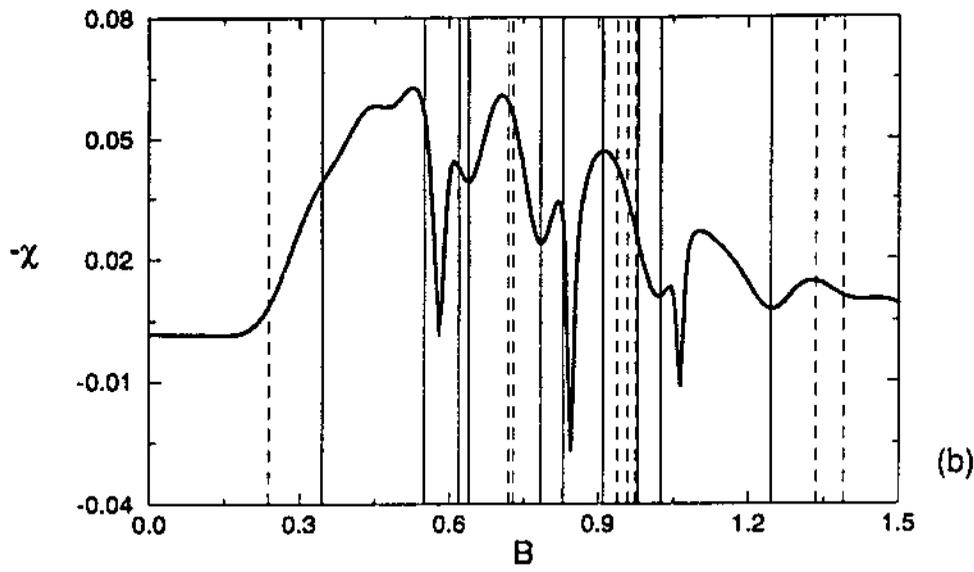
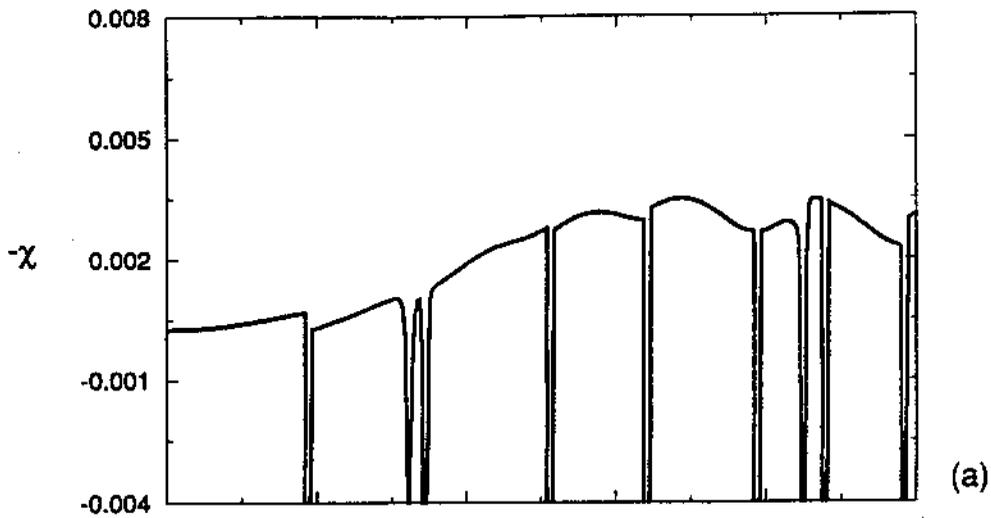


Figure 5.13: Susceptibilidade em função do campo para  $P = 50$ . Em (a) o caso regular e em (b) o caso caótico. As verticais(tracejadas), nesse caso, correspondem a valores de campo onde  $TrM = 0$  ( $TrM = 4$ ), de acordo com a figura (4.6).

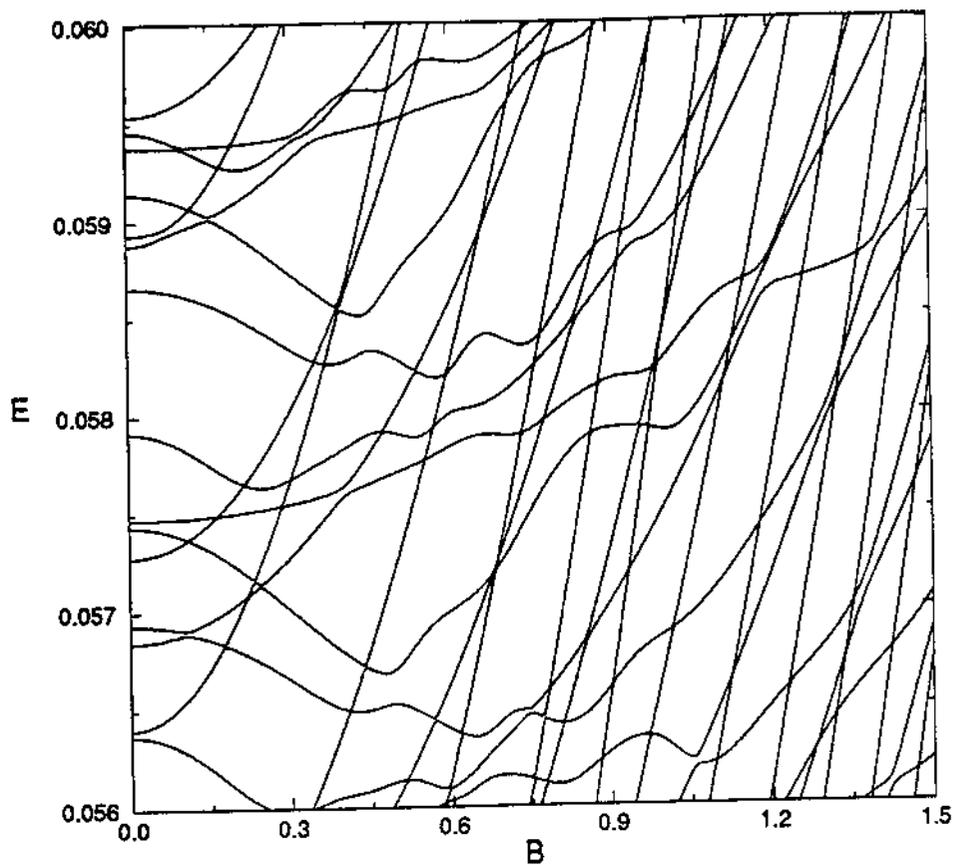


Figure 5.15: Um *zoom* do espectro em função de campo na região do  $120^\circ$  nível regular.

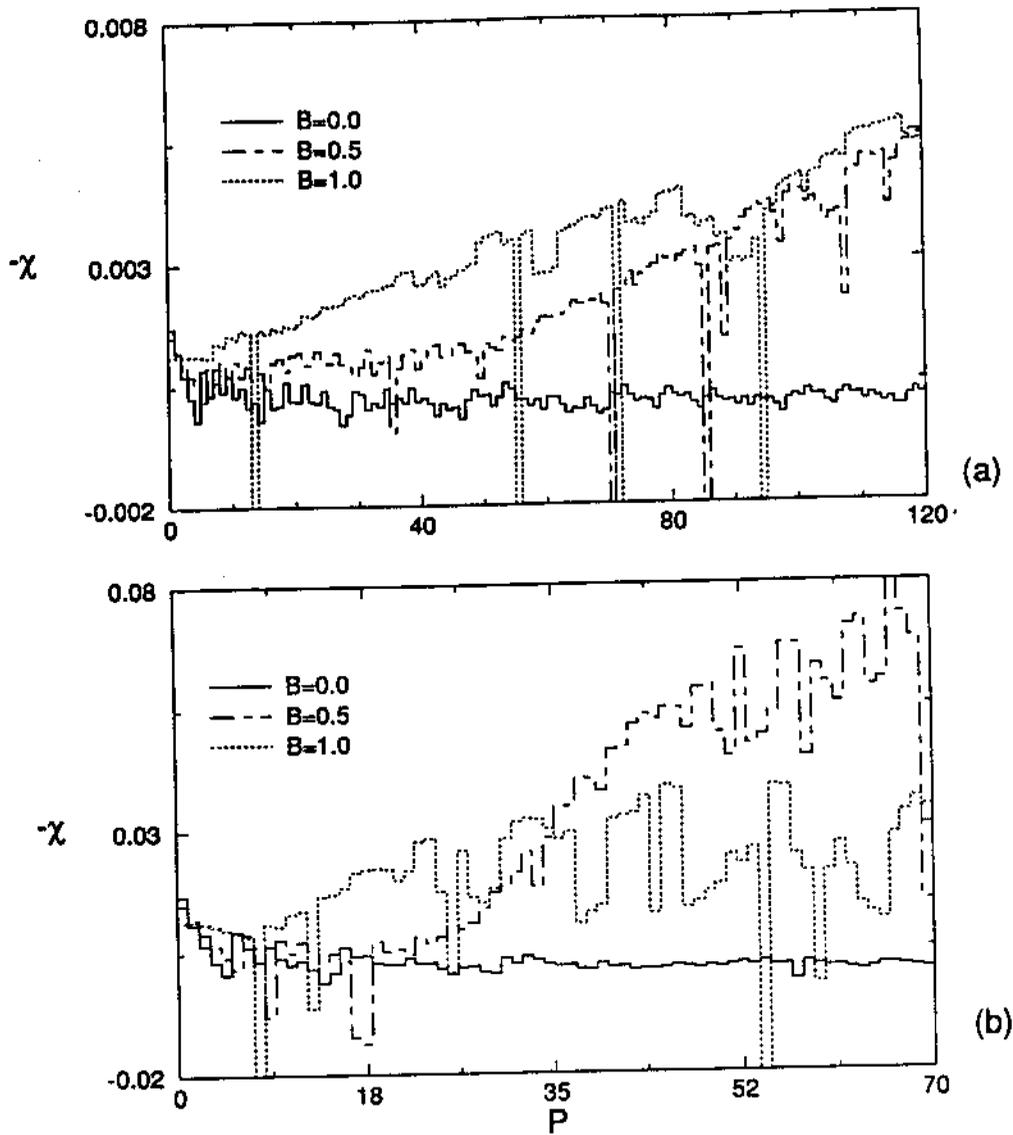


Figure 5.16:  $-\chi$  como função de  $P$ . Em (a) o caso regular e em (b) o caso caótico.

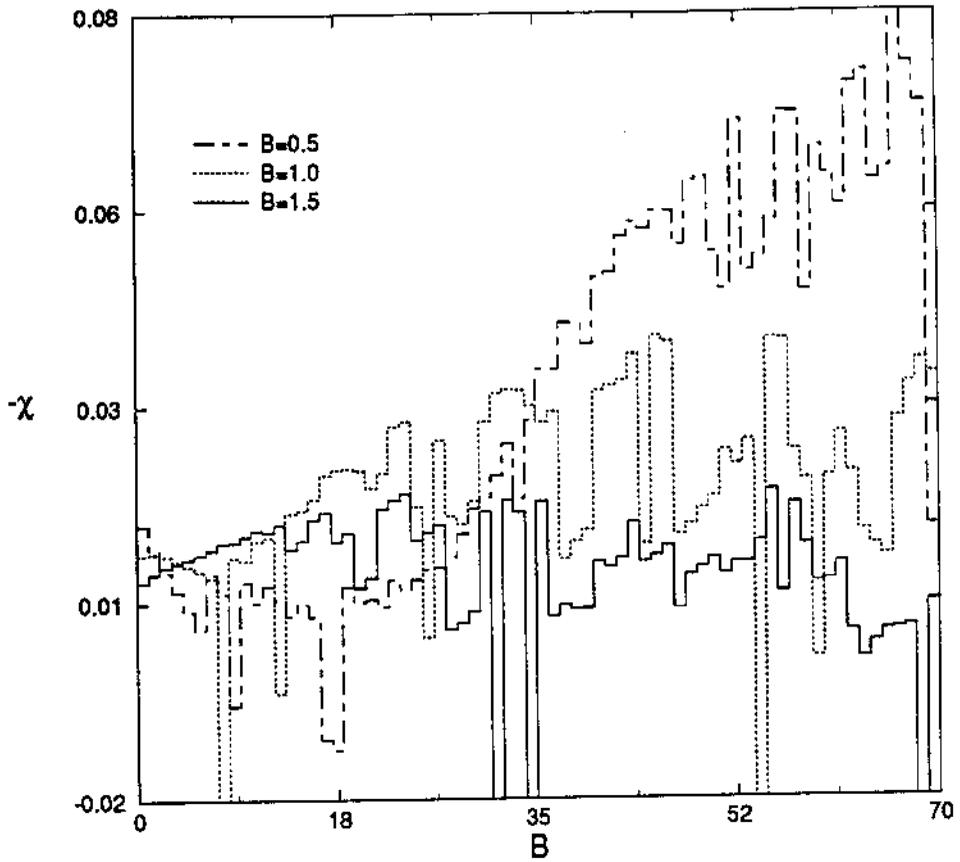


Figure 5.17:  $-\chi$  como função de  $P$  para o caso caótico inclusive  $B = 1.5$ .

