

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
INSTITUTO DE FÍSICA "GLEB WATAGHIN"

**Aspectos de Integrabilidade
e Caos Relacionados a
Quebra de Simetria em
Modelos de Poucos Spins**

Giancarlo Queiroz Pellegrino ✓

Orientadora: Profa. Dra. Kyoko Furuya

Dezembro de 1994

*Este exemplar corresponde à redação
final da Tese defendida pelo aluno Giancarlo
Queiroz Pellegrino e aprovada pela Comissão
Julgadora.*

09/02/95 *Kyoko Furuya*

Tese apresentada ao Instituto de Física
“Gleb Wataghin” da Universidade Estadual
de Campinas, como parte dos requisitos à
obtenção do título de Doutor em Ciências.

A meus pais.

Agradecimentos

Agradeço à profa. Kyoko Furuya pela orientação, acompanhamento e apoio.

À profa. M. Carolina Nemes pela colaboração.

Aos amigos e companheiros de trabalho.

Este trabalho foi desenvolvido com apoio financeiro da Fundação Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) e Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), pelo qual sou grato.

Resumo

No trabalho faz-se um estudo dos sistemas de Heisenberg anisotrópicos com dois e três spins, relacionando-se aspectos de integrabilidade e caos nos regimes clássico e quântico-semiclássico. Após descrição dos sistemas de spins clássicos como sistemas hamiltonianos e do procedimento usado na obtenção do limite clássico a partir dos sistemas quânticos, procedimento baseado na representação de estados coerentes, é feita a comparação entre os espectros quânticos e o espaço de fase clássico. Mostra-se que a presença de um ponto de inflexão no espectro do sistema de dois spins indica a existência de uma órbita clássica separatriz. Esta abordagem é estendida ao sistema de três spins, fazendo-se uso dos gráficos $\Delta_{n+1} \times \Delta_n$ e $\Delta_n \times n$, que relacionam diferenças de energia entre níveis vizinhos. No caso de três spins, o ponto de inflexão registra a região do espectro onde o caos se manifesta mais intensamente. Seções de Poincaré do sistema clássico associado confirmam esta previsão.

Como resultado adicional, as distribuições de Husimi do sistema de dois spins sugerem uma torção no espaço de fase clássico como manifestação da identidade dos spins.

Algumas possibilidades para futuras investigações são sugeridas.

Conteúdo

Resumo	iv
Introdução	3
Parte I	7
1 Sistemas de spins e a interação de Heisenberg	8
2 Integrabilidade em sistemas de spins	11
2.1 Integrabilidade em sistemas de spins clássicos	12
2.1.1 Integrabilidade dinâmica	12
2.1.2 Integrabilidade termodinâmica	17
2.2 Integrabilidade em sistemas de spins quânticos	19
2.3 Integrabilidade nos modelos de Heisenberg de poucos spins	21
2.3.1 Modelo de Heisenberg de dois spins	22
2.3.2 Modelo de Heisenberg de três spins	22
3 O limite clássico para os sistemas de Heisenberg	24
3.1 Hamiltonianas clássicas \mathcal{E}_2 e \mathcal{E}_3	27
3.1.1 O princípio variacional para estados não normalizados e a parametrização complexa	27
3.1.2 Estados coerentes para spins	29
3.1.3 Estados coerentes e a estrutura clássica para os sistemas de spins (expressões para \mathcal{E}_2 e \mathcal{E}_3)	32
4 Métodos e técnicas de análise	43
4.1 Métodos e técnicas para o sistema clássico	44
4.2 Métodos e técnicas para o sistema quântico	46
4.2.1 Distribuições de Husimi	46
4.2.2 Espectro de energias	49

Parte II

51

5	Manifestações clássicas e quânticas de quebra de simetria no modelo de Heisenberg de dois spins	52
5.1	O modelo e seus espectros quânticos	53
5.2	Dinâmica clássica e sua conexão com os espectros quânticos	56
5.2.1	Órbitas clássicas e espectros quânticos	56
5.2.2	Regra de quantização	60
5.3	Discussão	65
6	Manifestações clássicas e quânticas de quebra de simetria no modelo de Heisenberg de três spins	67
6.1	Características gerais dos modelos	69
6.2	O modelo de dois spins	70
6.2.1	Resumo do modelo	70
6.2.2	Caso isotrópico ($\sigma = 0$)	72
6.2.3	Caso anisotrópico ($\sigma \neq 0$)	75
6.3	O modelo de três spins	76
6.3.1	Resumo do modelo	76
6.3.2	Caso isotrópico ($\sigma = 0$)	79
6.3.3	Caso anisotrópico ($\sigma \neq 0$)	80
6.3.4	Dinâmica clássica para o modelo de três spins	83
6.4	Discussão	86
7	Torção no espaço de fase clássico: uma consequência da indistinguibilidade quântica de dois spins interagentes	88
7.1	Spins idênticos e o espaço de fase clássico	88
7.2	Espaço de fase clássico para o sistema de dois spins	90
7.3	Distribuições de Husimi para o sistema de dois spins	92
7.3.1	Caso a) Dois spins diferentes: $S_1 = 201$, $S_2 = 200$	93
7.3.2	Caso b) Dois spins idênticos: $S_1 = S_2 = S = 200$	94
7.4	Discussão	94
8	Conclusão	99
	Apêndice A	104
	Apêndice B	107
	Apêndice C	109
	Bibliografia	114

Introdução

Dentro do contexto mais geral do estudo de sistemas dinâmicos caóticos, clássicos e quânticos, a caracterização do caos em sistemas quânticos em seu regime semiclássico tem propiciado um considerável acúmulo de informações envolvendo vários aspectos do comportamento de sistemas quânticos nesse regime. Entre outros, podem ser citados a estrutura do agrupamento de níveis de energia [1] e o comportamento de suas funções de onda que, no limite $\hbar \rightarrow 0$, tendem a se concentrar próximas a trajetórias periódicas do problema clássico correspondente, configurando o que se convencionou nomear cicatrizes de órbitas periódicas clássicas [2, 3]. A maior parte desse esforço para caracterização e entendimento de sistemas quânticos lida com sistemas hamiltonianos [4, 5], cujos espaços de Hilbert dos vetores de estado têm dimensão infinita. Nestes casos, o espaço de fase dos sistemas clássicos análogos descreve exemplarmente o movimento de partículas, regido pela hamiltoniana clássica correspondente. Sistemas com espaço de Hilbert de dimensão finita e espaço de fase compacto e finito têm sido estudados recentemente [6, 7], revelando efeitos novos – associados à finitude do espaço de fase – e em alguns casos, contrastantes, relativamente àqueles sistemas de espaço de fase infinito. Assim como graus de liberdade associados ao movimento de partículas são o exemplo imediato para espaços de Hilbert de dimensão infinita, também os graus de liberdade associados às variáveis de spin são exemplos para espaços de Hilbert de dimensão finita. Sistemas de spins oferecem-se, então, como candidatos naturais para o estudo daqueles novos efeitos. De um ponto de vista mais atento à dinâmica dos sistemas físicos, o estudo de sistemas de espaço de Hilbert de dimensão finita pode ser introduzido, buscando-se responder à seguinte pergunta. Tem-se estudado e conhecido a dinâmica de sistemas físicos relativamente aos graus de liberdade associados ao movimento de suas partículas; que influência têm, nesta dinâmica, os graus de liberdade associados aos spins, presentes afinal em todos os sistemas físicos?

Além do interesse informativo e conceitual esboçado acima, os sistemas de spins oferecem vantagens práticas por conterem exemplos tratáveis analítica e numericamente. De fato, possuindo espaço de Hilbert de dimensão finita, a resolução do problema quântico de autoestados do operador hamiltoniano é feita exatamente, sem truncagem das matrizes correspondentes, como é característico dos sistemas de partículas. Uma das limitações seria a dificuldade de se obter uma boa estatística de

níveis de energia, dado o pequeno e limitado número de autovalores. Todavia, para os sistemas de spins que possuem limite clássico bem definido, consegue-se tantos autovalores quantos para o caso de partículas, a limitação sendo exercida, então, pela capacidade do sistema computacional usado.

Apresentaremos nesta dissertação o estudo de dois sistemas de spins caracterizados pela interação de Heisenberg [8]. O estudo desta interação (spin-spin) se insere em uma linha de pesquisa mais ampla e que leva em conta os vários tipos de interação possíveis, envolvendo graus de liberdade associados a spin: spin-partícula, spin-spin, spin-campo eletromagnético, spin-fônon; e as possibilidades decorrentes de cada uma destas associações. Exemplos de sistemas estudados e que envolvem estas interações podem ser encontrados no modelo de Dicke para o maser [9, 10, 11], no modelo de emparelhamento [12, 13], nos próprios modelos de Heisenberg [14, 15, 16], no sistema de um spin em presença de um campo magnético externo dependente do tempo [17], no modelo de Lipkin [18], nos tratamentos de modos coletivos em física nuclear [7, 19] e no tratamento da interação spin-fônon [20].

Trataremos especificamente dos sistemas quânticos representados pelos hamiltonianos

$$H_2 = J(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \sigma S_1^z S_2^z) \quad (\text{I.1})$$

e

$$H_3 = J \sum_{l=1}^3 (\mathbf{S}_l \cdot \mathbf{S}_{l+1} + \sigma S_l^z S_{l+1}^z), \quad (\text{I.2})$$

em que $\mathbf{S}_4 \equiv \mathbf{S}_1$, J e o parâmetro de anisotropia σ são números reais, e S_l^α ($l = 1, 2, 3$; $\alpha = x, y, z$) correspondem aos operadores de spins usuais. Nosso objetivo aqui será o estudo de vários aspectos relacionados a caos e integrabilidade, decorrentes da quebra de simetria na aproximação semiclássica para estes modelos. Portanto, estaremos analisando estes sistemas no âmbito estrito dos sistemas dinâmicos. Ainda assim, vale notar o significado físico dos parâmetros envolvidos. A constante J , simplificação da constante de troca [8], diz respeito ao tipo de acoplamento predominante: para $J > 0$ tem-se o caso antiferromagnético e para $J < 0$ tem-se o caso ferromagnético. A quebra de simetria, neste caso a quebra de isotropia, representa por sua vez o caso mais comum na natureza. Assim, o tratamento destes modelos de poucos spins pode oferecer subsídios para um estudo de sistemas mais realísticos, então no âmbito da física estatística e da física da matéria condensada.