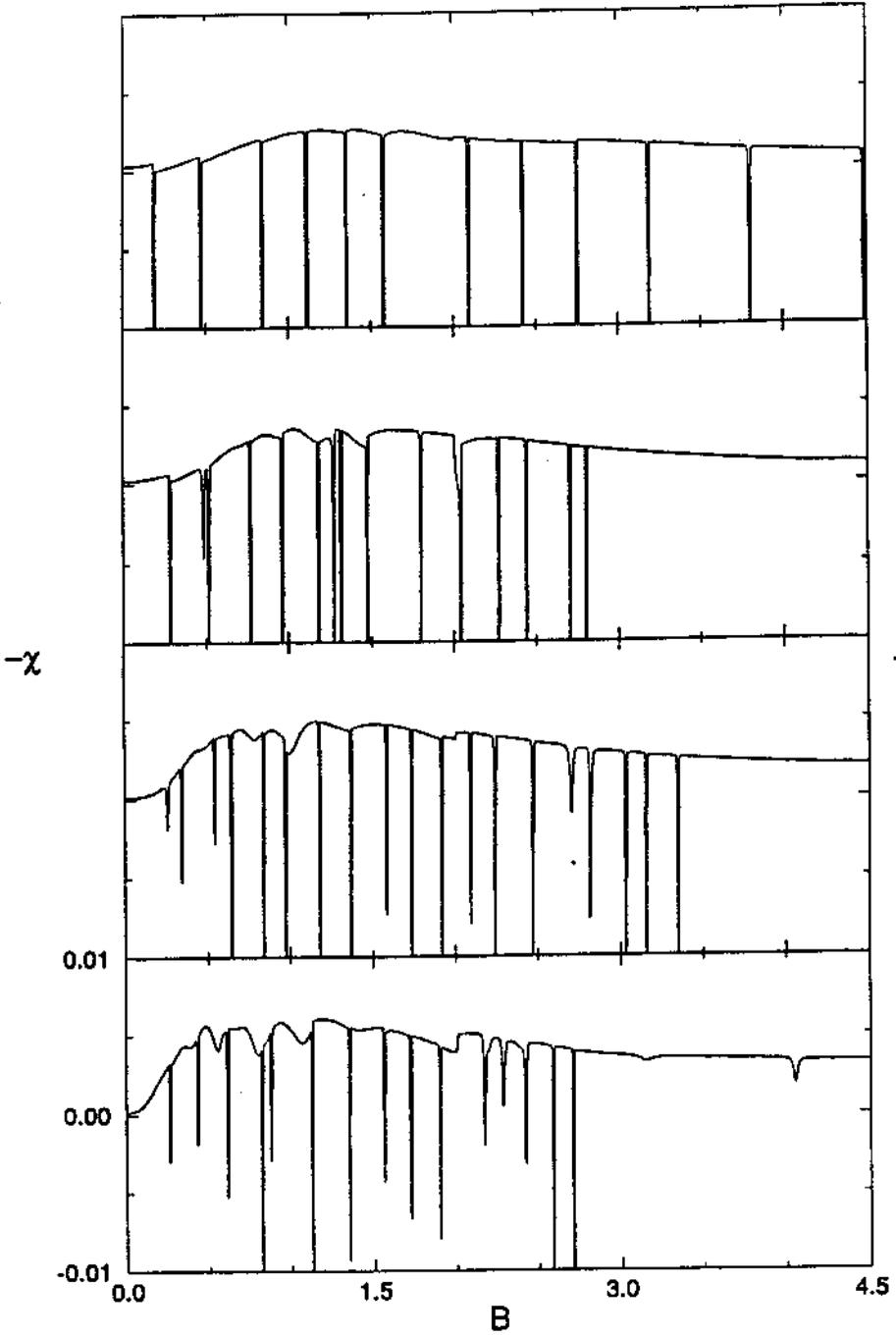


Figure 5.18:  $-\chi \times B$  para o caso regular ( $\hbar = 0.006$ ) para  $P = 30, 50, 90, 120$ ).

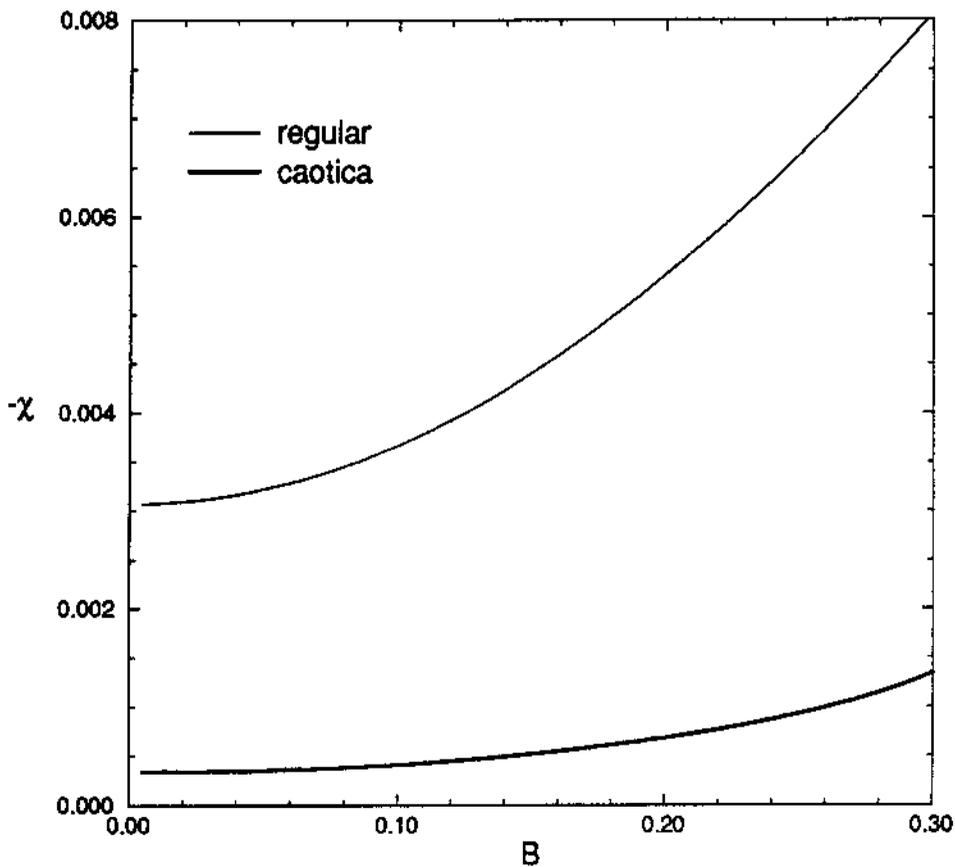


Figure 5.19:  $-\chi \times B$  para  $P_{reg} = 30$  e  $P_{caot} = 31$ . Fizemos  $\chi_{reg} \times 10$ , visto que  $\hbar_{caot} = 10\hbar_{reg}$  para comparar com a  $\chi_{caot}$ .

## Capítulo 6

# A resposta magnética de sistemas reais - A experiência.

A última década de intensa pesquisa em física de matéria condensada trouxe novos fenômenos em sistemas mesoscópicos. Estes fenômenos, usualmente desaparecem no limite em que todas as dimensões da amostra tornam-se macroscópicas. Entre eles, há as oscilações de Aharonov-Bohm da condutividade, assim como vários efeitos de flutuações mesoscópicas. Um exemplo interessante é o das correntes persistentes induzidas em um anel por um fluxo magnético  $\phi$ . Uma demonstração experimental da existência de tais correntes foi publicada em 1990 [38].

Em um anel metálico isolado, cujas dimensões são muito menores que o comprimento de coerência de fase eletrônica, há uma corrente permanente induzida por um campo magnético que atravessa o anel. Para um único anel, mostra-se que a corrente persistente, que é consequência da sensibilidade dos níveis de energia às mudanças das condições de contorno determinadas pelo campo magnético, é uma função periódica do fluxo  $\phi$  com período  $\phi_0 = h/e$  ( $h$  é a constante de Planck e  $-e$  a carga eletrônica). Ela reflete a periodicidade

do movimento eletrônico ao longo do anel e diminui exponencialmente com o tamanho do sistema na presença de espalhamento elástico.

Experimentalmente, dois tipos de investigações são possíveis. Uma é o estudo de um anel isolado, [39] para o qual é necessário um detector extremamente sensível para medir o momento magnético (da ordem de  $10^4$  magnetons de Bohr) induzido pela corrente permanente. A outra experiência possível é a investigação de um grande número de loops (tipicamente  $10^7$ ), que, *a priori*, não necessita de um detector tão preciso, mas não fornece a resposta de um único anel.

A observação experimental de um único anel [39], levantou duas questões:

1. A corrente média do conjunto exibe uma periodicidade de  $\phi_0/2$  (a metade da periodicidade de um único anel).
2. A amplitude obtida é muito maior que o decrescimento exponencial esperado.

Além disso, outra observação é que, no conjunto de  $10^7$  anéis, a periodicidade  $\phi_0 = h/2e$  sobrevive, mas, somente no ensemble canônico (i.e., quando o número de elétrons em cada membro do ensemble é mantido fixo e independente do fluxo) ao contrário do ensemble grand-canônico (em que o potencial químico é fixado, enquanto que o número de elétrons pode variar com o fluxo). Ou seja, cálculos fixando o potencial químico não dão a periodicidade  $\phi_0/2$ , de modo que é essencial, em procedimentos de médias [19], manter o número de elétrons fixo em cada anel, em vez do potencial químico. Isto, como acabamos de ver, leva a diferentes resultados físicos.

## 6.1 De correntes persistentes à susceptibilidade magnética. Uma nova experiência

Como já citado no capítulo 2, um gás de elétrons à temperatura  $T$  e campo magnético  $B$ , sob certas condições, exibe uma pequena resposta diamagnética, a susceptibilidade de Landau. Se esse gás é agora confinado a um volume finito, vimos que é necessário fazer correções de efeito de tamanho. Tais correções vem sendo estudadas teoricamente há muito tempo. Contudo, resultados recentes acabaram reacendendo os interesses. O primeiro foi o resultado teórico de Jalabert et al em 1990 [6] e o resultado experimental de Marcus et al em 1992 [7] que mostravam que a condutância de microestruturas balísticas é sensível à natureza da dinâmica clássica subjacente, integrável ou caótica. Esses resultados levantaram a questão se isto também poderia acontecer na susceptibilidade. O segundo foi o resultado da experiência de Lévy [17], que mediu a susceptibilidade de um conjunto de  $10^5$  micro-quadrados em uma heterojunção de GaAs. Esta experiência foi muito importante na orientação de estudos teóricos.