Quebras de simetria em sistemas dinâmicos têm, em geral, conseqüências importantes, tanto do ponto de vista clássico quanto do ponto de vista quântico, além de propiciarem informação relevante para a compreensão da dinâmica do sistema em questão [21]. No nosso estudo, especial atenção será dada à transição do caso isotrópico ($\sigma = 0$) ao caso anisotrópico ($\sigma \neq 0$), transição esta que representa uma quebra de simetria em relação ao plano xy . Esta transição permitirá a observação de vários efeitos que aparecerão em três situações distintas:

i) efeitos de quebra de simetria no modelo de dois spins, sem quebra de integrabili-

dade;

ii) efeitos do aumento do número de graus de liberdade (através do aumento do número de spins), mantendo-se a integrabilidade;

iii) efeitos da quebra de simetria, quebrando-se concomitantemente a integrabilidade, no sistema de três spins.

Adiantamos aqui que o limite clássico para os sistemas H_2 e H_3 (bem definido, como veremos) serão a referência nas comparações e análise dos resultados, obtidos para os sistemas quânticos. De forma figurada, teremos os pés no regime quântico e as vistas sobre o regime clássico dos sistemas H_2 e H_3 .

O texto que segue está dividido em duas partes autônomas. A Parte I, formada pelos capítulos 1-4, é basicamente conceitual e tem dupla finalidade. A primeira delas revela-se através da apresentação dos sistemas de spins e dos conceitos que os caracterizam. Sobre estes conceitos estabelecem-se as bases teóricas que darão suporte a escolhas e procedimentos seguidos, especificando o escopo do trabalho, que decorre em grande medida daquelas escolhas. A segunda finalidade da Parte I é servir como uma primeira e simples introdução aos sistemas de spins, agrupando material disperso em artigos publicados, fornecendo referências bibliográficas e, na medida do possível, normatizando o vocabulário referente aos sistemas de spins, vistos como sistemas hamiltonianos. No capítulo 1 tem-se uma rápida caracterização dos sistemas de spins e, em especial, dos hamiltonianos de Heisenberg. No capítulo 2 são apresentadas e discutidas as definições de integrabilidade para sistemas de spins clássicos e quânticos, além de uma descrição hamiltoniana clássica para esses sistemas. O limite clássico para os sistemas H_2 e H_3 é investigado no capítulo 3, e no capítulo 4 são detalhados os métodos de análise no espaço de fase, utilizados no tratamento dos sistemas de nosso interesse.

A Parte II desta dissertação, formada pelos capítulos 5-8, envolve o tratamento dos sistemas de Heisenberg H_2 e H_3 , a apresentação dos resultados obtidos e a análise especificada desses resultados. De forma geral, esse tratamento se baseia em aspectos da dinâmica dos análogos clássicos, que fazem a contrapartida aos resultados obtidos para os sistemas quânticos, quais sejam, o espectro de energias e sua análise, o estudo dos coeficientes das funções de onda e as distribuições de Husimi para autoestados quânticos. Diferentemente da Parte I, nesta Parte II procurou-se dividir o texto em capítulos independentes, tanto quanto possível. A menos de uma ou outra referência entre si, os capítulos 5-7 poderiam, então, ser lidos em qualquer ordem, sem prejuízo de informação. No capítulo 5 é estudado o caso de dois spins e, no capítulo seguinte, lidamos com o sistema de três spins. O capítulo 7 apresenta um resultado que sugere uma interessante manifestação, num contexto clássico, da indistinguibilidade quântica de dois spins interagentes. O capítulo final, 8, traz uma análise do conjunto dos resultados e uma discussão sobre algumas possibilidades de trabalhos e sugestões, advindas desses resultados.

Assim, o leitor afeito ao tratamento dos sistemas dinâmicos hamiltonianos e interessado apenas nos resultados para os sistemas de Heisenberg de dois e três

spins pode passar diretamente à Parte II, buscando na Parte I, se julgar necessário, alguma definição ou referência específicas. Inversamente, o leitor que quiser apenas uma introdução geral e simples aos sistemas de spins pode se ater à Parte I.

Parte I

Capítulo 1

Sistemas de spins e a interação de Heisenberg

O estudo de integrabilidade e não-integrabilidade em sistemas físicos pode, grosso modo e esquematicamente, ser distribuído em quatro grandes contextos:

- Sistemas dinâmicos quânticos com poucos corpos.
- Sistemas dinâmicos quânticos com muitos corpos.
- Sistemas dinâmicos clássicos com poucos graus de liberdade (poucos corpos).
- Sistemas dinâmicos clássicos com muitos graus de liberdade (muitos corpos).

Sistemas de spins, particularmente, aparecem em campos muito distintos da Física, da teoria do magnetismo à física nuclear. Como veremos nos próximos capítulos, de modo geral necessitam de métodos especiais em seu tratamento, devido, sobretudo, ao fato de as componentes de spins obedecerem a relações de comutação diferentes daquelas observadas para sistemas de partículas, bosônicas ou fermiônicas. Neste capítulo daremos atenção ao fato de que aparecem em formas diversas quanto às características do sistema: spins pequenos (tipicamente de número quântico $S = \frac{1}{2}$), spins grandes (eventualmente no limite $S \rightarrow \infty$), poucos spins e muitos spins. Esta diversidade indica que o estudo de sistemas de spins permite-nos visitar e explorar os quatro contextos do esquema acima. É uma possibilidade interessante, não apenas pela obtenção de informação relevante dentro de cada contexto individualmente, mas também porque permite a averiguação e o estabelecimento de conexões entre eles, caracterizadas aqui pelos binômios *quântico - clássico* (via limite semiclássico $S \rightarrow \infty$) e *poucos graus de liberdade - muitos graus de liberdade* (via limite termodinâmico do número de spins, $N \rightarrow \infty$) [22].

Neste cenário a interação de Heisenberg entre dois spins $\mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_l$ tem se revelado uma profícua fonte de informações. De construção simples, um hamiltoniano de spins para um sistema de dois elétrons

$$H^{spin} = J(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2) \quad (1.1)$$

pode ser estendido para um sistema de muitos íons, resultando no hamiltoniano de Heisenberg propriamente dito [8],

$$H = \sum_{j,l} J_{jl} \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_l. \quad (1.2)$$

Este hamiltoniano tem tido papel central em teoria do magnetismo desde os primeiros estudos sobre transição ferromagnética, análise termodinâmica e magnetização feitos por C. Kittel, H. Shore e J.F. Cooke nos anos 60 [23, 24]. Neste contexto mecânico-estatístico de muitos spins quânticos (tipicamente com $S = \frac{1}{2}$), as cadeias de spins caracterizadas pela interação de Heisenberg constituíram um campo próprio de pesquisas [25]. De outra parte e contrapondo-se ao hamiltoniano de Heisenberg com muitos spins, o hamiltoniano de três spins H_3 apresentado na Introdução (com $S = \frac{5}{2}$) tem papel importante no estudo teórico e análise de dados experimentais de certos sistemas biofísicos, envolvendo proteínas caracterizadas por agrupamentos de três íons de ferro [26, 27].

Em circunstâncias bastante distintas, sistemas de spins têm sido utilizados na descrição de movimentos coletivos presentes em sistemas de muitos corpos interagentes. Como exemplo pode-se citar os trabalhos [18, 28] sobre o modelo de Lipkin e as referências [13, 19] sobre o modelo de emparelhamento. Em todos estes trabalhos, algum sistema quântico de muitos corpos (em particular, muitos férmions interagentes) é descrito em termos de poucos operadores que satisfazem relações de comutação próprias dos operadores de spin. Estes operadores de spin são escritos como combinações bilineares dos operadores de criação e aniquilação de todos os férmions, atuando, então, como operadores para o sistema como um todo¹. Assim, um problema de muitos corpos pode ser descrito como um sistema de poucos spins interagentes, para os quais o número quântico de spin S pode ser grande.

Os parágrafos anteriores trouxeram uma seqüência de situações envolvendo sistemas de spins, que parte de casos em que o número quântico S é pequeno ($S = \frac{1}{2}$ para os estudos de magnetismo), passa por casos em que S é um pouco maior ($S = \frac{5}{2}$ para os sistemas biofísicos referidos) e chega à possibilidade de números grandes para S (descrição de movimentos coletivos). Além de caracterizar brevemente a presença e importância dos sistemas de spins, esta seqüência é anunciadora da existência

¹As denominações *pseudospin* e *quasispin* também são encontradas. Optamos por uma nomenclatura única, operadores de spin, atendo-nos, sobretudo, às relações de comutação como definidoras destes operadores.

de limites clássicos para estes sistemas e também de nossos interesses neste texto². Como adiantamos na Introdução, iremos considerar os sistemas de spins H_2 e H_3 como sistemas dinâmicos, relativamente a questões envolvendo a integrabilidade e a não-integrabilidade destes modelos. No cenário dos quatro grandes contextos apresentado no início deste capítulo, estaremos explorando individualmente os contextos dos sistemas dinâmicos quânticos com poucos corpos (poucos spins) e dos sistemas dinâmicos clássicos com poucos graus de liberdade, bem como as conexões entre eles.

Sistemas de spins têm sido explorados como sistemas dinâmicos hamiltonianos em vários aspectos. Propriedades dinâmicas de spins *clássicos* foram estudadas por M. Feingold e A. Peres [29] (seções de Poincaré para um sistema de dois rotores), por E. Magyari *et al.* [14] (critério de integrabilidade e estruturas analíticas invariantes para sistemas de poucos spins interagentes) e também por N. Srivastava *et al.* [15] (trajetórias, seções de Poincaré e estruturas geométricas invariantes para sistemas de poucos spins interagentes). A correspondência *clássico - quântico* é abordada por H. Frahm e H.J. Mikeska [17] (um spin em presença de campo magnético), por G. Müller [22] (aspectos conceituais relacionados a integrabilidades clássica e quântica em sistemas de spins) e também por K. Nakamura e A.R. Bishop [16] (correspondência entre dinâmica clássica e o espectro semiclássico no sistema H_3 de três spins com interação de Heisenberg). Como nestes últimos casos, estaremos interessados na correspondência *clássico - quântico*, explorando de um lado as estruturas da dinâmica clássica: órbitas periódicas, ação destas órbitas, seções de Poincaré, etc.; e de outro lado, propriedades globais como o espectro formado pelo conjunto dos autovalores quânticos de energia e também propriedades individuais de autoestados quânticos tomados isoladamente.