A susceptibilidade mesoscópica típica medida em um único quadrado é caracterizada pela média rms  $\langle \delta\chi^2 \rangle^{1/2}$ . Na experiência de Lévy, foram feitos  $10^5$  quadrados, requerendo assim, o cálculo de uma susceptibilidade média do conjunto  $\langle \delta\chi \rangle$ . Assim como para correntes persistentes, a susceptibilidade é muito pequena (praticamente zero) ao tomarmos médias no ensemble grand-canônico (fixando o potencial químico) e a média é não-nula e paramagnética para pequenos valores de campo, se a média é feita no ensemble canônico (número de elétrons fixo em cada quadradinho).

Lévy et al mediram a susceptibilidade do conjunto de  $10^5$  quadrados isolados em temperaturas sub-Kelvin. As duas amostras experimentais A1 e A2 foram construídas em heteroestruturas de alta mobilidade e alta densidade de portadores. Os quadrados tinham a medida  $4.5\mu m$  de lado e livre caminho médio estimado  $l_{el} \approx 5\mu m(10\mu m)$  para A1(A2). Os comprimentos de onda eletrônicos são  $\lambda_F \approx 80nm(45nm)$  para A1(A2) e portanto,  $k_FL \approx 350(600)$ .

As observações básicas, segundo Oppen [9], são as seguintes: a suscep-

tibilidade exibe um comportamento paramagnético em campo baixo, cuja amplitude é cerca de  $100 \times |\chi_{Landau}|$  e cuja largura na metade do máximo é  $2.9Oe$ . A altura do pico diminui com a temperatura. Para campo magnético  $B \approx \phi_0/L^2$ , o raio ciclotônico  $R_c/L = k_F L/2\pi \approx 60(100)$  para  $A1(A2)$  é muito maior que a dimensão do bilhar e o comprimento de fase, de forma que pode-se aplicar, nesse caso, os limites teóricos de campos fracos de Oppen. Uma comparação detalhada dos resultados experimentais com a expressão teórica obtida para a susceptibilidade nesse limite é complicada, por causa das inevitáveis flutuações da geometria dos quadrados experimentais e do espalhamento residual. Também, as órbitas periódicas reais dos quadrados experimentais diferem daquelas de um quadrado ideal e espera-se uma concordância qualitativa, mas não quantitativa, entre os resultados teóricos e experimentais.

Confirmando essa expectativa, os resultados teóricos são maiores que os experimentais (o dobro praticamente), o que é consistente, uma vez que a desordem residual tende a reduzir a susceptibilidade. A dependência do campo magnético é baseada na precisa área fechada pela órbita periódica e deve ser sensível aos desvios de uma geometria quadrada perfeita. A comparação dos resultados mostra que a órbita periódica dominante no quadrado experimental tipicamente engloba uma área menor que a órbita periódica do bilhar quadrado ideal, o que é fisicamente razoável.

Em resumo, os resultados analíticos de Oppen, para a amplitude e a dependência do campo (para campos baixos), parecem consistentes com a experiência, exceto pela dependência com a temperatura, que decai muito mais rápido teórica do que experimentalmente. Temos, então [9], para um único quadrado,

$$\langle \delta\chi^2 \rangle^{1/2} \sim |\chi_{Landau}| \times \begin{cases} (k_F L)^{(5-d)/2} & \text{integrável} \\ (k_F L)^{(3-d)} & \text{completamente caótico} \end{cases}$$

onde  $L$  é a dimensão linear do bilhar e  $d$  a dimensionalidade e, para a média

da susceptibilidade no conjunto de quadrados,

$$\langle \delta\chi \rangle \sim |\chi_{Landau}| \times \begin{cases} (k_F L)^{(3-d)} & \text{integrável} \\ (k_F L)^{2(2-d)} & \text{completamente caótico.} \end{cases}$$

Estes resultados podem ser escritos em termos de  $\hbar$ , pois,  $k_F = \sqrt{2E_f/\hbar}$ , de forma que, para o bilhar quadrado ( $d = 2$ ) no limite de campos baixos, obtemos

$$1 \text{ quadrado} \sim |\chi_{Landau}| \times \begin{cases} (1/\hbar)^{3/2} & \text{integrável} \\ (1/\hbar) & \text{completamente caótico} \end{cases}$$

$$10^5 \text{ quadrados} \sim |\chi_{Landau}| \times \begin{cases} (1/\hbar) & \text{integrável} \\ \hbar^0 & \text{completamente caótico} \end{cases}$$

Assim, podemos dizer que a susceptibilidade de bilhares integráveis é muito maior que a de bilhares completamente caóticos (lembrando que estamos no limite de campo muito baixo) e que a ordem relativa da magnitude, comparada à susceptibilidade de Landau, depende da dimensionalidade da amostra. Geralmente, a susceptibilidade é mais importante para as amostras de menor dimensionalidade.

## 6.2 A susceptibilidade generalizada para sistemas mistos.

Enquanto, paralelamente, Oppen e Agam investigavam a susceptibilidade para sistemas integráveis e completamente caóticos, nós partimos para a investigação da susceptibilidade em um sistema com dinâmica mista, o potencial Nelson (capítulo 3 e 5).

Se no sistema integrável as órbitas periódicas formam famílias, que interferem construtivamente aumentando a susceptibilidade e no sistema completamente caótico, as órbitas são instáveis e isoladas, no sistema misto estas duas regiões convivem juntas no espaço de fase. Para ilustrar como seria a susceptibilidade nesses casos, Oppen sugeriu uma experiência:

“ As diferentes contribuições para a susceptibilidade de órbitas periódicas isoladas e não-isoladas levariam a uma transição de fase semiclássica da susceptibilidade no bilhar de Sinai. A dinâmica clássica na geometria deste bilhar é ergódica se o raio do disco  $R$  é diferente de zero. Contudo, o bilhar de Sinai não é completamente caótico, porque há dois tipos de órbitas periódicas. Há um número infinito de órbitas periódicas instáveis e isoladas, que espalham do disco, e, um número finito de órbitas marginalmente estáveis remanescentes das órbitas periódicas do quadrado. À medida que aumentamos  $R$ , elas tendem a desaparecer e a última órbita marginalmente estável é desestabilizada no raio crítico  $R_c = L/2\sqrt{2}$ . Assim, devido à existência destas órbitas, para  $R < R_c$ , deve valer os resultados do limite integrável e, para  $R > R_c$ , somente órbitas isoladas e instáveis contribuem valendo, então, o limite completamente caótico”. Isto implica que, a susceptibilidade típica, no limite semiclássico

$$\langle \delta\chi^2 \rangle^{1/2} \sim |\chi_{Landau}| \times \begin{cases} (k_F L)^{3/2} & R < R_c \\ (k_F L) & R > R_c. \end{cases}$$

Nosso trabalho, contudo, consistiu em separar 2 regiões de energia no mesmo sistema, uma predominantemente regular e outra predominantemente caótica (capítulo 4), onde vimos que mudanças no campo desencadeiam um processo de estabilização das órbitas (campos mais altos), que por sua vez é acompanhado de um processo de bifurcações fig.(4.7). Obviamente, ao variarmos o campo, variamos também o período, a ação e os autovalores

da matriz monodromia da órbita periódica, lembrando que o campo muda a geometria da órbita periódica; para campos não-nulos, todas as órbitas são rotações. Dessa alteração, decorre que toda vez que o traço da matriz monodromia  $TrM$  se tornar negativo ou maior que 4, a órbita fica instável e quando estiver entre zero e quatro inclusive, a órbita é estável. Este processo é acompanhado de bifurcações, por exemplo, para  $TrM = 0$  temos duplicação, para  $TrM = 1$  triplicação e para  $TrM = 2$  a quadruplicação. Para  $TrM = 4$ , a situação é um pouco diferente, pois, pode haver uma simples mudança de estabilidade da órbita ou uma mudança de estabilidade dando origem a uma nova família com o mesmo período da família original. Essa situação é mais rara, mas possível (seção 4.1).

Como vimos no capítulo 3, a contribuição das órbitas para a densidade oscilante (decorrentemente para a  $m^{osc}$  e  $\chi^{osc}$ ) dependem da amplitude  $A_p$ , eq.(3.3), (3.4) e (3.7) que diverge se  $TrM = 4$  ( $v = 0$  ou  $u = 0$ ). Esse é exatamente um dos valores de  $TrM$  onde ocorrem transições estável-instável. O outro valor  $TrM = 0$ , também gera divergências, desta vez na nova órbita bifurcada, para a qual  $TrM = 4$  (fig.(4.7b)). Na verdade, se uma órbita sofre uma transição instável-estável, teremos, de acordo com as equações do capítulo 3,  $A_{pj} = 1/2\sin(jv/2)$  onde  $j$  é o índice que conta as repetições. Assim, toda vez que  $v = 2\pi k/l$  ( $k < l$  e primos entre si) a repetição  $j = l$  produzirá uma amplitude divergente. A divergência em si é uma falha da aproximação semiclássica, que pode ser corrigida, levando-se em conta “termos de ordem superior” no mapa de Poincaré. Esses cálculos foram feitos por Ozorio de Almeida e Hannay [16] e dão por exemplo,  $A_{p1} \approx 1/\hbar^{1/6}$  (para  $TrM = 0$ , ou  $v = 0$  e  $j = 1$ ) e para  $l > 4$   $A_{pl} \approx 1/\hbar^{1/2}$ . Como apontado nesse mesmo trabalho, durante uma incursão por uma região estável a órbita periódica contribui para a densidade de estados com uma potência  $1/\hbar^{3/2}$ , ao invés de  $1/\hbar$  da contribuição isolada, que é a mesma magnitude que aparece no cálculo da densidade de um sistema integrável. Assim sendo, é de se

esperar um aumento na susceptibilidade toda vez que uma das famílias principais tornar-se estável, além da contribuição acentuada também da órbita que nasce no processo de bifurcação. Assim, a afirmação de Oppen e Agam fica incompleta, uma vez que só é válida no limite de campo realmente muito baixo. Nós podemos melhorar essa afirmação, dizendo que a susceptibilidade de sistemas caóticos é comparável à susceptibilidade de sistemas integráveis, no limite em que o campo inicia um processo de estabilização das órbitas, acompanhado de um desencadeamento de bifurcações.

Voltando às figuras (5.12) e (5.13), vemos que os valores de campo onde ocorrem bifurcações das órbitas curtas (linhas verticais) de fato correspondem à região onde  $\chi_{caot}$  fica grande. Esta situação também é ilustrada na figura (6.1), sendo que, aqui, colocamos a susceptibilidade regular e caótica média na mesma escala. Isto foi feito multiplicando  $\chi_{reg}$  por 10, visto que  $\hbar_{caot} = 10 \times \hbar_{reg}$ . A média foi obtida pela convolução da susceptibilidade com uma gaussiana:

$$\langle \chi(B) \rangle = \frac{1}{2\Delta\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \chi(B, P) e^{-(P-\bar{P})^2/(4\Delta^2)} dP.$$

para  $\Delta = 5$  e  $\bar{P} = 30$ . Essas médias são as médias das figuras (5.12). A região de campo onde  $\chi_{caot} > \chi_{reg}$  corresponde a região de campo em que as famílias principais passam por uma alta densidade de bifurcações fig(4.7). O processo de estabilização pode ser acompanhado nas seções de Poincaré  $xp_x$  para o caso que usamos  $P = 30$ , figura (6.2).

Vemos claramente nas figuras (6.1) e (5.19) que, para campo baixo, a susceptibilidade regular é maior que a caótica, pois nesse caso, os 30 primeiros níveis regulares são regulares de fato e as seções de Poincaré tanto  $xp_x$  quanto  $yp_y$ , são praticamente seções de um sistema integrável [30], enquanto que as seções do caso caótico são quase que integralmente caóticas (capítulo 5).