²Para os limites clássicos dos modelos de Lipkin e de emparelhamento, por exemplo, ver respectivamente, as referências [7] e [13].

Capítulo 2

Integrabilidade em sistemas de spins

Para uma averiguação das relações entre integrabilidade e caos nos sistemas apresentados na Introdução através dos hamiltonianos H_2 e H_3 , será necessário, antes de tudo, estabelecermos o que significam estes conceitos, quando associados a sistemas de spins. Neste capítulo examinaremos a maneira como se transportam, para sistemas de spins clássicos e quânticos, as definições de integrabilidade e não-integrabilidade¹. Além de fundamentarem conceitualmente os passos a serem dados nos próximos capítulos, estas definições têm importância prática. Afinal todos os resultados e métodos de análise referentes ao espaço de fase – a serem descritos no capítulo 5 – baseiam-se, em última instância, na definição de integrabilidade, seja a destruição de toros invariantes prevista pelo teorema KAM e observada via seções de Poincaré no caso clássico, seja a destruição das grades regulares de valores médios de observáveis no caso quântico. Neste sentido este capítulo fornece o substrato necessário às escolhas feitas e métodos utilizados nos próximos capítulos.

As definições e discussões a serem apresentadas apontam duas vias alternativas para um estudo sobre integrabilidade em sistemas de spins: o limite clássico em que o número de spins N permanece finito, enquanto o número quântico de spins S tende a infinito; e o limite termodinâmico em que S é finito e N tende a infinito. Tendo em vista os objetivos deste trabalho, o limite clássico (N finito, $S \rightarrow \infty$) emerge naturalmente como alternativa única. Esta delimitação tem duas conseqüências importantes. Em primeiro lugar ela restringe o campo de nossos estudos aos sistemas de poucos corpos – dois spins para H_2 e três spins para H_3 . Em outras palavras, passaremos ao largo de toda a física estatística associada às cadeias de spins, que por si constitui um campo vastíssimo [25]. Em segundo lugar veremos que, apesar de se tratar de spins, a delimitação acima oferece-nos a possibilidade vantajosa de

¹Embora pouco usual, a idéia do que possa ser um sistema dinâmico de spins clássicos será discutida e justificada ao longo das seções seguintes.

aproveitarmos grande parte do vocabulário e dos resultados estabelecidos no estudo de sistemas dinâmicos de partículas clássicas.

Nas duas seções que se seguem, abordaremos as definições de integrabilidade para sistemas de spins clássicos (seção 2.1) e para sistemas de spins quânticos (seção 2.2). Na seção final 2.3 veremos como estas definições se refletem, quando aplicadas aos sistemas de Heisenberg de nosso interesse.

2.1 Integrabilidade em sistemas de spins clássicos

Para sistemas de spins clássicos há duas definições possíveis de integrabilidade [22]:

- *Integrabilidade dinâmica*: Um sistema de spins clássicos é dinamicamente integrável, se existem N constantes de movimento independentes e em involução, sendo N o número de graus de liberdade do sistema.
- *Integrabilidade termodinâmica*: Um sistema de spins clássicos é termodinamicamente integrável, se é possível determinar exatamente sua função de partição.

Pode-se notar, já neste ponto, um primeiro reflexo das idéias presentes no estudo mais tradicional dos sistemas dinâmicos clássicos, qual seja, a noção básica que associa integrabilidade à possibilidade de resolução completa do problema dinâmico. No caso de integrabilidade dinâmica, este problema é resolvido expressando-se as equações de movimento através de um conjunto de N leis de conservação, dadas pelas constantes de movimento. No caso de integrabilidade termodinâmica, sua própria definição explicita a idéia de resolução completa do problema.

Nas subseções seguintes discutiremos alguns aspectos relativos a cada uma das definições acima. Veremos, então, que a similaridade entre as descrições de sistemas de spins clássicos e de sistemas de partículas clássicas vai além da noção básica citada no parágrafo anterior, podendo-se estendê-la até uma descrição hamiltoniana clássica dos sistemas de spins.

2.1.1 Integrabilidade dinâmica

A idéia de se estudar a dinâmica de um sistema clássico descrito por interações entre spins clássicos tem, obviamente, sua origem na existência das variáveis (ou operadores) de spin, presentes no formalismo da mecânica quântica. Entretanto, pode-se considerar esta idéia do ponto de vista mais geral do estudo de sistemas dinâmicos.

Tomemos um sistema dinâmico de N spins clássicos

$$\frac{d\mathcal{S}_l}{dt} = \mathcal{F}_l(\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2, \dots, \mathcal{S}_N) \quad l = 1, 2, \dots, N, \quad (2.1)$$

para o qual a evolução temporal de cada spin \mathcal{S}_l dá-se no espaço tridimensional das coordenadas $\mathcal{S}_l^x, \mathcal{S}_l^y, \mathcal{S}_l^z$. Podemos nos propor uma descrição deste sistema, análoga à descrição de um sistema hamiltoniano qualquer [14, 15], dada por

$$\frac{d\mathcal{S}_l^\alpha}{dt} = \{\mathcal{S}_l^\alpha, \mathcal{H}\} \quad l = 1, 2, \dots, N; \alpha = x, y, z. \quad (2.2)$$

Na descrição proposta $\{A, B\}$ denotaria usualmente os parênteses de Poisson

$$\{A, B\} = \sum_l \left(\frac{\partial A}{\partial q_l} \frac{\partial B}{\partial p_l} - \frac{\partial A}{\partial p_l} \frac{\partial B}{\partial q_l} \right), \quad (2.3)$$

escritos em termos de pares de variáveis canonicamente conjugadas; e a função

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}(\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2, \dots, \mathcal{S}_N) \quad (2.4)$$

seria dada pela correspondente função geradora da evolução temporal do sistema [30]. Visto que não especificamos o que são spins clássicos, não há ainda definição do que seriam os parênteses de Poisson e os pares de variáveis (q_l, p_l) ; tampouco o que representaria a função \mathcal{H} . Como seria desejável que estes spins clássicos viessem a refletir os correspondentes operadores quânticos de spins, seria, então, desejável que se mantivessem consistentemente as relações mecânico-quânticas

$$\frac{dS_l^\alpha}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [S_l^\alpha, H] \quad (2.5)$$

$$[S_l^\alpha, S_l^\beta] = i\hbar \delta_{\alpha\beta\gamma} \sum_\gamma \epsilon^{\alpha\beta\gamma} S_l^\gamma \quad (2.6)$$

e

$$\langle S_{l'}, m_{l'} | (\mathbf{S}_l)^2 | S_l, m_l \rangle = S_l(S_l + 1)\hbar^2 \delta_{ll'} \delta_{m_l m_{l'}}. \quad (2.7)$$

Nestas equações S_l^α ($l = 1, 2, \dots, N; \alpha = x, y, z$) representa os operadores quânticos de spin e H , o operador quântico hamiltoniano; $[A, B]$ é o comutador quântico entre os operadores A e B e $|S_l, m_l\rangle$ representa o estado de spin, dado pelos números quânticos de spin S_l e da componente S_l^z, m_l . δ é a função delta de Kronecker e $\epsilon^{\alpha\beta\gamma}$ é o símbolo de Levi-Civita.

As equações 2.5 e 2.6 sugerem respectivamente que tomemos como função geradora \mathcal{H} , a função “energia”, escrita em correspondência com o operador quântico

$$H = H(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \dots, \mathbf{S}_N) \rightarrow \mathcal{H} = \mathcal{H}(\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2, \dots, \mathcal{S}_N); \quad (2.8)$$

e como relação básica para os parênteses de Poisson,

$$\{\mathcal{S}_l^\alpha, \mathcal{S}_l^\beta\} = \delta_{ll'} \sum_\gamma \epsilon^{\alpha\beta\gamma} \mathcal{S}_l^\gamma. \quad (2.9)$$

Além destas, a constante dada pelo autovalor $S_l(S_l + 1)\hbar^2$, presente na equação 2.7, sugere que tomemos, para os spins clássicos, vetores \mathcal{S}_l de módulo constante

$$|\mathcal{S}_l| = S_{Cl}, \quad (2.10)$$

fazendo-se a associação $S_{Cl} \leftrightarrow \hbar\sqrt{S_l(S_l + 1)}$, que eventualmente poderá ser normalizada por $\hbar\sqrt{S_l(S_l + 1)} = 1$. Neste caso, as componentes \mathcal{S}_l^α do spin clássico \mathcal{S}_l evoluirão sobre uma superfície esférica, dada pela relação 2.10.

É importante enfatizar que as relações 2.8-2.10 não decorrem das relações 2.5-2.7; são sugeridas por estas. Do ponto de vista em que nos situamos nesta seção, assumimos a priori as relações 2.8-2.10 independentemente de uma eventual contrapartida quântica.

Deixando de lado, por enquanto, a motivação quântica, chamemos então spin clássico o vetor $\mathcal{S} \equiv (\mathcal{S}^x, \mathcal{S}^y, \mathcal{S}^z)$ cujas componentes evoluem dinamicamente no espaço das coordenadas $\mathcal{S}^x, \mathcal{S}^y, \mathcal{S}^z$, obedecendo à restrição

$$|\mathcal{S}_l| = S_{Cl}. \quad (2.11)$$

Um sistema dinâmico de N spins clássicos dado pela hamiltoniana

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}(\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2, \dots, \mathcal{S}_N) \quad (2.12)$$

é, assim, apenas um sistema hamiltoniano autônomo com características próprias, dadas pela especial relação – parênteses de Poisson – entre as componentes dos vetores \mathcal{S}_l

$$\{\mathcal{S}_l^\alpha, \mathcal{S}_l^\beta\} = \delta_{ll'} \sum_\gamma \epsilon^{\alpha\beta\gamma} \mathcal{S}_l^\gamma \quad l = 1, 2, \dots, N. \quad (2.13)$$

A evolução temporal deste sistema é dada, como esperado, pelas equações

$$\frac{d\mathcal{S}_l^\alpha}{dt} = \{\mathcal{S}_l^\alpha, \mathcal{H}\} \quad l = 1, 2, \dots, N; \alpha = x, y, z. \quad (2.14)$$

Neste ponto cabem algumas observações quanto à extensão da validade da analogia com a descrição hamiltoniana. Observemos inicialmente que aquilo que temos nomeado simplifcadamente hamiltoniana \mathcal{H} é, até o momento, apenas uma função energia, visto que nada foi dito sobre como se escreve \mathcal{H} em termos de variáveis canonicamente conjugadas. Tampouco podemos entender \mathcal{H} como a soma

$$\mathcal{H} = \mathcal{T} + \mathcal{V} \quad (2.15)$$

de uma parcela cinética e uma parcela potencial. A proposta acima significa apenas a descrição da dinâmica das variáveis S_l^α , obedecendo as equações 2.11–2.14 sem ter, contudo, associada a si a imagem de partículas movendo-se com energia constante \mathcal{H} distribuída entre uma parcela cinética – função de suas “velocidades” – e outra parcela potencial – função de suas posições, e eventualmente “velocidades”.

O caráter hamiltoniano da função \mathcal{H} pode ser recuperado, exibindo-se pares de variáveis canonicamente conjugadas (q_l, p_l) , como segue. Escrevendo o vetor \mathcal{S}_l em coordenadas esféricas

$$\mathcal{S}_l \equiv (\mathcal{S}_{Cl} \sin \theta_l \cos \phi_l, \mathcal{S}_{Cl} \sin \theta_l \sin \phi_l, \mathcal{S}_{Cl} \cos \theta_l), \quad (2.16)$$

definimos as variáveis

$$q_l = \phi_l \quad p_l = \mathcal{S}_{Cl} \cos \theta_l = S_l^z. \quad (2.17)$$

Como será discutido no capítulo 3, os pares (q_l, p_l) assim definidos satisfazem as relações de comutação

$$\begin{aligned} \{q_l, q_{l'}\} &= 0 \\ \{p_l, p_{l'}\} &= 0 \\ \{q_l, p_{l'}\} &= \delta_{ll'} \end{aligned} \quad (2.18)$$

e permitem-nos descrever a dinâmica dos sistemas de spins clássicos, usando as equações de Hamilton [14]

$$\dot{q}_l = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p_l} \quad \dot{p}_l = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q_l}. \quad (2.19)$$

De maneira geral, a evolução temporal de qualquer função $\mathcal{F} = \mathcal{F}(\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2, \dots, \mathcal{S}_N; t)$ pode, então, ser descrita pela equação de movimento

$$\frac{d\mathcal{F}}{dt} = \{\mathcal{F}, \mathcal{H}\} + \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial t}. \quad (2.20)$$

Portanto, o sistema dinâmico de N spins clássicos dado pelas equações 2.11–2.14 representa um sistema com N graus de liberdade. O espaço de fase, de dimensão $2N$, associado a este sistema é a variedade compacta dada pelo produto cartesiano das N superfícies esféricas $|\mathcal{S}_l| = \mathcal{S}_{Cl}$, sobre a qual cada par de variáveis canonicamente conjugadas tem o seguinte intervalo de variação

$$\begin{aligned} -\pi &< q_l \leq \pi, \\ -\mathcal{S}_{Cl} &< p_l < \mathcal{S}_{Cl}. \end{aligned} \quad (2.21)$$

conjugadas tem o seguinte intervalo de variação

$$\begin{aligned} -\pi &< q_l \leq \pi, \\ -\mathcal{S}_{Cl} &< p_l < \mathcal{S}_{Cl}. \end{aligned} \quad (2.21)$$

conjugadas tem o seguinte intervalo de variação

$$\begin{aligned} -\pi &< q_l \leq \pi, \\ -\mathcal{S}_{Cl} &< p_l < \mathcal{S}_{Cl}. \end{aligned} \quad (2.21)$$

conjugadas tem o seguinte intervalo de variação

Finalmente, este sistema é dinamicamente integrável, se existem N constantes de movimento $\mathcal{J}_l(\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2, \dots, \mathcal{S}_N)$ independentes e em involução, isto é, tais que

$$\begin{aligned} \{\mathcal{J}_l, \mathcal{H}\} &= 0 \\ \{\mathcal{J}_l, \mathcal{J}_{l'}\} &= 0. \end{aligned} \quad (2.22)$$

No caso de existirem N tais constantes de movimento, qualquer trajetória individual (solução do sistema 2.19) terá seu movimento confinado à hipersuperfície de dimensão N , resultante da intersecção das N hipersuperfícies dadas por $\mathcal{J}_l = 0$, cada uma delas com dimensão $(2N - 1)$. Na linguagem dos sistemas hamiltonianos, esta hipersuperfície final é chamada toro invariante, podendo-se escolher as constantes \mathcal{J}_l de tal modo que seus valores possam ser calculados usando-se N caminhos fechados C_l , topologicamente independentes:

$$\mathcal{J}_l = \frac{1}{2\pi} \oint_{C_l} p_l dq_l. \quad (2.23)$$

A hamiltoniana \mathcal{H} pode, então, ser reescrita como função das ações \mathcal{J}_l somente

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}(\mathcal{J}_1, \mathcal{J}_2, \dots, \mathcal{J}_N) \quad (2.24)$$

e a descrição do movimento pode ser separada em N leis de conservação,

$$\dot{\mathcal{J}}_l = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \Theta_l} = 0 \Rightarrow \mathcal{J}_l = \text{constante} \quad (2.25)$$

e N equações de movimento para as freqüências associadas às variáveis ângulo Θ_l ,

$$\dot{\Theta}_l = \omega_l = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathcal{J}_l}. \quad (2.26)$$

Refazendo-se a descrição da dinâmica do sistema de spins clássicos em termos do formalismo hamiltoniano, tem-se a vantagem de poder aproveitar os resultados daquela formulação e poder, também, caminhar no estudo proposto na Introdução por uma via paralela à tradicional via dos sistemas hamiltonianos já estudados (mecânicos em especial). A possibilidade de comparação entre os resultados obtidos nestas duas vias é, por si, atraente e sugestiva. A partir deste ponto de vista, a definição de integrabilidade dinâmica, baseada nas constantes de movimento independentes e em involução, é mera decorrência; como são também, de forma geral, os resultados, teoremas, métodos de análise, etc., presentes no formalismo hamiltoniano. Esta proposta de descrição, construída para ser hamiltoniana, insere o estudo de sistemas dinâmicos de spins clássicos no contexto mais geral do estudo de sistemas dinâmicos hamiltonianos, justificando-o conseqüentemente.

2.1.2 Integrabilidade termodinâmica

Como vimos no início desta seção, a definição de integrabilidade termodinâmica envolve o cálculo da função de partição do sistema de spins. Para um sistema de N spins clássicos \mathcal{S}_l ($l = 1, 2, \dots, N$), com energia total dada pela função energia

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}(\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2, \dots, \mathcal{S}_N), \quad (2.27)$$

a função de partição associada Z_N escreve-se como a integral múltipla

$$Z_N = \int d\mathcal{S}_1 \int d\mathcal{S}_2 \dots \int d\mathcal{S}_N e^{-\beta\mathcal{H}(\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2, \dots, \mathcal{S}_N)}. \quad (2.28)$$

Para N finito a integração é feita sobre a variedade compacta gerada pelo produto de N superfícies esféricas $|\mathcal{S}_l| = \text{constante}$, como vimos na subseção anterior. Vimos também que, nesta variedade, a função energia tem valores limitados por extremos finitos, não havendo, portanto, comportamentos assintóticos que fizessem do integrando uma função patológica. Deste modo vê-se que a função Z_N , para N finito, é sempre bem comportada e analítica (ainda que possa ser difícil sua avaliação numérica). Em outras palavras, sistemas de N spins clássicos, com N finito, são sempre integráveis termodinamicamente, não cabendo nestes casos uma distinção entre integrabilidade e não-integrabilidade termodinâmicas. Uma tal distinção teria sentido, eventualmente, apenas no limite termodinâmico em que o número de spins N tende a infinito. Este não é, obviamente, o caso dos sistemas de Heisenberg de nosso interesse, razão pela qual não nos estenderemos sobre esta definição de integrabilidade. Ressaltamos, porém, sua importância conceitual na busca por uma caracterização bem definida do que possa ser chamado caos quântico em sistemas de spins. Para maiores detalhes a este respeito, de fato a respeito de todo este capítulo, ver o trabalho de G. Müller [22]

* * *

Apresentadas as definições de integrabilidade dinâmica e integrabilidade termodinâmica, fica evidente que nossa única alternativa é a aplicação do conceito de integrabilidade dinâmica. Na discussão da definição deste conceito construímos uma descrição hamiltoniana que prescindia da motivação quântica. Claro está, entretanto, que nosso interesse e motivação são os sistemas quânticos de Heisenberg apresentados e caracterizados na Introdução e no capítulo 1. Isto coloca-nos em um ponto de vista diferente daquele que assumimos na subseção 2.1.1, onde construímos sistemas dinâmicos de spins clássicos. Aqui as relações mecânico-quânticas 2.5–2.7 e a idéia de spin como sendo um objeto essencialmente quântico precedem a possível existência dos sistemas de spins clássicos. Colocam-se naturalmente, então, questões

aparentemente embaraçosas:

- o que são spins clássicos?
- são momentos angulares?
- há análogos mecânico-clássicos para estes sistemas de spins clássicos?
- estes sistemas clássicos são limites de sistemas de spins quânticos?
- limites clássicos com $\hbar \rightarrow 0$, eventualmente?
- há realização física possível para estes sistemas de spins clássicos?
- estes sistemas clássicos são capazes, ao menos, de modelar ou descrever sistemas e/ou interações físicas?

Em que pese a noção, curiosamente arraigada, de que spins são essencialmente quânticos, pode-se tentar entendê-los dentro do eletromagnetismo clássico. A esse respeito, ver o trabalho de H.C. Ohanian [31]. Do ponto de vista da mecânica clássica, pode-se pensar os spins clássicos como momentos angulares, desde que se leve em conta o fato de que não têm massa. Esta é uma associação freqüente na literatura sobre spins clássicos, onde se confundem sistemas de momentos angulares, rotores e spins clássicos [29]. Entretanto, é a massa o ponto que dificulta a analogia entre spin clássico e algum sistema mecânico-clássico. Tome-se como exemplo o candidato “natural”: o giroscópio. G. Müller [22] argumenta que a analogia entre o spin clássico e um corpo rígido girante, como um giroscópio microscópico, exigiria um tensor de inércia com apenas um eixo principal não nulo, o que não seria fisicamente consistente. Como vimos no capítulo 1, todavia, estes spins clássicos são bastante úteis na descrição de movimentos coletivos em modelos da física nuclear. Pode-se pensar também em sistemas físicos em que os spins se acoplem em domínios, adicionando-se e gerando em cada domínio um spin total com características de um spin clássico.