Para o limite de campos mais altos ( $B \approx 1.4$ ), o sistema regular continua regular, enquanto que houve uma certa regularização do caso caótico,

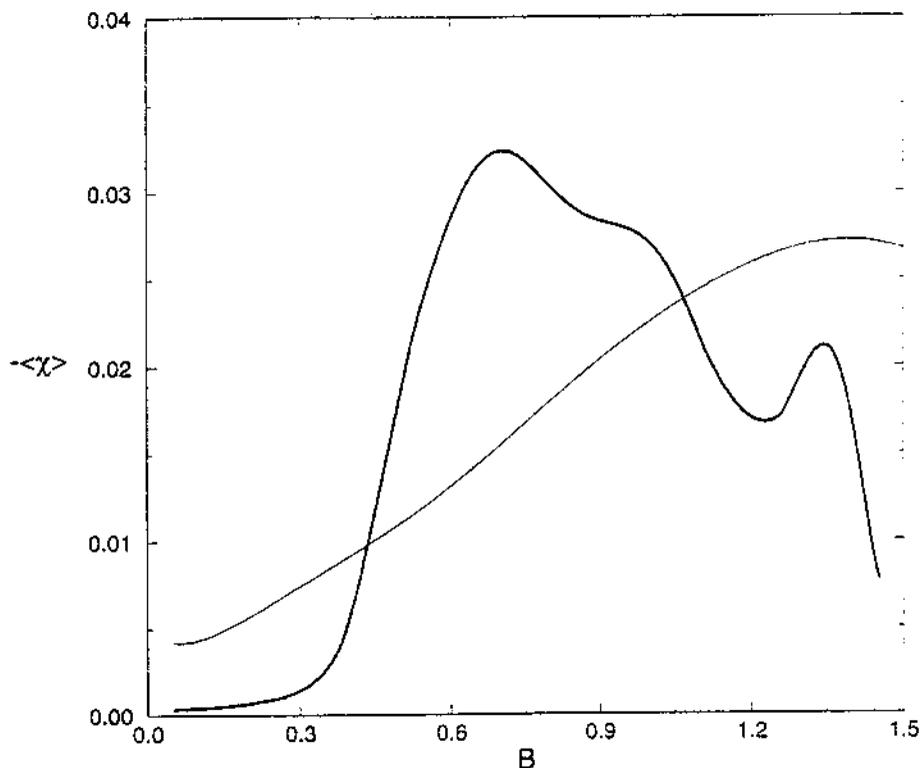


Figure 6.1: Susceptibilidade média para  $P = 30$ . A linha grossa(fina) corresponde ao caso regular(caótico).

mas ainda predomina o caos, de forma que  $\chi_{reg} > \chi_{caot}$  em média.

Para campos intermediários,  $\langle \chi_{caot} \rangle$  é, pelo menos, da mesma ordem que  $\langle \chi_{reg} \rangle$ , devido às bifurcações provocadas pela estabilização das órbitas, como discutido anteriormente. Na verdade, é difícil precisar em que valor de campo começa este processo, uma vez que, apesar da órbita estável contribuir de forma mais aguda, os picos obtidos na densidade oscilante, ou na magnetização e susceptibilidade oscilantes, tem uma certa largura. Outra dificuldade é que a região de campo, onde isto acontece, depende da energia de Fermi, ou a energia do último nível ocupado e nesse caso, aumentando-se a energia de Fermi no potencial Nelson, nós podemos estar alterando também

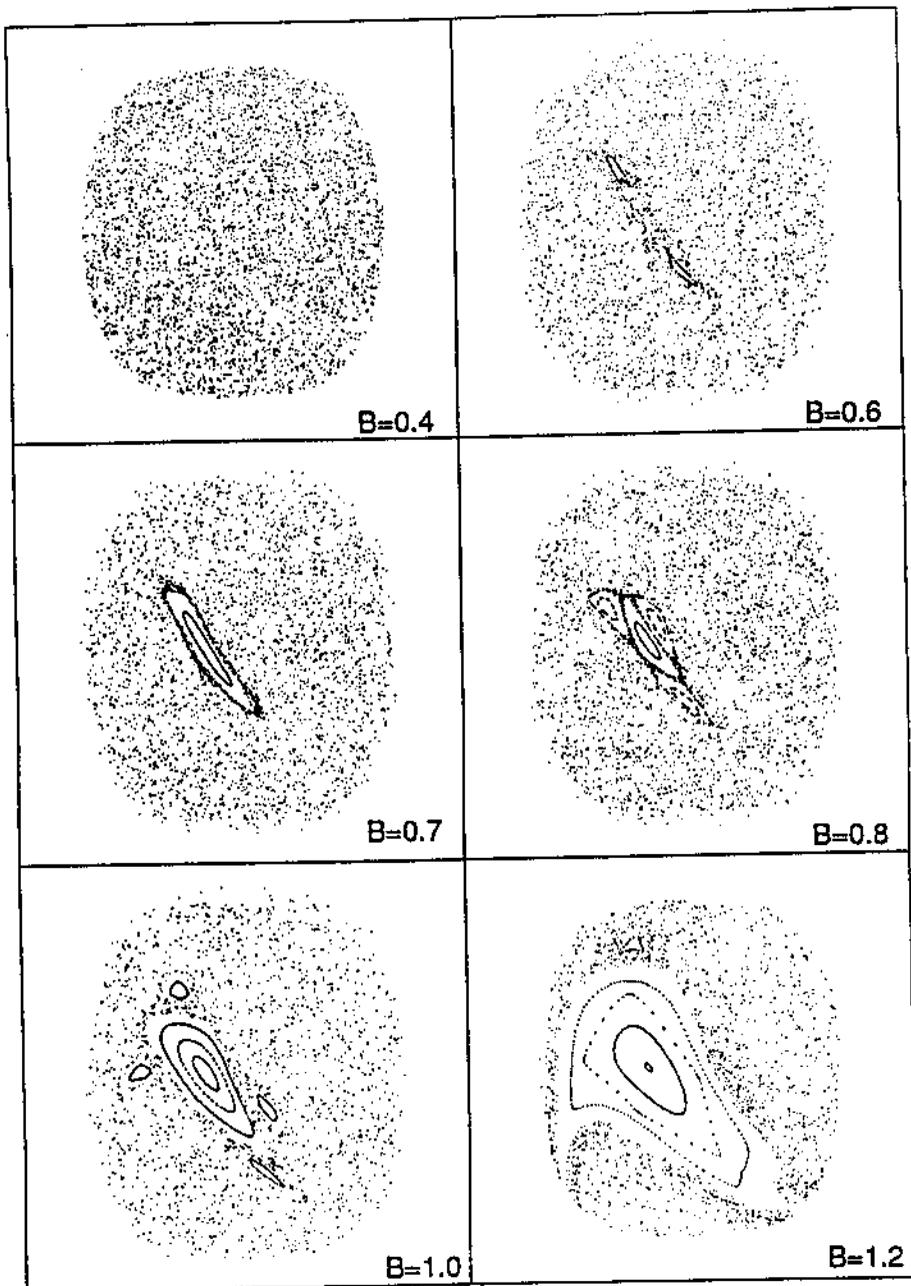


Figure 6.2: Processo de estabilização desencadeado pelo campo. A energia dessas seções ( $xp_x$ ) corresponde à energia do 30º nível caótico.

a sensibilidade do sistema às mudanças no campo.

Em geral, a dependência das órbitas periódicas com o campo é complicada. Isto acaba se refletindo na densidade de estados e conseqüentemente na susceptibilidade. Vamos pensar momentaneamente em um bilhar quadrado de dimensão  $L$  como exemplo. Se o campo é nulo, as órbitas periódicas desse bilhar são formadas por segmentos de retas enquanto que se  $B \neq 0$  as órbitas periódicas tem um raio ciclotrônico  $R_c$  dado por  $R_c = \sqrt{2E}/B$  ( $m = c = e = 1$ ). No limite de campos baixos  $R_c \gg L$  e o campo praticamente não altera a geometria da órbita, enquanto que para campos muito fortes,  $R_c \ll L$ , muitas órbitas não tocam as paredes do bilhar, os autovalores correspondem então a níveis de Landau tendo assim alta degenerescência e a correspondente parte do espaço de fase é de movimento regular. A região crítica fica então para a situação em que o raio ciclotrônico é da ordem da dimensão do bilhar.

Voltando ao Nelson, vemos na fig.(4.1) que aumentando a energia mudamos desproporcionalmente suas dimensões em  $y$ , de forma que a região de campo crítico  $B \geq \sqrt{2E}/L$ <sup>1</sup>, ou seja, onde o sistema tem maior sensibilidade ao campo, depende sensivelmente da energia de Fermi. Assim, além do conhecimento do diagrama  $E \times \tau$  (fig.4.2) um diagrama  $E \times \tau \times B$  poderia ajudar melhor na compreensão da susceptibilidade como função do campo.

Respondida a questão de como seria a susceptibilidade em sistemas com *soft chaos*, fizemos também um estudo das diferenças das médias no ensemble canônico e grand-canônico. Vale também aqui, que a média canônica é não-nula, enquanto que a média grand-canônica é praticamente zero, como podemos ver na figura (6.3), da mesma forma que para correntes persistentes e para a experiência de Lévy et al. Aliás, pelo menos para campos baixos,

---

<sup>1</sup> $L$  corresponderia a alguma dimensão característica do sistema

tudo o que vale para correntes persistentes vale também para a susceptibilidade, exceto pelo fato que esta não é periódica com o campo, pois diferentes órbitas periódicas fecham diferentes áreas. Veremos, então, a seguir, a questão das médias.

### 6.3 A diferença das médias canônica e grand-canônica e a validade dos nossos resultados.

A necessidade de se fazer médias canônicas em sistemas mesoscópicos e as diferenças físicas do ensemble grand-canônico são alguns dos importantes conceitos que emergiram recentemente no contexto de correntes persistentes e nas análises dos resultados experimentais de Lévy et al. Portanto, essas diferenças precisam ser bem entendidas, pois são importantes do ponto de vista experimental.

Assim, seja a magnetização total à temperatura  $T$ :

$$m_T(B) = - \sum_{n=1}^{\infty} g_T(E_n) \frac{\partial E_n}{\partial B} \quad (6.1)$$

onde  $g_T(E_n) = 1/(1 + e^{\beta(E_n - \mu)})$  é a distribuição de Fermi já definida no capítulo 2. A susceptibilidade nada mais é que a derivada da magnetização em relação ao campo  $B$ , de forma que:

$$\chi_T(B) = - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\partial g_T}{\partial E_n} \left[ \frac{\partial E_n}{\partial B} \right]^2 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\partial g_T}{\partial \mu} \frac{\partial \mu}{\partial B} \frac{\partial E_n}{\partial B} - \sum_n g_T \frac{\partial^2 E_n}{\partial B^2}.$$