Além das questões que dizem respeito ao limite clássico e relacionada aos sistemas de Heisenberg que estudamos, coloca-se também a questão da legitimidade da aplicação da definição de integrabilidade dinâmica. Ora, se partimos dos sistemas quânticos H_2 e H_3 , a aplicação do conceito de integrabilidade dinâmica descrito na subseção 2.1.1 somente terá sentido, se os correspondentes sistemas de spins clássicos \mathcal{H}_2 e \mathcal{H}_3 forem de fato os limites clássicos de H_2 e H_3 , respectivamente.

Esta questão, bem como as anteriores, são analisadas no capítulo 3, que trata do limite clássico para sistemas de spins quânticos. Veremos, então, que estes sistemas de spins clássicos, gerados a partir dos sistemas quânticos H_2 e H_3 usando-se o procedimento descrito na subseção 2.1.1, correspondem efetivamente aos limites clássicos de H_2 e H_3 .

2.2 Integrabilidade em sistemas de spins quânticos

Diferentemente do caso clássico, para sistemas de spins quânticos há apenas uma definição de integrabilidade [32, 33]:

- Um sistema quântico com N graus de liberdade é integrável, se existem N operadores definidos globalmente, independentes, $I_l(q_1, p_1; q_2, p_2; \dots; q_N, p_N)$ para $l = 1, 2, \dots, N$, cujos comutadores mútuos são nulos,

$$[I_l, I_{l'}] = 0 \quad (2.29)$$

para todos $l, l' = 1, 2, \dots, N$.

Para sistemas de spins, “ N graus de liberdade” corresponde a “ N spins quânticos” e os operadores I_l são funções dos operadores de spins S_l ,

$$I_l = I_l(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \dots, \mathbf{S}_N) \quad l = 1, 2, \dots, N. \quad (2.30)$$

Observemos inicialmente que a definição acima dá conta, simultaneamente, das propriedades termodinâmicas e (tempo-)dinâmicas do sistema de spins quânticos. No caso clássico toda termodinâmica podia ser obtida a partir da função de partição Z_N , que por sua vez prescindia das relações dadas pelos parênteses de Poisson entre as componentes S_l^α ; bastava apenas uma função energia $\mathcal{H}(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \dots, \mathbf{S}_N)$ para se escrever a integral

$$Z_N = \int d\mathbf{S}_1 \int d\mathbf{S}_2 \dots \int d\mathbf{S}_N e^{-\beta\mathcal{H}}. \quad (2.31)$$

No caso quântico, entretanto, a função de partição

$$Z_N = \int d\mathbf{S}_1 \int d\mathbf{S}_2 \dots \int d\mathbf{S}_N \langle \mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \dots, \mathbf{S}_N | e^{-\beta H} | \mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \dots, \mathbf{S}_N \rangle \quad (2.32)$$

exige o conhecimento das relações de comutação entre as componentes-operadores S_l^α . Ou seja, uma definição de integrabilidade termodinâmica para spins quânticos, análoga àquela vista para spins clássicos, não se sustenta.

As propriedades dinâmicas, por sua vez, decorrem naturalmente do formalismo da mecânica quântica. Dado o hamiltoniano do sistema

$$H = H(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \dots, \mathbf{S}_N), \quad (2.33)$$

a propriedade representada pelo valor médio do observável A evolui no tempo segundo a equação de movimento

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle. \quad (2.34)$$

Em especial, as equações de movimento para os spins ficam análogas à equação clássica 2.14

$$\frac{dS_l^\alpha}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [S_l^\alpha, H]. \quad (2.35)$$

O espaço de Hilbert Σ subjacente possui dimensão ²

$$\dim \Sigma = (2S_1 + 1)(2S_2 + 1) \dots (2S_N + 1) \quad (2.36)$$

em que S_l é o número quântico do l -ésimo spin.

Assim como acontece no caso de integrabilidade dinâmica clássica, integrabilidade em sistemas de spins quânticos expressa-se através de um conjunto de leis de conservação. Para sistemas em que a energia é conservada – como os sistemas que trataremos – podemos escolher I_1 como

$$I_1 = H(\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2, \dots, \mathbf{S}_N). \quad (2.37)$$

Existindo outros $N - 1$ operadores I_l tais que

$$[I_l, I_{l'}] = 0 \quad l, l' = 1, 2, \dots, N \quad (2.38)$$

temos

$$\frac{d\langle I_l \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [I_l, H] \rangle = 0 \Rightarrow \langle I_l \rangle = \text{constante}. \quad (2.39)$$

Como os operadores I_l comutam entre si, podemos escrever os vetores de estado $|\psi\rangle$ do sistema numa base de autoestados simultâneos dos N operadores I_l . Para sistemas hamiltonianos quânticos integráveis, o conjunto dos autovalores de I_l forma um conjunto completo de números quânticos que têm, então, um papel similar ao conjunto completo das variáveis de ação nos sistemas hamiltonianos clássicos integráveis dinamicamente.

Ocorre, entretanto, que sistemas com um número finito N de spins quânticos, cada um com seu número quântico de spin S_l ($l = 1, 2, \dots, N$) também finito, são sempre integráveis [22, 14]. Como N e os S_l são finitos, o espaço de Hilbert associado tem dimensão finita e a evolução temporal de qualquer quantidade física é periódica ou quasiperiódica. Dessa maneira possíveis efeitos de não-integrabilidade ocorrem apenas nos limites (N finito e $S_l \rightarrow \infty$) e (S_l finitos e $N \rightarrow \infty$). Como veremos no próximo capítulo, o limite (N finito e $S_l \rightarrow \infty$) é o limite clássico, associado ao limite $\hbar \rightarrow 0$. Este processo de limite dá lugar a efeitos de não-integrabilidade representativos do que chamamos comumente caos clássico. Entende-se esta afirmativa notando-se que tais efeitos são observados à luz da dinâmica gerada pela hamiltoniana clássica \mathcal{H} – obtida do hamiltoniano quântico H – e não da dinâmica quântica em si. Nosso estudo dos aspectos relacionados à integrabilidade, presentes nos hamiltonianos de Heisenberg, tem como termo básico de comparação o

²Desconsideramos, por enquanto, a possível identidade de dois spins interagentes.

limite clássico para estes sistemas, obtido fazendo-se $S \rightarrow \infty$ (N é finito!). Portanto, esta será a via que nos levará à correspondente definição de integrabilidade dinâmica clássica vista na seção anterior.

Apenas para completar a informação, anotamos aqui a observação de que efeitos de não-integrabilidade associados ao processo de limite termodinâmico (S_i finitos e $N \rightarrow \infty$) para sistemas de spins quânticos são representantes daquilo que seria eventualmente denominado caos quântico [22]. O argumento mais simples em favor desta distinção é o de que spins finitos são essencialmente quânticos e os estados do sistema quântico associado somente podem ser descritos dentro da teoria quântica. Neste trabalho ficaremos aquém desta discussão e da definição precisa do termo caos quântico, indicando novamente a referência [22] para uma apresentação mais detalhada.

* * *

Afirmamos na Introdução nosso propósito de estudar relações entre integrabilidade e não-integrabilidade, comparando resultados obtidos de sistemas quânticos com resultados obtidos dos sistemas clássicos associados. Mostra-se que os sistemas clássicos – base de nossa comparação – podem ser não-integráveis. Por outro lado os correspondentes sistemas quânticos de origem são estudados a partir da resolução do problema de autovalores e autovetores, associado ao operador hamiltoniano quântico H . Na prática, este problema é resolvido numericamente para valores grandes, mas finitos, do número quântico de spin S . Como vimos que sistemas quânticos com N e S finitos são sempre integráveis, devemos questionar a validade desta comparação. A afirmação desta validade comprova-se em última instância pelos resultados obtidos nos dois regimes, como veremos na Parte II deste texto. A partir deste questionamento, entretanto, torna-se desejável que tenhamos algum acesso e/ou controle sobre a região semiclássica (\hbar pequeno, mas não nulo), entre o limite clássico extremo e acabado ($S \rightarrow \infty$) e o regime quântico prático (S grande, mas finito). Este ponto será explorado no capítulo 3, tomando-se estados coerentes para spins como instrumento para chegarmos ao limite clássico dos sistemas quânticos originais H_2 e H_3 . Veremos, então, que este procedimento permite-nos o acesso a correções semiclássicas, além da obtenção do limite clássico em si.

2.3 Integrabilidade nos modelos de Heisenberg de poucos spins

Nesta última seção apresentaremos um resumo das propriedades dos modelos que estudamos relativamente aos tópicos tratados neste capítulo. Estas proprie-

dades serão consideradas mais detalhadamente na Parte II, aparecendo aqui como ilustração das seções anteriores e também como primeiro indicador do cenário em que nos deteremos.

2.3.1 Modelo de Heisenberg de dois spins

O hamiltoniano para o modelo de Heisenberg de dois spins quânticos escreve-se como

$$H_2 = J(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \sigma S_1^z S_2^z). \quad (2.40)$$

A dois spins correspondem dois graus de liberdade, logo o espaço de fase associado ao sistema de dois spins clássicos possui quatro dimensões. Além da energia E , a componente z do spin total $\mathcal{T}_2 = \mathcal{S}_1 + \mathcal{S}_2$ é constante de movimento. Portanto, o movimento do sistema clássico restringe-se a duas dimensões no espaço de fase. Conclui-se, então, que o modelo clássico é integrável para qualquer valor do parâmetro de anisotropia σ . O sistema quântico por sua vez tem associado a si um espaço de Hilbert de dimensão $(2S_1 + 1)(2S_2 + 1)$ e os operadores quânticos H e T_2^z também correspondem a constantes de movimento:

$$[T_2^z, H_2] = 0. \quad (2.41)$$

2.3.2 Modelo de Heisenberg de três spins

Para este modelo o hamiltoniano escreve-se como

$$H_3 = J \sum_{l=1}^3 (\mathbf{S}_l \cdot \mathbf{S}_{l+1} + \sigma S_l^z S_{l+1}^z). \quad (2.42)$$

Neste caso a dinâmica clássica apresenta maior variedade de regimes. Em princípio o espaço de fase clássico possui seis dimensões. Uma das variáveis que descrevem o movimento pode ser eliminada, usando-se a constância da energia E . Para $\sigma = 0$ as componentes T_3^x, T_3^y e T_3^z de $\mathcal{T}_3 = \mathcal{S}_1 + \mathcal{S}_2 + \mathcal{S}_3$ são constantes de movimento, o que se verifica calculando-se os parênteses de Poisson

$$\{T_3^\alpha, \mathcal{H}\} = 0 \quad (2.43)$$

para $\alpha = x, y, z$. Assim, o movimento restringe-se a uma superfície bidimensional do espaço de fase, o que implica na integrabilidade do sistema para $\sigma = 0$. Para $\sigma \neq 0$, E e T_3^z continuam constantes de movimento, mas T_3^x e T_3^y não. O movimento acontece, então, num espaço de quatro dimensões. K. Nakamura *et al.* [16] mostraram que, neste caso $\sigma \neq 0$, o sistema clássico é não-integrável, apresentando regiões do intervalo finito de energia permitido com movimento regular, caótico ou ambos. Com respeito ao sistema quântico de três spins, os operadores quânticos correspondentes às constantes de movimento clássicas comportam-se analogamente,

tanto no caso $\sigma = 0$ como no caso $\sigma \neq 0$. O espaço de Hilbert associado possui neste caso dimensão $(2S_1 + 1)(2S_2 + 1)(2S_3 + 1)$.

* * *

Estabelecidos os conceitos de integrabilidade clássica e quântica para sistemas de spins, vamos apresentar e utilizar, no próximo capítulo, um procedimento que nos permitirá a obtenção do limite clássico para os sistemas de Heisenberg de dois e três spins.

Capítulo 3

O limite clássico para os sistemas de Heisenberg

Neste capítulo investigaremos o limite clássico para os modelos representados pelos hamiltonianos quânticos H_2 e H_3 . O objetivo está na obtenção, de forma construtiva, de expressões para as hamiltonianas clássicas \mathcal{E}_2 e \mathcal{E}_3 correspondentes ao limite clássico dos modelos H_2 e H_3 e, ao mesmo tempo, consistentes com as hamiltonianas para spins clássicos \mathcal{H}_2 e \mathcal{H}_3 , como apresentados no capítulo anterior. Estaremos, então, aptos a aplicar aos sistemas de spins clássicos e quânticos de nosso interesse as definições e técnicas utilizadas nos estudo de integrabilidade em sistemas dinâmicos. Para tanto, daremos os seguintes passos. Já nesta introdução, apresentaremos uma pequena discussão sobre a existência e legitimação – do ponto de vista da física dos sistemas – do limite clássico para os sistemas de Heisenberg. A seguir, passaremos à obtenção das expressões para \mathcal{E}_2 e \mathcal{E}_3 , fazendo uso de um procedimento que nos permite avaliar os elementos de matriz $\langle \Omega | H | \Omega \rangle$ através da aplicação do princípio variacional dependente do tempo. Para isso utilizaremos a representação de estados coerentes para os estados $|\Omega\rangle$ e algumas de suas propriedades. Finalmente tomaremos o limite clássico para as expressões fornecidas pelo princípio variacional, obtendo as hamiltonianas clássicas \mathcal{E}_2 e \mathcal{E}_3 .

* * *

O sistema de spins clássicos correspondente ao modelo de Heisenberg com N spins é representado, na linguagem do capítulo 2, como

$$\mathcal{H}_N = J \sum_{l=1}^N (\mathcal{S}_l \cdot \mathcal{S}_{l+1} + \sigma \mathcal{S}_l^z \mathcal{S}_{l+1}^z). \quad (3.1)$$

O procedimento para a obtenção desta hamiltoniana clássica, como limite do hamiltoniano quântico do modelo, foi formulado por M.E. Fisher [34] em 1964 e pode ser resumido pela seguinte prescrição. Define-se novos operadores quânticos

$$\mathbf{s}_l = \frac{\mathbf{S}_l}{\hbar\sqrt{S(S+1)}} \quad (3.2)$$

e toma-se o limite $S \rightarrow \infty$. Com esta prescrição, as relações de comutação entre as componentes de um dado spin ficam

$$[s_l^\alpha, s_l^\beta] = i\epsilon^{\alpha\beta\gamma} \frac{s_l^\gamma}{\sqrt{S(S+1)}}, \quad (3.3)$$

que se anulam no limite $S \rightarrow \infty$.

Assim, o hamiltoniano quântico

$$H_N = J \sum_{l=1}^N (\mathbf{S}_l \cdot \mathbf{S}_{l+1} + \sigma S_l^z S_{l+1}^z). \quad (3.4)$$

pode ser reescrito como

$$H_N = J\hbar^2 S(S+1) \sum_{l=1}^N (\mathbf{s}_l \cdot \mathbf{s}_{l+1} + \sigma s_l^z s_{l+1}^z). \quad (3.5)$$

Amparados pelo limite $S \rightarrow \infty$ das relações 3.3, podemos obter \mathcal{H}_N a partir de H_N , tomando as componentes S_l^α como variáveis clássicas. A condição para o limite clássico escreve-se, então, como dois limites

$$\hbar \rightarrow 0 \quad S \rightarrow \infty \quad (3.6)$$

sujeitos à relação

$$\hbar\sqrt{S(S+1)} = 1. \quad (3.7)$$

Estas relações, que representam de fato a prescrição original de Fisher com $\hbar = 1$, foram demonstradas para N fixo por K. Millard e H. Leff [35], e descritas e exemplificadas de modo simples e esclarecedor por M. Månson [36].

Neste ponto cabem alguns comentários a respeito do procedimento descrito acima.

Inicialmente notemos que, para $\hbar = 1$, a relação 3.2 implica, no limite $S \rightarrow \infty$, que

$$|\mathbf{s}_l| = 1. \quad (3.8)$$

Ou seja, no sistema clássico os vetores de spin clássicos movem-se sobre a superfície da esfera unitária, podendo ser descritos por variáveis angulares, segundo a relação

$$\mathbf{S}_l = (\text{sen}\theta_l \cos\phi_l, \text{sen}\theta_l \text{sen}\phi_l, \text{cos}\theta_l), \quad (3.9)$$

da mesma maneira que foi apresentada no capítulo 2.

De outra parte impõe-se a questão mais importante da descrição do sistema físico em si: a hamiltoniana \mathcal{H}_N presta-se a esta descrição, ou é meramente um objetivo a ser atingido, como uma função clássica a que se pretende chegar? Mais do que conseguir tal conformação entre as expressões quântica (eq. 3.4) e clássica (eq. 3.1), a prescrição estudada por Fisher e demonstrada por Millard e Leff visava a comparação entre a termodinâmica resultante da função de partição clássica, escrita usando-se \mathcal{H}_N , e a termodinâmica resultante da função de partição quântica, usando-se H_N . A adequação dos resultados fornecidos pela função clássica como limite $S \rightarrow \infty$ da função quântica é, em síntese, a essência da demonstração de Millard e Leff.

Finalmente há a questão prática da escolha das variáveis que descreverão o sistema. A simples substituição dos operadores quânticos \mathbf{S}_i por vetores clássicos \mathcal{S}_i de módulo 1 e a subsequente utilização das variáveis esféricas (eq. 3.9) funcionam no limite clássico extremo e acabado $S \rightarrow \infty$, tendo respaldo em demonstrações rigorosas [37, 38]. Optamos neste trabalho pela utilização da representação de estados coerentes para spins $|\Omega\rangle$ [39] como instrumento para a obtenção do limite clássico dos modelos de Heisenberg. Nesta representação a hamiltoniana clássica do modelo é dada por

$$\mathcal{H}_N = \frac{\langle \Omega | H_N | \Omega \rangle}{\langle \Omega | \Omega \rangle}, \quad (3.10)$$

com subsequente tomada do limite ($\hbar \rightarrow 0, S \rightarrow \infty$), sujeito a $\hbar\sqrt{S(S+1)} = 1$. Do ponto de vista da fundamentação, esta escolha tem apoio em demonstrações igualmente rigorosas e também em sua corrente aplicação [40]. De fato E.H. Lieb [41] demonstrou a equivalência entre este procedimento e a prescrição anterior, ao observar que \mathcal{H}_N é uma função limitante superior para o espectro de autovalores quânticos E^Q :

$$\mathcal{H}_N(\Omega) \geq E^Q, \quad (3.11)$$

a igualdade sendo válida no limite $S \rightarrow \infty$. Usando a representação de ângulos para $|\Omega\rangle$, Lieb mostrou que a função $\mathcal{H}_N(\Omega)$, calculada segundo a eq. 3.10, é aquela que se obtém fazendo-se a substituição

$$\mathbf{S}_i \rightarrow S(\text{sen}\theta_i \cos\phi_i, \text{sen}\theta_i \text{sen}\phi_i, \text{cos}\theta_i) \quad (3.12)$$

para casos simples, entre os quais estão os termos que aparecem nos hamiltonianos de Heisenberg dados de forma generalizada pela expressão 3.4.

A escolha entre a substituição 3.12, mais simples, e o cálculo da expressão 3.10 foi feita tendo-se em vista não somente a obtenção do limite clássico adequado, mas também a análise dos resultados que pretendemos explorar. Como será explicitado no capítulo 4, deste ponto de vista a utilização da representação de estados coerentes oferece algumas vantagens, seja possibilitando correções quânticas de ordem

superior em \hbar , seja possibilitando o estudo de autoestados quânticos individuais, via distribuição de Husimi [6, 7].

3.1 Hamiltonianas clássicas \mathcal{E}_2 e \mathcal{E}_3

3.1.1 O princípio variacional para estados não normalizados e a parametrização complexa

Apresentaremos nesta subsecção um esquema que se vale do princípio variacional dependente do tempo, e parametrização complexa, para a formulação do problema quântico representado pela equação de Schrödinger. Como veremos, este esquema permite que esta formulação seja feita dentro de uma estrutura dita “clássica”, no sentido de que é análoga à formulação hamiltoniana para a dinâmica clássica. Será uma apresentação sucinta e que acompanha o desenvolvimento feito em detalhe por P. Kramer e M. Saraceno [42] e M.T. dos Santos [13] – obras das quais tomamos emprestado o título desta subsecção.