No ensemble canônico  $\Rightarrow P$  fixo,  $\mu = \mu(B)$  e

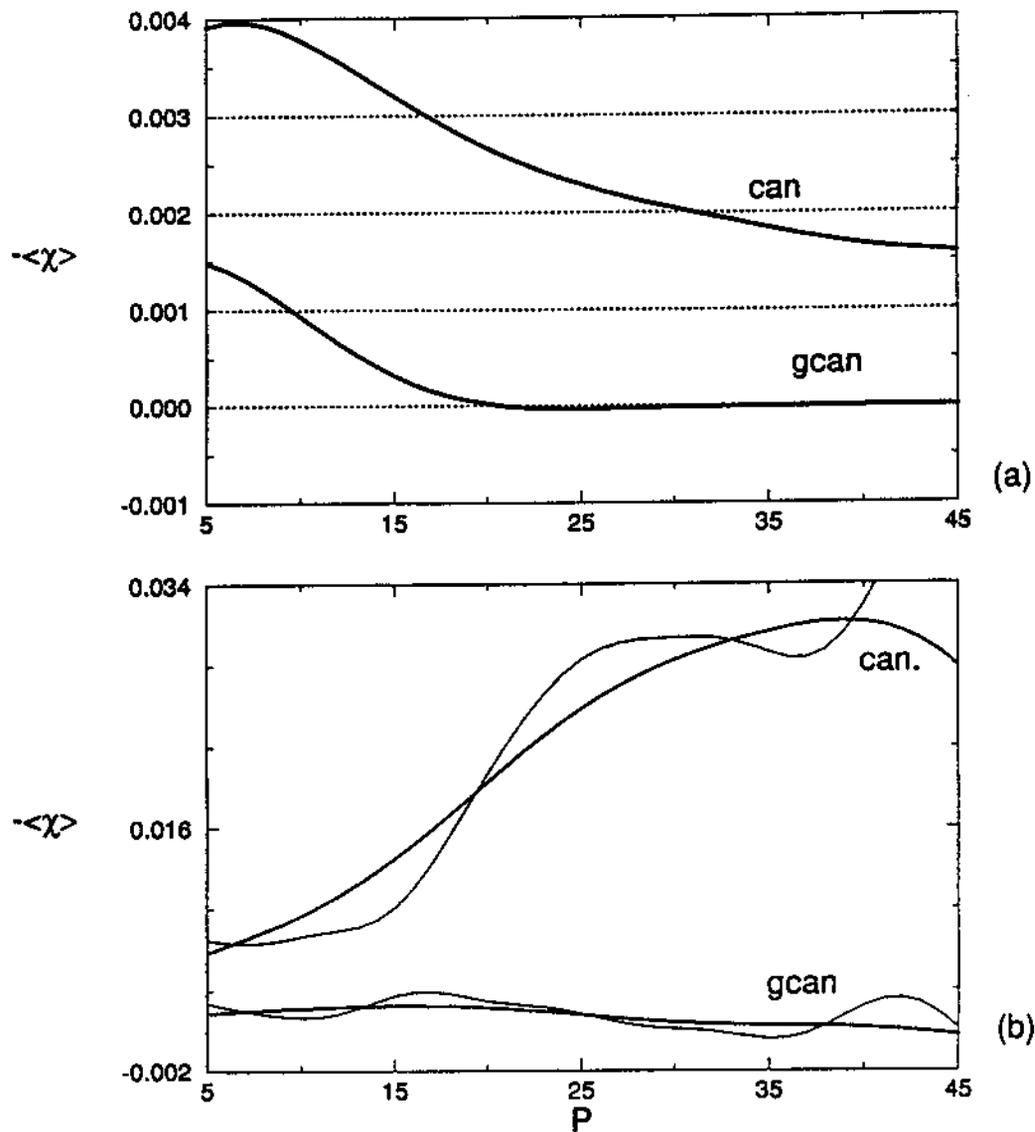


Figure 6.3: Susceptibilidade média canônica e grand-canônica para  $B = 0.0$  e  $B = 0.8$  como função de  $\bar{P}$ . Em (a)  $B = 0.0$  e  $\Delta = 5$  (seção 6.2) e em (b)  $B = 0.8$  com  $\Delta = 2(5)$  linhas grossas(finhas).

$$\chi_T(B) = - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\partial g_T}{\partial E_n} \left[ \frac{\partial E_n}{\partial B} \right]^2 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\partial g_T}{\partial \mu} \frac{\partial \mu}{\partial B} \frac{\partial E_n}{\partial B} - \sum_n g_T \frac{\partial^2 E_n}{\partial B^2}.$$

No ensemble grand-canônico  $\Rightarrow P = P(B)$ ,  $\mu$  constante e

$$\chi_T(B) = - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\partial g_T}{\partial E_n} \left[ \frac{\partial E_n}{\partial B} \right]^2 - \sum_n g_T \frac{\partial^2 E_n}{\partial B^2}.$$

Sendo

$$\frac{\partial g_T}{\partial E_n} = - \frac{\partial g_T}{\partial \mu} = \frac{-\beta}{\cosh^2 \frac{\beta}{2}(E_n - \mu)}.$$

No limite de  $T \rightarrow 0$ , podemos provar que

$$\frac{\beta}{\cosh^2 \frac{\beta}{2}(E_n - \mu)} \rightarrow \delta(E_n - \mu),$$

de forma que nossa susceptibilidade canônica média por partícula, em  $T = 0$ , definitivamente é:

$$\chi_0(B) = - \frac{1}{P} \sum_{n=1}^P g_0 \frac{\partial^2 E_n}{\partial B^2},$$

enquanto que a grand-canônica fica:

$$\chi_0(B) = - \frac{1}{P(B)} \sum_{n=1}^{P(B)} g_0 \frac{\partial^2 E_n}{\partial B^2} + \frac{1}{P(B)} \sum_{n=1}^{P(B)} \delta(E_n - \mu) \left[ \frac{\partial E_n}{\partial B} \right]^2.$$

Existem, portanto, pequenas diferenças na susceptibilidade canônica e grand-canônica à temperatura zero. No ensemble canônico, a variação de  $\mu$  com  $B$  é similar àquela do nível de Fermi e assim a susceptibilidade apresenta picos anômalos em campos onde o *avoided crossing* do nível de Fermi não é

cancelado pelo *avoided crossing* do próximo nível não ocupado. No ensemble grand-canônico, a situação é um pouco diferente, uma vez que  $\mu$  independe do campo, de forma que, para  $T \rightarrow 0$ , os níveis ocupados são aqueles cujas energias estão abaixo de  $\mu$  e, dessa forma, o número de elétrons varia com o campo. Os picos anômalos, acontecem nos valores de campo, em que um particular nível de energia é cortado pelo potencial químico. Sendo assim, a principal diferença está na posição dos picos anômalos, que, como vimos, não são tão importantes em experiências reais.

Vimos então que a susceptibilidade canônica em  $T = 0$  é exatamente a que usamos nos nossos cálculos (capítulo 3) e que, além disso, nossos resultados poderiam corresponder àqueles obtidos em um único quadrado isolado da experiência de Lévy et al se em vez dos quadrados, tivéssemos a forma geométrica do potencial Nelson, de modo que nossos resultados são perfeitamente válidos. Falta ainda esclarecer o fato de que médias canônicas são não-nulas, enquanto que as grand-canônicas são praticamente zero.

O ponto crucial das diferentes médias obtidas no potencial canônico e grand-canônico está no fato de que no primeiro caso  $\mu$  depende de  $B$  de forma que:

$$\mu(B) = \langle \mu \rangle + \delta\mu(B), \quad (6.2)$$

onde  $\langle \mu \rangle$  é o potencial químico médio independente de  $B$ . Para não sobrecarregar a notação, chamamos  $\langle \mu \rangle = \mu_0$ , a susceptibilidade canônica de  $\chi_c$  e a grand-canônica de  $\chi_{gc}$ . A grosso modo, considerando  $\delta\mu \ll \mu$ , podemos escrever:

$$\chi_c(B)_\mu = \chi_{gc}(B)_{\mu_0} + \delta\mu \left( \frac{\partial \chi_{gc}(B)}{\partial B} \right)_{\mu_0}. \quad (6.3)$$

Calculando, então, a média em  $P$  num campo  $\bar{B}$  fixo, vemos que e

$$\langle \chi_c(P)_\mu \rangle = \langle \chi_{gc}(P)_{\mu_0} \rangle + \left\langle \delta\mu \left[ \frac{\partial \chi_{gc}}{\partial B} \right]_{\mu_0} \right\rangle. \quad (6.4)$$

Pode se mostrar [40] que o segundo termo da eq.(6.4) se escreve como

$$\left\langle \delta\mu \left[ \frac{\partial \chi_{gc}}{\partial B} \right]_{\mu_0} \right\rangle = \frac{1}{2\bar{d}(E)} \langle \delta P^2 \rangle,$$

onde  $\delta P$  é a variação do número de partículas com o campo, ocasionada pela imposição do potencial químico fixo e  $\bar{d}(E)$  é a densidade de Weyl definida no capítulo 3. Como ilustrado pela figura (6.3b),  $\chi_{gc}$  oscila como função de  $P$  e sua média tende a se anular. No entanto, fica claro que a média canônica sobrevive, pois é feita sobre a grandeza positiva  $\delta P^2$ .

Podemos agora, uma vez que todos os pontos obscuros foram abordados, finalizar este trabalho. Esse capítulo teve um caráter conclusivo, pois situamos aqui nosso trabalho no contexto das recentes pesquisas que vem sendo feitas nesse tema, melhorando resultados até então estabelecidos. Deixamos, assim, para o último capítulo, intitulado conclusões, um breve resumo dos resultados obtidos e a discussão de outros pontos que são cruciais no desenvolvimento de um trabalho deste tipo e que acabam ficando em segundo plano como, por exemplo, a dificuldade computacional.

# Capítulo 7

## Conclusões

Neste trabalho, estudamos a susceptibilidade e a magnetização diamagnética de um gás de elétrons bidimensional semiclássico dentro do modelo de elétron independente. Resultados de experiências em condutância de microestruturas balísticas induziram pesquisas no sentido de verificar se a susceptibilidade, assim como a condutância, dependeria da dinâmica clássica associada ser integrável ou caótica. O primeiro trabalho nesta linha, foi publicado em 1988 por Nakamura e Thomas que afirmaram que a susceptibilidade caótica deveria ser maior que a regular. Seus resultados foram criticados em 1990 por Németh. Evidentemente, a controvérsia motivou interesses que acabaram sendo renovados com os resultados experimentais de Lévy. As pesquisas feitas em seguida, paralelamente, por Oppen e Agam permitiram a generalização de que a susceptibilidade é maior em estruturas integráveis do que em estruturas completamente caóticas. Ambos estudaram somente o limite de campo muito fraco, isto é, um campo que em termos práticos, não deforma a geometria das órbitas relevantes dessas estruturas. Nesse ínterim, aplicamos nossa Fórmula Semiclássica para um potencial com dinâmica mista, com o objetivo de entender como seria a susceptibilidade nesses casos, já que esses

sistemas são mais genéricos.

O resultado central deste trabalho foi a obtenção da Fórmula Semiclássica da Magnetização. Nós mostramos que a magnetização (e susceptibilidade, decorrentemente) pode ser escrita como um termo médio mais um termo oscilante. A magnetização média é originária das correções do termo de Weyl e, assim sendo, independe da estabilidade das órbitas do correspondente sistema clássico, estando vinculada somente às características gerais do sistema. Em contrapartida, a magnetização oscilante é escrita como uma soma sobre órbitas periódicas, que é essencialmente finita para temperaturas não-nulas, visto que o efeito de uma temperatura finita é de truncar essa soma, fazendo com que somente as órbitas de período mais curto acabem contribuindo.

O principal termo da magnetização e da susceptibilidade média foram obtidos analiticamente no limite de campo nulo.

Vimos também as diferenças da susceptibilidade regular e caótica. No segundo caso, ela oscila mais, porém suavemente, enquanto que a susceptibilidade regular tem um caráter pouco oscilatório e apresenta picos mais anômalos. No entanto, esses picos desaparecem sob a ação da temperatura e, assim sendo, não são tão importantes.

Nós mostramos que, assim como para correntes persistentes, em experiências reais, é necessário no procedimento de médias garantir que o número de elétrons seja fixo, pois médias canônicas e grand-canônicas levam a diferentes resultados físicos.

Outro resultado novo e importante deste trabalho é que não é verdade que estruturas caóticas tenham uma susceptibilidade menor do que aquelas integráveis num intervalo de campo razoável. Vimos que, à medida que aumentamos o campo, tendemos a uma regularização do sistema caótico, que vem acompanhada de uma série de bifurcações. Uma estimativa para esse intervalo pode ser feita se levarmos em conta que os efeitos do campo se tornam importantes quando a razão entre o raio ciclotrônico  $R_c = \sqrt{2E}/B$

( $m = c = e = 1$ ) fica da ordem do tamanho da amostra  $L$ , o que dá  $B \geq \sqrt{2E}/L$ . Este processo, em geral, é complicado. Acontece que as órbitas periódicas que ficam estáveis e suas bifurcadas estáveis, acabam por amplificar a susceptibilidade, de modo que, embora o sistema ainda esteja quase que integralmente caótico, existe uma região de campo, onde a susceptibilidade caótica é em média, pelo menos, da mesma ordem que a susceptibilidade regular.