O princípio variacional dependente do tempo é formulado a partir da ação

$$\mathcal{I}' = \int_{t_1}^{t_2} dt \mathcal{L}'(\psi, \bar{\psi}), \quad (3.13)$$

onde a lagrangeana para o sistema é escrita em termos da função de onda ψ e de seu complexo conjugado $\bar{\psi}$ como

$$\mathcal{L}'(\psi, \bar{\psi}) = \left\langle \psi \left| i\hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right| \psi \right\rangle. \quad (3.14)$$

Para estados normalizados $|\psi\rangle$ do espaço de Hilbert associado ao sistema estudado, a condição de extremo $\delta\mathcal{I}' = 0$ fornece corretamente a equação de Schrödinger dependente do tempo. Para a construção da estrutura clássica que temos em vista, convém relaxar a condição de normalização dos estados $|\psi\rangle$ e retomá-la após aplicação do princípio variacional. Neste caso escreve-se a lagrangeana como

$$\mathcal{L}(\psi, \bar{\psi}) = \frac{i\hbar \langle \psi | \dot{\psi} \rangle - \langle \dot{\psi} | \psi \rangle}{2} - \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (3.15)$$

A adequação desta forma é atestada, em última instância, pela equação de Schrödinger que resulta corretamente da aplicação das condições de extremo $\delta\mathcal{I}' = 0$ e posteriormente de normalização $\langle \psi | \psi \rangle = 1$.

No caso em que o estado quântico $|\psi\rangle$, não normalizado, é parametrizado por N números complexos z_1, z_2, \dots, z_N ,

$$|\psi(t)\rangle = |\psi(z_1(t), z_2(t), \dots, z_N(t))\rangle, \quad (3.16)$$

e $\psi(t)$ possui derivadas parciais de primeira e segunda ordem bem definidas nos parâmetros z_l e \bar{z}_l , o princípio variacional permite o estabelecimento de um arcabouço clássico, constituído por uma função hamiltoniana clássica \mathcal{H} , um espaço de fase clássico dado por $z_l(t)$ e $\bar{z}_l(t)$ (ou, por outra, através de $Re(z_l)$ e $Im(z_l)$) e, finalmente, por parênteses de Poisson generalizados. Dentro deste contexto o problema – ainda quântico – pode ser tratado usando-se, formalmente, as regras da formulação hamiltoniana clássica. Para tanto, assumimos que é inversível a matriz C definida por

$$C_{lj}(z, \bar{z}) = \frac{\partial^2}{\partial z_l \partial \bar{z}_j} \ln \langle \psi | \psi \rangle, \quad (3.17)$$

onde $z \equiv (z_1, z_2, \dots, z_N)$ e os parâmetros z_l e \bar{z}_l são tomados como variáveis independentes. Neste caso podemos definir parênteses de Poisson generalizados entre as funções $f(z, \bar{z})$ e $g(z, \bar{z})$ como

$$\{f, g\}_{(z, \bar{z})} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial z} & \frac{\partial f}{\partial \bar{z}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -(C^{-1})^t \\ C^{-1} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\partial g}{\partial z} \\ \frac{\partial g}{\partial \bar{z}} \end{bmatrix}, \quad (3.18)$$

em que as matrizes estão escritas em forma de blocos e o índice t significa transposição. Com estas definições e hipóteses, mostra-se que a imposição do princípio variacional gera equações de movimento para os parâmetros z_j dadas por [42]

$$\begin{aligned} \dot{z}_j &= i \{ \mathcal{H}, z_j \} \\ \dot{\bar{z}}_j &= i \{ \mathcal{H}, \bar{z}_j \}, \end{aligned} \quad (3.19)$$

onde

$$\mathcal{H} = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (3.20)$$

Esta associação (eq. 3.20) é mais geral. Dado um operador O que atua sobre os vetores de estado $|\psi\rangle$ do espaço de Hilbert, podemos associar-lhe a função clássica \mathcal{O} das variáveis z e \bar{z} , através de

$$\mathcal{O} = \frac{\langle \psi | O | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}. \quad (3.21)$$

A evolução temporal desta função é gerada por \mathcal{H} e dada, em termos dos parênteses de Poisson generalizados, por

$$\frac{d\mathcal{O}}{dt} = \{ \mathcal{O}, \mathcal{H} \}. \quad (3.22)$$

Antes de fecharmos esta subsecção impõem-se dois comentários, importantes para nossos objetivos. Note-se inicialmente que há duas quantidades relevantes na construção esboçada acima: a matriz C dada, em suma, pelo conjunto de estados $|\psi\rangle$, e a função clássica \mathcal{H} . Uma vez calculadas estas quantidades, o problema quântico pode ser tratado formalmente como um problema clássico. De fato, a matriz C

proporciona, através dos parênteses de Poisson, uma regra para se calcular relações e taxas de variação sobre o espaço de fase dado por z e \bar{z} ; \mathcal{H} , por sua vez, responde pela geração da evolução temporal do sistema. Esta estrutura – espaço de fase, parênteses de Poisson e hamiltoniana \mathcal{H} – configura um sistema dinâmico clássico, onde se refazem consistentemente todas as relações que compõem a estrutura simplética característica de sistemas hamiltonianos, como identidade de Jacobi e propriedade de antissimetria dos parênteses de Poisson, entre outras [42]. Assim, o princípio variacional transferiu o problema quântico do espaço de Hilbert dos vetores de estado para um espaço de fase generalizado, onde o movimento é descrito por equações de Hamilton escritas com base em parênteses de Poisson generalizados. Entretanto, é importante ter-se em mente que esta construção ainda *não* representa o limite clássico $\hbar \rightarrow 0$. Em verdade, não foi levado a cabo nenhum processo de limite. Tudo o que foi feito resume-se a uma formulação clássica, baseada num processo aproximativo, de um problema que, até o momento, permanece essencialmente quântico.

Ademais, observe-se que o princípio variacional dependente do tempo sempre oferece uma resposta aproximada, cuja qualidade depende obviamente do conjunto de estados $|\psi\rangle$ usado. Este conjunto, quase sempre um subconjunto dos vetores de estado do espaço de Hilbert, pode ser escolhido convenientemente, seja por considerações a respeito da física do problema, seja por maior facilidade prática de aplicação do princípio (no limite em que este conjunto gere todo o espaço de Hilbert, o princípio variacional fornecerá apropriadamente a equação de Schrödinger). Para os sistemas de Heisenberg que estamos investigando, refaremos o esquema clássico acima, usando o conjunto de estados coerentes para spins. Nesta escolha as duas razões apresentadas atuam de maneira associada, inserindo este esquema no contexto do trabalho de L.G. Yaffe [43], como veremos. Na prática, pelo conhecimento na manipulação dos estados coerentes e também porque o contexto de Yaffe pede sua utilização; e por considerações físicas, sobretudo, na medida em que o autor mostra como e em que sentido se obtém um limite clássico adequado aos resultados físicos sobre o sistema em questão. Isto posto, apresentaremos nas próximas subseções como se define e como utilizaremos a representação de estados coerentes para a descrição clássica proporcionada pelo princípio variacional.

3.1.2 Estados coerentes para spins

O interesse na utilização de estados coerentes como instrumento de trabalho na caracterização e obtenção de resultados de sistemas quânticos pode ser sinalizado por três balizas do formalismo da mecânica quântica. Primeiramente, o conjunto de estados coerentes de um dado sistema cumpre, com sobras, o papel de gerador dos vetores de estado do espaço de Hilbert associado ao sistema. Em segundo lugar, os operadores quânticos têm nos elementos de matriz $\langle \Omega | O | \Omega' \rangle$ uma representação bem definida. Por fim, há a associação natural entre a representação oferecida pelos

estados coerentes e o limite clássico, através da minimização da desigualdade contida na relação de incerteza de Heisenberg. Esta associação – não observada na maioria das representações por autoestados de operadores hermiteanos – constitui um dos motivos de nosso interesse no uso desta representação.

Os pontos apenas esboçados no parágrafo anterior, bem como outras propriedades dos estados coerentes, podem ser encontrados em várias fontes. Citamos aqui a ótima introdução contida no livro de J.R. Klauder e E.C.G. Sudarshan [44], a apresentação extensiva e sistemática feita por A. Perelomov [45] e a revisão e compilação de artigos correlatos feitas por J.R. Klauder e B.-S. Skagerstam [40]. Apresentaremos apenas um pequeno formulário e um breve resumo das propriedades dos estados coerentes, particularizados para estados coerentes de spins como introduzidos por J.M. Radcliffe [39]. Este apanhado de resultados obviamente não é completo, restringindo-se àqueles resultados de que necessitaremos para calcular as hamiltonianas clássicas para os sistemas de Heisenberg de nosso interesse, \mathcal{H}_2 e \mathcal{H}_3 . Tampouco é rigoroso; os resultados que seguem estão discutidos em detalhe nas obras citadas acima [44, 45, 40].

ESTADOS COERENTES PARA SPINS. Os estados coerentes para spins são calculados a partir da ação dos operadores S^+ , S^- , S^z , geradores do grupo $SU(2)$ ¹, sobre os estados de spins usuais $|S, m\rangle$. Estes operadores e estados quânticos satisfazem as conhecidas relações

$$(\mathbf{S})^2 |S, m\rangle = S(S+1)\hbar^2 |S, m\rangle \quad (3.23)$$

$$S^z |S, m\rangle = m\hbar |S, m\rangle \quad (3.24)$$

$$S^\pm |S, m\rangle = \sqrt{S(S+1) - m(m \pm 1)}\hbar |S, m \pm 1\rangle \quad (3.25)$$

$$[S^+, S^-] = 2\hbar S^z \quad (3.26)$$

$$[S^z, S^\pm] = \pm\hbar S^\pm \quad (3.27)$$

em que S é o número quântico de spin associado a $(\mathbf{S})^2$, e m é o número quântico associado à componente S^z de \mathbf{S} , assumindo os $2S+1$ possíveis valores $m = S, S-1, \dots, -S+1, -S$. Ao longo dos cálculos faremos sempre $\hbar = 1$.

Com estas relações os estados coerentes para um spin podem ser parametrizados no plano complexo e escritos como

$$|z\rangle = e^{\bar{z}S^+} |S, -S\rangle \quad (z \text{ complexo}), \quad (3.28)$$

cuja norma vale

$$\langle z|z\rangle = (1 + |z|^2)^{2S}. \quad (3.29)$$

¹Para uma apresentação baseada em representações do grupo $SU(2)$, ver especialmente o capítulo 4 do livro de A. Perelomov [45].