Primeiramente, para um trabalho deste tipo, o conhecimento da dinâmica clássica é relevante, não só em termos das principais famílias de órbitas periódicas, mas também as bifurcações destas. Em segundo lugar, a região regular e caótica deve ser convenientemente escolhida, de forma a garantir uma dinâmica predominantemente regular no primeiro caso e predominantemente caótica no segundo, uma vez que a energia é um dos parâmetros da transição regular-caótico no sistema usado. O cálculo precisa ser estendido para campos mais altos que aquele de Oppen, pois só isso permite uma generalização dos resultados.

Embora quanticamente o sistema possa ser resolvido com uma certa facilidade, a falta de precisão suficiente nos autovalores pode levar a conclusões desastrosas. A expressão analítica obtida (para o potencial Nelson é possível) para a susceptibilidade em campo nulo, foi nosso melhor teste de precisão. Vamos lembrar que, para obter os autovalores desse sistema, deveríamos a princípio diagonalizar matrizes infinitas, o que obviamente, até agora não é possível, de forma que, em algum momento, truncamos essas matrizes, o que por sua vez afeta a convergência dos autovalores de ordens mais altas. Às custas de matrizes "gigantescas" 2500 X 2500 (pelo menos, para a atual capacidade computacional local), para o caso caótico em campos mais baixos e 1600 X 1600 para campos altos, conseguimos garantir pelo menos 5 casas de precisão em todos os autovalores usados nos nossos cálculos. Conseguir esta

precisão foi uma grande dificuldade, pois para cobrir o intervalo (0.0, 1.5) no campo, diagonalizamos 301 matrizes, sendo que cada uma de 2500, leva em média de 3 a 4 dias e as de 1600 cerca de dois dias, de forma que tempo aqui é pode ser um problema.

Entretanto, dificuldades à parte, sinto uma grande satisfação, com a idéia de terminar esta tese, dizendo que nesse trabalho conseguimos fazer uma conexão de vários campos aparentemente desconectados, diamagnetismo de Landau, correntes persistentes, efeito Hass-van Alphen, efeitos de tamanho em funções termodinâmicas, caologia quântica e propriedades eletrônicas de sistemas com fraca desordem. Com um modelo de elétrons não-interagentes, a análise semiclássica entra naturalmente no problema de resposta magnética de estruturas balísticas. A expressão para a susceptibilidade magnética em termos de trajetórias clássicas é aplicável a várias geometrias, diferentes temperaturas e diferentes intensidades de campo magnético. E, para finalizar de fato, ainda tenho a dizer que minha satisfação ainda é maior, quando penso em trabalhos que esses resultados podem conduzir. Experimentalmente, seria interessante observar esse efeito das bifurcações, por exemplo, em estruturas quadradas. Parâmetros como a intensidade do campo ou a densidade de partículas teriam que ser variados, a ponto de se observar bifurcações. O terceiro parâmetro a ser variado, poderia ser o a dimensão do quadrado, mas, isso poderia levar a inevitáveis dificuldades experimentais para a adequação do modelo. Evidentemente, poderíamos pensar em outra geometria, mas para o quadrado, as órbitas periódicas mais curtas e suas grandezas clássicas como ação e período, que aparecem na expressão semiclássica, podem ser calculadas analiticamente. Isso abriria caminho para uma futura investigação da influência de bifurcações de órbitas clássicas na teoria semiclássica de estatística de níveis de energia quântico, que é, por si só, uma questão relevante.

# Apêndice A

## Obtenção da magnetização oscilante.

Como vimos na seção 3.2.2, das equações

$$m_T = \frac{1}{P} \int_0^\infty g(E) \frac{\partial N}{\partial B} dE,$$

e

$$N^{osc}(E, B) = \frac{1}{\pi} \sum_p \sum_{j=1}^\infty \frac{A_{p,j}}{j} \sin \left( j \frac{S_p}{\hbar} - \frac{\pi}{2} \sigma_{p,j} \right)$$

podemos obter a magnetização oscilante por partícula

$$m_T^{osc} = \sum_p \sum_{j=1}^\infty \frac{1}{\pi \hbar P} \int_0^\infty \frac{1}{1 + z^{-1} e^{\beta E}} a_{p,j} A_{p,j} \cos \left( j \frac{S_p}{\hbar} - \frac{\pi}{2} \sigma_{p,j} \right) dE, \quad (\text{A.1})$$

onde  $g_T = \frac{1}{1 + z^{-1} e^{\beta E}}$  é a distribuição de Fermi,

$z^{-1} = e^{\beta \mu}$  onde  $\mu$  o potencial químico e

$a_p = \frac{\partial S_p}{\partial B}$  onde  $S_p$  é a ação da órbita periódica primitiva  $p$  e o índice  $j$  leva em conta suas repetições.

Vamos assumir que  $K_{BT} \ll E_f$  (ou equivalentemente  $\beta \gg 1/E_f$ ) e assim podemos calcular a integral (A.1) no limite semiclássico.

Seja então:

$$\mathcal{I} = + \int_0^\infty \frac{1}{1 + z^{-1} e^{\beta E}} a_{p,j} A_{p,j} \cos\left(j \frac{S_p}{\hbar}\right) dE, \text{ se } \frac{\sigma_{pj}}{2} \text{ é par}$$

$$\mathcal{I} = - \int_0^\infty \frac{1}{1 + z^{-1} e^{\beta E}} a_{p,j} A_{p,j} \cos\left(j \frac{S_p}{\hbar}\right) dE, \text{ se } \frac{\sigma_{pj}}{2} \text{ é ímpar}$$

de forma que

$$m_T^{osc} = \frac{1}{\pi \hbar P} \sum_p \sum_{j=1}^\infty \mathcal{I}$$

Esquecendo por um momento o sinal de  $\mathcal{I}$  podemos escrever

$$\mathcal{I} = \text{Re} \left[ \int_0^\infty \frac{1}{1 + z^{-1} e^{\beta E}} a_{p,j} A_{p,j} e^{ij \frac{S_p}{\hbar}} dE \right].$$

No limite de  $\beta \gg 1/E_f$  vemos que as maiores contribuições ocorrem perto de  $E = E_f$  e podemos expandir a ação  $S_p$  em torno da energia de Fermi  $E_f$  e fazendo  $\mu \rightarrow E_f$ , de forma que

$$S_p(E) \approx S_p(E_f) + \underbrace{\frac{\partial S_p}{\partial E} \Big|_{E=E_f}}_{\tau(E_f)} \underbrace{(E - E_f)}_{\Delta E}.$$

Obtemos assim,

$$\mathcal{I} \approx a_{p,j}(E_f) A_{p,j}(E_f) \underbrace{\text{Re} \left[ e^{ij S(E_f)/\hbar} \int_{-\infty}^\infty \frac{1}{1 + e^{\beta \Delta E}} e^{ij \frac{\tau_p(E_f)}{\hbar} \Delta E} \Delta E \right]}_{\mathcal{I}'},$$

a integral  $\mathcal{I}'$  é complexa e tem pólos simples em

$$\beta \Delta E = (2n + 1)\pi i,$$

de forma que

$$\mathcal{I} = 2\pi i \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\beta} e^{i \frac{j\tau_p(E_f)}{\hbar} (2n+1) \frac{\pi i}{\beta}}$$

$$\mathcal{I} = \frac{2\pi i}{\beta} \frac{e^{-\frac{j\tau_p}{\beta\hbar}\pi}}{1 - e^{-2j\tau_p\pi/\beta\hbar}},$$

Assim a integral  $\mathcal{I}$  fica simplesmente,

$$\mathcal{I} \approx \frac{2\pi}{\beta} a_{p,j}(E_f) A_{p,j}(E_f) \sin\left(j \frac{S_p(E_f)}{\hbar}\right) \frac{e^{-\frac{j\tau_p}{\beta\hbar}\pi}}{1 - e^{-2j\tau_p\pi/\beta\hbar}}.$$

Voltemos a considerar os sinais de  $\mathcal{I}$ . Para tal basta incorporarmos novamente o índice de Maslov  $\sigma_{pj}$  no argumento do seno na expressão acima de forma que finalmente escrevemos a magnetização oscilante como

$$m_T^{osc} \approx \frac{2}{P\hbar\beta} \sum_p \sum_{n=1}^{\infty} A_{p,j}(E_f) a_{p,j}(E_f) \sin\left(j \frac{S_p(E_f)}{\hbar} - \frac{\pi}{2} j \sigma_p(E_f)\right) \times \\ \times \frac{\exp(-\pi\tau_{p,j}(E_f)/(\hbar\beta))}{[1 - \exp(-2\pi\tau_{p,j}(E_f)/(\hbar\beta))]}.$$

Esta é eq.(3.40). Como podemos ver, no limite de temperaturas muito baixas, todas as grandezas são calculadas na energia de Fermi.

# Apêndice B

## Base que diagonaliza o oscilador com campo aplicada ao potencial Nelson.

Seja a Hamiltoniana do oscilador harmônico bidimensional com campo magnético total  $B = \beta_1 + \beta_2$

$$H = \frac{1}{2}(p_x + \beta_1 y)^2 + \frac{1}{2}(p_y - \beta_2 x)^2 + \frac{\varphi_1^2 x^2}{2} + \frac{\varphi_2^2 y^2}{2}. \quad (\text{B.1})$$

Fazemos a seguinte mudança de variáveis:

$$\begin{aligned} P_x &= p_x \frac{\sqrt{\omega}}{(\varphi_1^2 + \beta_2^2)^{1/4}} \\ X &= x \frac{(\varphi_1^2 + \beta_2^2)^{1/4}}{\sqrt{\omega}} \\ P_y &= p_y \frac{\sqrt{\omega}}{(\varphi_2^2 + \beta_1^2)^{1/4}} \\ Y &= y \frac{(\varphi_2^2 + \beta_1^2)^{1/4}}{\sqrt{\omega}} \end{aligned}$$

Fazendo  $\omega = 1$ ,  $b = \varphi_2/\varphi_1$  e  $c = B\sqrt{b}/\sqrt{B^2 + (\varphi_1 + \varphi_2)^2}$ , a Hamiltoniana (B.1) nas variáveis novas pode ser escrita como

$$H = \frac{\varphi_1}{\varphi_1 + \varphi_2} \sqrt{B^2 + (\varphi_1 + \varphi_2)^2} \left\{ \frac{1}{2} P_x^2 + \frac{1}{2} X^2 b \left( \frac{P_y^2}{2} + \frac{1}{2} Y^2 \right) - c(XP_y - YP_x) \right\}. \quad (\text{B.2})$$

Podemos fazer uma segunda transformação de variáveis tal que

$$\begin{aligned} X &= \frac{(2\lambda^- - 1)}{2A_+c(\lambda^- - \lambda^+)} x + \frac{(1 - 2\lambda^+)}{2A_-c(\lambda^- - \lambda^+)} p_y \\ Y &= \frac{(b - 2\lambda^+)}{2B_-c(\lambda^- - \lambda^+)} y + \frac{(2\lambda^- - b)}{2B_+c(\lambda^- - \lambda^+)} p_x \\ P_x &= \frac{1}{2B_-(\lambda^- - \lambda^+)} y - \frac{1}{2B_+(\lambda^- - \lambda^+)} p_x \\ P_y &= \frac{1}{2A_+(\lambda^- - \lambda^+)} x - \frac{1}{2A_-(\lambda^- - \lambda^+)} p_y \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

onde

$$\begin{aligned} \lambda^\pm &= \frac{b+1}{4} \pm \frac{1}{4} \sqrt{(b-1)^2 + 4c^2} \\ A_\pm &= \frac{1}{\sqrt{c^2 + (1 - 2\lambda^\pm)^2}} \\ B_\pm &= \frac{1}{\sqrt{c^2 + (b - 2\lambda^\pm)^2}} \end{aligned}$$

e dessa forma obtemos

$$\begin{aligned} H &= \frac{\varphi_1^3}{(\varphi_1 + \varphi_2)^3} \frac{\sqrt{(B^2 + (\varphi_1 + \varphi_2)^2)^3}}{[B^2 + (\varphi_1 - \varphi_2)^2]} \times \\ &\times \left\{ \frac{1}{2B_+^2} \left[ 1 + \frac{b}{c^2} (2\lambda^- - b)^2 - 2(2\lambda^- - b) \right] p_x^2 + \frac{1}{2A_+^2} \left[ b + \frac{(2\lambda^- - 1)^2}{c^2} - 2(2\lambda^- - 1) \right] x^2 + \right. \end{aligned}$$

$$+ \frac{1}{2A_-^2} \left[ b + \frac{(1-2\lambda^+)^2}{c^2} + 2(1-2\lambda^+) \right] p_y^2 + \frac{1}{2B_-^2} \left[ 1 + b \frac{(b-2\lambda^+)^2}{c^2} + 2(b-2\lambda^+) \right] y^2 \left. \vphantom{\frac{1}{2A_-^2}} \right\} \quad (\text{B.4})$$

Substituindo-se  $A_{\pm}$ ,  $B_{\pm}$ ,  $b$  e  $c$  em termos de  $\varphi_1$  e  $\varphi_2$  e denominando

$$\omega_1 = \frac{1}{2} \left( \sqrt{B^2 + (\varphi_1 + \varphi_2)^2} + \sqrt{B^2 + (\varphi_1 - \varphi_2)^2} \right)$$

$$\omega_2 = \frac{1}{2} \left( \sqrt{B^2 + (\varphi_1 + \varphi_2)^2} - \sqrt{B^2 + (\varphi_1 - \varphi_2)^2} \right).$$

a Hamiltoniana final do oscilador fica simplesmente

$$H = \frac{1}{2m_1} p_x^2 + \frac{1}{2} m_1 \omega_1^2 x^2 + \frac{1}{2m_2} p_y^2 + \frac{1}{2} m_2 \omega_2^2 y^2,$$

para  $m_1 = 1/2T_1$  e  $m_2 = 1/2T_2$  sendo  $T_1$  o coeficiente de  $p_x^2$  e  $T_2$  o coeficiente de  $p_y^2$  da eq.(B.4).

Repetimos o mesmo procedimento para o potencial Nelson definido por

$$H = \frac{1}{2} (p_x + \beta_1 y)^2 + \frac{1}{2} (p_y - \beta_2 x)^2 + \left( y - \frac{x^2}{2} \right)^2 + \mu \frac{x^2}{2},$$

sendo nesse caso  $\varphi_1 = \sqrt{\mu}$  e  $\varphi_2 = \sqrt{2}$ . Substituímos então as variáveis  $(x, y, p_x, p_y)$  pelas novas  $(X, Y, P_x, P_y)$ , obtendo

$$H = H^{\text{oscilador}} + \frac{\varphi_1}{\varphi_1 + \varphi_2} \sqrt{B^2 + (\varphi_1 + \varphi_2)^2} \left( \frac{\sqrt{b}}{b} d^{5/4} X^2 Y + d^{3/2} \frac{X^4}{4} \right),$$

onde  $d = c^2/(bB^2)$  para  $b$  e  $c$  definidos anteriormente para o oscilador. Portanto, analogamente ao procedimento usado para o oscilador, fazemos uma segunda mudança de variável eq.(B.3) obtendo:

$$H = H^{\text{oscilador}} + \frac{\varphi_1^3}{(\varphi_1 + \varphi_2)^3} \frac{\sqrt{(B^2 + (\varphi_1 + \varphi_2)^2)^3}}{[B^2 + (\varphi_1 - \varphi_2)^2]} \times$$

$$\begin{aligned}
& \left\{ -\frac{\sqrt{bd^{5/4}}}{2B_-A_+^2bc^3(\lambda^- - \lambda^+)}(b - 2\lambda^+)(2\lambda^- - 1)^2x^2y + \right. \\
& -\frac{\sqrt{bd^{5/4}}}{2B_-A_+A_-bc^3(\lambda^- - \lambda^+)}2(b - 2\lambda^+)(2\lambda^- - 1)(1 - 2\lambda^+)xyp_y + \\
& -\frac{\sqrt{bd^{5/4}}}{2B_-A_-^2bc^3(\lambda^- - \lambda^+)}(b - 2\lambda^+)(1 - 2\lambda^+)^2yp_y^2 + \\
& -\frac{\sqrt{bd^{5/4}}}{2B_+A_+^2bc^3(\lambda^- - \lambda^+)}(2\lambda^- - b)(2\lambda^- - 1)^2x^2p_x + \\
& -\frac{\sqrt{bd^{5/4}}}{2B_+A_+A_-bc^3(\lambda^- - \lambda^+)}2(2\lambda^- - b)(2\lambda^- - 1)(1 - 2\lambda^+)xp_xp_y + \\
& -\frac{\sqrt{bd^{5/4}}}{2B_+A_-^2bc^3(\lambda^- - \lambda^+)}(2\lambda^- - b)(1 - 2\lambda^+)^2p_xp_y^2 + \\
& +\frac{d^{3/2}}{16A_+^4c^4(\lambda^- - \lambda^+)^2}(2\lambda^- - 1)^4x^4 + \\
& +\frac{d^{3/2}}{16A_+^3A_-c^4(\lambda^- - \lambda^+)^2}4(2\lambda^- - 1)^3(1 - 2\lambda^+)x^3p_y + \\
& +\frac{d^{3/2}}{16A_+^2A_-^2c^4(\lambda^- - \lambda^+)^2}6(2\lambda^- - 1)^2(1 - 2\lambda^+)^2x^2p_y^2 + \\
& +\frac{d^{3/2}}{16A_+A_-^3c^4(\lambda^- - \lambda^+)^2}4(2\lambda^- - 1)(1 - 2\lambda^+)^3xp_y^3 + \\
& \left. +\frac{d^{3/2}}{16A_-^4c^4(\lambda^- - \lambda^+)^2}(1 - 2\lambda^+)^4p_y^4 \right\}.
\end{aligned}$$

Apesar da Hamiltoniana final obtida não ter uma aparência mais simples que a Hamiltoniana do Nelson original, ela tem a vantagem de garantir para campos altos, uma convergência melhor dos autovalores de energia.

# Apêndice C

## Correções para o termo médio da função escada espectral do potencial Nelson.

Vimos no capítulo 3 que a magnetização (ou susceptibilidade) pode ser escrita como uma soma de um termo médio (originário do termo médio da função escada  $\bar{N}(E)$ ) e um termo oscilante (originário do termo oscilante da função escada  $N^{osc}(E)$ ). Neste apêndice obteremos analiticamente  $\bar{N}(E)$  para o potencial Nelson

$$H = \frac{1}{2}p_x^2 + \frac{1}{2}p_y^2 + \left(y - \frac{x^2}{2}\right)^2 + \mu \frac{x^2}{2}, \quad (\text{C.1})$$

como uma série em potências de  $\hbar$ . Definimos primeiramente a densidade de níveis como sendo

$$\begin{aligned} d(E) &= \sum_i \delta(E - E_i) \\ &= \text{Tr}(\delta(E - \hat{H})) \end{aligned}$$

e a função escada  $N(E)$ ,

$$\begin{aligned} N(E) &= \sum_i \Theta(E - E_i) \\ &= \text{Tr}(\Theta(E - \hat{H})) \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

onde  $\Theta$  é a função degrau de Heavyside. A função escada dá o número de níveis de energia com energia abaixo de  $E$  e nada mais é que a função densidade  $d(E)$  integrada até a energia  $E$ .

Para uma primeira estimativa de  $\bar{N}(E)$  usamos a lei de Weyl [3], que estabelece que cada estado quântico ocupa um volume  $(2\pi\hbar)^n$  no espaço de fase, sendo  $n$  a dimensão do espaço de coordenadas, de forma que

$$\bar{N}(E) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int dqdp \Theta(E - H(q, p))$$

Sendo então para o potencial Nelson sem campo,

$$\bar{N}(E) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int dqdp \Theta \left( E - \frac{p_x^2}{2} - \frac{p_y^2}{2} - \frac{\mu}{2} x^2 - \left( y - \frac{x^2}{2} \right)^2 \right).$$

Podemos fazer as seguintes transformações

$$\begin{aligned} x &= \sqrt{\frac{2}{\mu}} z_1 \\ y - \frac{x^2}{2} &= z_2 \\ p_x &= \sqrt{2} z_3 \\ p_y &= \sqrt{2} z_4, \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

de forma que o volume no espaço de fase torna-se

$$dx dy dp_x dp_y = 2 \sqrt{\frac{2}{\mu}} dz_1 dz_2 dz_3 dz_4$$

e obtemos dessa forma

$$\overline{N}(E) = 2\sqrt{\frac{2}{\mu}} \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int dqdp \Theta(E - z_1^2 - z_2^2 - z_3^2 - z_4^2)$$

A integral nada mais é que o volume de uma esfera quadridimensional de forma que

$$\overline{N}(E) = \frac{1}{2\sqrt{2\mu}} \frac{E^2}{\hbar^2}. \quad (\text{C.4})$$

Este resultado é preciso para  $\hbar$  muito pequeno. Entretanto dado que o valor de  $\hbar$  usualmente não é infinitesimal, torna-se necessário obter as correções para  $\overline{N}(E)$ .

Podemos obter também a função escada média considerando o traço do operador evolução. Denotando o traço do operador evolução  $\hat{U}(t)$  por  $Z(\beta)$  temos

$$\begin{aligned} Z(\beta) &= \text{Tr}(\hat{U}(t)) \\ &= \text{Tr}(e^{-\beta\hat{H}}) \\ &= \sum_i e^{-\beta E_i} \end{aligned}$$

onde  $\beta = it/\hbar$ . A função escada média é obtida tomando-se a transformada de Fourier inversa de  $Z(\beta)/\beta$ .

Usaremos o formalismo de Weyl para calcular o traço do operador evolução  $\exp(-\beta\hat{H})$  de forma que

$$Z(\beta) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int dqdp [e^{-\beta\hat{H}}]_W.$$

## C.1 A representação de Weyl

Em um sistema com dois graus de liberdade a representação de Wigner de um operador  $\hat{A}$  é dada por

$$[\hat{A}]_W = \int dy \left\langle q + \frac{y}{2} | \hat{A} | q - \frac{y}{2} \right\rangle e^{-ipy/\hbar}.$$

Usaremos a notação  $A_W$  em vez de  $[\hat{A}]_W$ . As variáveis  $\mathbf{q}$  e  $\mathbf{p}$  podem ser interpretadas como descrevendo um espaço de fase quântico.

Algumas propriedades da representação de Weyl são [23]:

$$\begin{aligned} Tr(\hat{A}) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int dqdp [\hat{A}]_W \\ Tr(\hat{A}\hat{B}) &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int dqdp [\hat{A}]_W [\hat{B}]_W \\ [\hat{A}\hat{B}] &= [\hat{A}]_W \overleftrightarrow{\Lambda} [\hat{B}]_W \end{aligned}$$

onde  $\overleftrightarrow{\Lambda}$  é o Bracket de Moyal definido por

$$\overleftrightarrow{\Lambda} = \overleftarrow{\nabla}_q \overrightarrow{\nabla}_p - \overleftarrow{\nabla}_p \overrightarrow{\nabla}_q.$$

Usamos as propriedades acima da representação de Wigner de um operador para obter uma equação para o operador evolução temporal nesta representação:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \beta} [e^{-\beta \hat{H}}]_W &= [\hat{H} e^{-\beta \hat{H}}]_W \\ &= [\hat{H}]_W \cos \frac{\hbar \overleftrightarrow{\Lambda}}{2} [e^{-\beta \hat{H}}]_W. \end{aligned} \quad (C.5)$$

Uma solução em série de potências em  $\hbar$  pode ser tentada usando-se o *ansatz*

$$[e^{-\beta \hat{H}}]_W = e^{-\beta H_W} \sum_{n=0}^{\infty} \left( -\frac{\hbar^2}{4} \right)^n \frac{1}{(2n)!} A_n(\mathbf{q}, \mathbf{p}, \beta) \quad (C.6)$$

Substitui-se a eq.(C.6) em (C.5) e exige-se que a equação tenha uma solução para cada potência de  $\hbar$ , obtendo-se a seguinte equação diferencial para  $A_n(\mathbf{q}, \mathbf{p}, \beta)$ ,

$$\left[ e^{-\beta \hat{H}} \right]_W = e^{-\beta H_W} \left\{ 1 - \frac{\hbar^2}{8} A_1(\mathbf{q}, \mathbf{p}, \beta) + \frac{\hbar^4}{384} A_2(\mathbf{q}, \mathbf{p}, \beta) + \mathcal{O}(\hbar^6) \right\}$$

com

$$\begin{aligned} -\frac{\partial A_1}{\partial \beta} &= e^{\beta H_W} \left[ H_W \overleftrightarrow{\Lambda}^2 e^{-\beta H_W} \right] \\ -\frac{\partial A_2}{\partial \beta} &= e^{\beta H_W} \left\{ \left[ H_W \overleftrightarrow{\Lambda}^4 e^{-\beta H_W} \right] + 6 \left[ H_W \overleftrightarrow{\Lambda}^2 e^{-\beta H_W} A_1 \right] \right\}. \end{aligned}$$

Incluiremos somente as correções de ordem  $\hbar^2$  para a densidade de Thomas-Fermi e negligenciaremos os termos de  $\mathcal{O}(\hbar^4)$ .

Para Hamiltonianas da forma

$$H(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2} + V(\mathbf{q})$$

Wigner [41] mostrou que

$$A_1(\mathbf{q}, \mathbf{p}, \beta) = \beta^2 \nabla^2 V(\mathbf{q}) - \frac{\beta^3}{3} [\nabla V(\mathbf{q}) \nabla V(\mathbf{q}) - (\mathbf{p} \cdot \nabla)^2 V(\mathbf{q})]. \quad (\text{C.7})$$

Para o potencial Nelson (C.1) obtemos

$$\begin{aligned} A_1(x, y, p_x, p_y) &= \beta^2 \left[ (\mu + 2) + 2x^2 - 2\left(y - \frac{x^2}{2}\right) \right] \\ &\quad - \frac{\beta^3}{3} \left\{ 2p_y^2 - 4p_x p_y x + p_x^2 \left[ \mu + 2x^2 - 2\left(y - \frac{x^2}{2}\right) \right] \right. \\ &\quad \left. + x^2 \left[ \mu^2 - 4\mu\left(y - \frac{x^2}{2}\right) + 4\mu\left(y - \frac{x^2}{2}\right)^2 \right] + 4\left(y - \frac{x^2}{2}\right)^2 \right\} \end{aligned}$$

Usando as coordenadas  $z$ 's da eq.(C.3) obtemos

$$Z(\beta) = 2\sqrt{\frac{2}{\mu}} \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int dz_1 dz_2 dz_3 dz_4 e^{-\beta[z_1^2+z_2^2+z_3^2+z_4^2]} \left\{ 1 - \frac{\hbar^2}{8} \left[ \beta^2 \left( (\mu+2) + \frac{4z_1^2}{\mu} - 2z_2 \right) - \frac{\beta^3}{3} \left[ 4z_4^2 + 2z_3^2 \left( \mu + \frac{4z_1^2}{\mu} \right) + \frac{2z_1^2}{\mu} (\mu^2 + 4z_2^2) + 4z_2^2 \right] \right] \right\}$$

que simplifica-se para

$$Z(\beta) = \sqrt{\frac{\mu}{2}} \frac{1}{2\hbar^2} \left( \frac{1}{\beta^2} - \frac{\hbar^2}{24} \left[ (\mu+2) + \frac{2}{\beta\mu} \right] \right).$$

Tomando-se a transformada de Fourier inversa de  $Z(\beta)/\beta$  obtemos:

$$\bar{N}(E) = \frac{1}{2\sqrt{2\mu}} \frac{E^2}{\hbar^2} \left( 1 - \frac{\hbar^2}{12} \left[ \frac{\mu-2}{E^2} + \frac{2}{\mu E} \right] + \mathcal{O}(\hbar^4) \right) \quad (\text{C.8})$$

Note que o primeiro termo é o termo de Thomas-Fermi dado em na eq.(C.4). Colocamos agora um campo magnético tal que

$$H = \frac{1}{2} \left( p_x + \frac{B}{2} y \right)^2 + \frac{1}{2} \left( p_y - \frac{B}{2} x \right)^2 + \left( y - \frac{x^2}{2} \right)^2 + \mu \frac{x^2}{2},$$

Naturalmente, os resultados obtidos para a Hamiltoniana do Nelson sem o campo continuam valendo, só que agora precisamos calcular os novos termos decorrentes da inclusão do campo em (C.1). E assim, calculamos  $\Delta A_1$  e  $\Delta Z(\beta)/\beta$ , ou seja a correção a  $A_1$  e  $Z(\beta)/\beta$  devida ao campo, obtendo

$$-\Delta A_1 = \frac{2B^2\beta^3}{3} [z_3^2 + z_4^2] - B^2\beta^2 + \frac{4}{3}B\beta^3 \left[ \sqrt{2}z_3z_2 + \frac{2}{\sqrt{\mu}}z_1z_2z_4 - \sqrt{\mu}z_1z_4 \right]$$

onde fizemos novamente o uso das variáveis  $(z_1, z_2, z_3, z_4)$  definidas anteriormente. Calculado então  $\Delta A_1$  obtemos

$$\frac{\Delta Z(\beta)}{\beta} = -\frac{1}{48\beta} \sqrt{\frac{2}{\mu}} B^2.$$

Fazemos a transformada de Fourier inversa de  $\Delta Z/\beta$  para obter

$$\Delta \bar{N}(E, B) = -\frac{1}{48} \sqrt{\frac{2}{\mu}} B^2,$$

de forma que obtemos finalmente

$$\bar{N}(E) = \frac{1}{2\sqrt{2\mu}} \frac{E^2}{\hbar^2} - \frac{2E}{24\mu\sqrt{2\mu}} - \frac{\mu + 2 + \mathbf{B}^2}{24\sqrt{2\mu}} + \mathcal{O}(\hbar^4).$$

Podemos desprezar o segundo termo à direita em relação ao primeiro (muito maior  $\mathcal{O}(\hbar^{-2})$ ), ficando com

$$\bar{N}(E) = \frac{1}{2\sqrt{2\mu}} \frac{E^2}{\hbar^2} - \frac{\mu + 2 + \mathbf{B}^2}{24\sqrt{2\mu}} + \mathcal{O}(\hbar^4) \quad (\text{C.9})$$

recuperando assim,  $\bar{N}(E)$  do oscilador [eq.(3.36)]. Para o oscilador o resultado (3.36) é exato, enquanto que para o potencial Nelson a eq.(C.9) só é válida no limite de campo nulo.

# Bibliografia

- [1] M. C. Gutzwiller. *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*. Springer-Verlag - New York, 1990.
- [2] M. V. Berry. *Les Houches*. North-Holland, 1981 Session XXXVI Course 3.
- [3] A. M. Ozorio de Almeida. *Hamiltonian Systems: Chaos and Quantization*. Cambridge University Press, 1988.
- [4] K. Nakamura and H. Thomas. *Phys. Rev. Lett.*, (61):247–250, 1988.
- [5] Oded Agam. *J. Phys. (France)*, (4):697–730, 1994.
- [6] R. A. Jalabert, H. U. Baranger, and A. D. Stone. *Phys. Rev. Lett.*, (65):2442, 1990.
- [7] C. M. Marcus, A. J. Rimberg, R. M. Westervelt, P. F. Hopkins, and A. C. Gossard. *Phys. Rev. Lett.*, (69):506, 1992.
- [8] R. Németh. *Z. Phys. B*, (81):89–93, 1990.
- [9] Felix von Oppen. *Phys. Rev. B*, (50):17151, 1994.
- [10] B. Mühschlegel. *Les Houches*. North-Holland, ANO 1989 Course 11 Session LII.

- [11] R. K. Pathria. *Statistical Mechanics*. Pergamon Press, capítulo 8, 1972.
- [12] N. W. Ashcroft. *Solid State Physics*. capítulo 2, 1976.
- [13] R. E. Peierls. *Quantum Theory of Solids*. Oxford, capítulo 7, 1955.
- [14] M. C. Gutzwiller. *J. Math. Phys.*, (12):243, 1971.
- [15] S. D. Prado, M. A. M. de Aguiar, J. P. Keating, and R. Eglydio de Carvalho. *J. Phys. A*, (27):6091–6105, 1994.
- [16] A. M. Ozorio de Almeida and J. H. Hannay. *J. Phys. A*, (20):5873, 1987.
- [17] L. P. Lévy, D. H. Reich, L. P. Pfeiffer, and K. West. *Phys. B.*, (189):204, 1993.
- [18] L. Landau. *Z. Phys.*, (64):629, 1930.
- [19] H. Bouchiat and G. Montambaux. *J. Phys. (France)*, (50):2695–707, 1989.
- [20] M. V. Berry. *Les Houches*. North-Holland, ANO 1989 Course 4 Session LII.
- [21] N. G. Cooper. *From Cardinals to Chaos: Reflections on the Life and Legacy of Stanislaw Ulam*. Cambridge University Press, pag. 311, 1989.
- [22] E. J. Heller and S. Tomsovic. *Phys. Today*, (julho), 1993.
- [23] M. Hillery, R. F. O'Connell, and E. P. Wigner. *Phys. Rep.*, (106):121, 1984.
- [24] D. Wintgen. *Phys. Rev. Lett.*, (61):1803, 1988.

- [25] C. P. Malta, M. A. M. de Aguiar, and A. M. Ozorio de Almeida. *Phys. Rev.*, (A47):1625, 1993.
- [26] M. V. Berry and J. P. Keating. *Proc. R. Soc.*, (A437):151–73, 1992.
- [27] M. Robnik and M. V. Berry. *J. Phys. A*, (18):1361–78, 1985.
- [28] *Chaos: Surprises in a new world of physics*. Princeton University Press, 1979.
- M. Baranger and K. T. R. Davies. *Annals of Phys.*, (177):330–59, 1987. [29]
- S. D. Prado and M. A. M. de Aguiar. *Annals of Phys.*, (231):290–310, 1994. [30]
- D. Provost and M. Baranger. *Phys. Rev. Lett.*, (71):66, 1993. [31]
- M. A. M. de Aguiar, C. P. Malta, M. Baranger, and K. T. R. Davies. *Annals of Phys.*, (180):167–205, 1987. [32]
- M. A. M. de Aguiar and C. P. Malta. *Phys. D*, (30):413–24, 1988. [33]
- A. M. Ozorio de Almeida and M. A. M. de Aguiar. *Physica D*, (41):391–402, 1990. [34]
- D. Provost. *PhD thesis*. Cambridge, MA: MIT, 1992. [35]
- R. A. Marcus. Nonlinear dynamics. *Ann. N. Y. Acad. Sci.*, (357):169–82, 1980. [36]
- B. Schuh. *J. Phys. A*, (18):803, 1985. [37]
- L. P. Lévy, G. Dolan, J. Dunsmuir, and H. Bouchiat. *Phys. Rev. Lett.*, (64):2074, 1990. [38]
- S. Washburn and R. A. Webb. *Adv. Phys.*, (35):395, 1986. [39]

[40] D. Ullmo, K. Richter, and R. Jalabert. *Phys. Rev. Lett.*, (74):383, 1995.

[41] E. P. Wigner. *Phys. Rev. A*, (40):749, 1932.