RESOLUÇÃO DO OPERADOR IDENTIDADE. Vale a relação

$$\int |z\rangle \langle z| \mathcal{D}z = \mathbf{1}, \quad (3.30)$$

onde

$$\mathcal{D}z = \frac{2S + 1}{\pi} \frac{d(\text{Re}(z))d(\text{Im}(z))}{(1 + |z|^2)^2}. \quad (3.31)$$

Como conseqüência formal da resolução do operador identidade, temos que, para quaisquer estado $|\psi\rangle$ e operador O quântico,

$$|\psi\rangle = \int |z\rangle \langle z|\psi\rangle \mathcal{D}z \quad (3.32)$$

e

$$O = \int |z\rangle \langle z|O|z'\rangle \langle z'| \mathcal{D}z\mathcal{D}z'. \quad (3.33)$$

REPRESENTAÇÃO DE ESTADOS E OPERADORES QUÂNTICOS. Como sugerem as equações 3.32 e 3.33, o conjunto dos estados coerentes é completo, gerando todos os vetores de estado $|\psi\rangle$ do espaço de Hilbert associado ao sistema de spins em questão e permitindo também a obtenção dos elementos de matriz $O(z, z') = \langle z|O|z'\rangle$. Mais interessante, argumentos sobre a analiticidade das funções $\psi(z) = \langle z|\psi\rangle$ e $O(z, z') = \langle z|O|z'\rangle$ garantem que estas representações estão bem definidas.

Para os operadores, em especial, estes argumentos garantem que podem ser representados sem ambigüidade por seus elementos diagonais tão somente. Assim, o operador O é unicamente especificado pela função

$$O(z) = \langle z|O|z\rangle. \quad (3.34)$$

REPRESENTAÇÕES DIFERENCIAIS. Os operadores S^+ , S^- e S^z , particularmente, admitem uma representação por operadores diferenciais:

$$\langle z|S^+|\psi\rangle = \left(-z^2 \frac{d}{dz} + 2Sz\right) \langle z|\psi\rangle \quad (3.35)$$

$$\langle z|S^-|\psi\rangle = \frac{d}{dz} \langle z|\psi\rangle \quad (3.36)$$

$$\langle z|S^z|\psi\rangle = \left(z \frac{d}{dz} - S\right) \langle z|\psi\rangle. \quad (3.37)$$

Portanto, usando a relação 3.29, temos

$$\frac{\langle z | S^+ | z \rangle}{\langle z | z \rangle} = \frac{2Sz}{1 + |z|^2} \quad (3.38)$$

$$\frac{\langle z | S^- | z \rangle}{\langle z | z \rangle} = \frac{2S\bar{z}}{1 + |z|^2} \quad (3.39)$$

$$\frac{\langle z | S^z | z \rangle}{\langle z | z \rangle} = -S \frac{1 - |z|^2}{1 + |z|^2}. \quad (3.40)$$

Apenas como observação, anotamos aqui que os estados coerentes admitem outras parametrizações além dos números complexos. Numa parametrização pelos ângulos das coordenadas esféricas [39], pode-se mostrar, como fez E.H. Lieb [41], que as componentes S^x , S^y e S^z do operador quântico \mathbf{S} são representadas por

$$\begin{aligned} S^x &\equiv \frac{\langle \theta, \phi | S^x | \theta, \phi \rangle}{\langle \theta, \phi | \theta, \phi \rangle} = S \operatorname{sen} \theta \cos \phi \\ S^y &\equiv \frac{\langle \theta, \phi | S^y | \theta, \phi \rangle}{\langle \theta, \phi | \theta, \phi \rangle} = S \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen} \phi \\ S^z &\equiv \frac{\langle \theta, \phi | S^z | \theta, \phi \rangle}{\langle \theta, \phi | \theta, \phi \rangle} = S \cos \theta. \end{aligned} \quad (3.41)$$

3.1.3 Estados coerentes e a estrutura clássica para os sistemas de spins (expressões para \mathcal{E}_2 e \mathcal{E}_3)

A utilização de estados coerentes para spins, como apresentados na subseção anterior, permite um exemplo particularmente interessante da estrutura clássica apresentada na subseção 3.1.1.

Como vimos, a parametrização do estado $|\psi\rangle$ por N números complexos z_l ($l = 1, 2, \dots, N$) proporciona o conjunto de equações canônicas

$$\begin{aligned} \dot{z}_l &= i \{ \mathcal{H}, z_l \} \\ \dot{\bar{z}}_l &= i \{ \mathcal{H}, \bar{z}_l \}. \end{aligned} \quad (3.42)$$

Para um sistema de N spins, a representação por estados coerentes

$$\begin{aligned} |\psi\rangle = |z\rangle &\equiv |z_1, z_2, \dots, z_N\rangle \\ &= \exp \left[\sum_{l=1}^N \bar{z}_l (S_l^+) \right] | -S_1, -S_2, \dots, -S_N \rangle \end{aligned} \quad (3.43)$$

tem como norma a produtória 3.29

$$\langle z | z \rangle = \prod_{l=1}^N (1 + |z_l|^2)^{2S_l}. \quad (3.44)$$

Assim, a matriz C é dada pelos elementos

$$\begin{aligned} C_{kl} &\equiv \frac{\partial^2}{\partial z_k \partial \bar{z}_l} \ln \langle \psi | \psi \rangle \\ &= \frac{2S_l}{(1 + |z_l|^2)^2} \delta_{kl}. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Usando a eq.3.18, temos

$$\{f, g\}_{(z, \bar{z})} = \sum_{l=1}^N \frac{(1 + |z_l|^2)^2}{2S_l} \left[\frac{\partial f}{\partial \bar{z}_l} \frac{\partial g}{\partial z_l} - \frac{\partial f}{\partial z_l} \frac{\partial g}{\partial \bar{z}_l} \right]. \quad (3.46)$$

Assim,

$$\{\mathcal{H}, \bar{z}_l\} = -\frac{(1 + |z_l|^2)^2}{2S_l} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial z_l} \quad (3.47)$$

e

$$\{\mathcal{H}, z_l\} = \frac{(1 + |z_l|^2)^2}{2S_l} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \bar{z}_l}. \quad (3.48)$$

Portanto, as equações de movimento para z_l e \bar{z}_l escrevem-se como (ver eq. 3.19)

$$\dot{\bar{z}}_l = -i \frac{(1 + |z_l|^2)^2}{2S_l} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial z_l} \quad (3.49)$$

$$\dot{z}_l = i \frac{(1 + |z_l|^2)^2}{2S_l} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \bar{z}_l}.$$

Para vermos com maior clareza a forma das equações de Hamilton em variáveis complexas, tomemos a transformação

$$w_l = \sqrt{\frac{2S_l}{1 + |z_l|^2}} z_l. \quad (3.50)$$

A aplicação desta transformação mostra que estas variáveis formam pares (w_l, \bar{w}_l) de variáveis canonicamente conjugadas, satisfazendo as relações

$$\begin{aligned} \{w_k, \bar{w}_l\}_{(z, \bar{z})} &= \delta_{kl} \\ \{w_k, w_l\}_{(z, \bar{z})} &= 0 \\ \{\bar{w}_k, \bar{w}_l\}_{(z, \bar{z})} &= 0 \end{aligned} \quad (3.51)$$

e as equações de Hamilton

$$\dot{\bar{w}}_l = -i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial w_l} \quad (3.52)$$

$$\dot{w}_l = i \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \bar{w}_l}.$$

Através do princípio variacional e parametrização complexa, temos, portanto, construído uma estrutura clássica que nos permite estudar o estado quântico $|\psi\rangle$, parametrizado pelas variáveis complexas w_l e \bar{w}_l , dentro do formalismo hamiltoniano. Dentro desta estrutura vê-se claramente o papel de gerador da evolução temporal, desempenhado por \mathcal{H} , e também a importância dos parênteses de Poisson generalizados. O espaço de fase é dado nesta estrutura pelas variáveis w e \bar{w} . A forma das equações de movimento obedecidas por w e \bar{w} permite ainda que se represente o espaço de fase (w, \bar{w}) por variáveis reais e canonicamente conjugadas (q, p) . De fato, escrevendo-se as variáveis complexas w como

$$w = \frac{1}{\sqrt{2}}(p + iq), \quad (3.53)$$

obtemos as equações de Hamilton em sua forma mais tradicional

$$\begin{aligned} \dot{q} &= \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial p} \\ \dot{p} &= -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial q}. \end{aligned} \quad (3.54)$$

Além das vantagens que mencionamos ao escolher a representação de estados coerentes, observamos finalmente que ela nos oferece também a possibilidade de utilização de todo o aparato técnico-matemático desenvolvido para o estudo de integrabilidade em sistemas dinâmicos clássicos.

Esta estrutura toda será aplicada a seguir na obtenção de expressões para as funções \mathcal{H}_2 e \mathcal{H}_3 correspondentes, respectivamente, aos sistemas de Heisenberg de dois e três spins. Adiantamos que estaremos interessados predominantemente nos sistemas em que os spins S_l têm o mesmo número quântico S . Sistemas de spins distintos podem ser tratados analogamente, alterando-se apenas, e de modo óbvio, as transformações de variáveis.

Expressão para \mathcal{H}_2 . O hamiltoniano de Heisenberg para o sistema de dois spins escreve-se como

$$H_2 = J(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \sigma S_1^z S_2^z). \quad (3.55)$$

Antes de determinarmos a função \mathcal{H}_2 para este hamiltoniano, convém reescrevê-lo em termos dos operadores S^+ , S^- e S^z :

$$H_2 = J \left[\frac{1}{2} (S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+) + (\sigma + 1) S_1^z S_2^z \right]. \quad (3.56)$$

Os estados coerentes para dois spins ficam (eq. 3.28)

$$|z_1, z_2\rangle = e^{\bar{z}_1 S_1^+ + \bar{z}_2 S_2^+} | -S, -S \rangle \quad (3.57)$$

com norma dada por

$$\langle z_1, z_2 | z_1, z_2 \rangle = (1 + |z_1|^2)^{2S} (1 + |z_2|^2)^{2S}. \quad (3.58)$$

Para determinarmos

$$\mathcal{H}_2 = \frac{\langle z_1, z_2 | H_2 | z_1, z_2 \rangle}{\langle z_1, z_2 | z_1, z_2 \rangle}, \quad (3.59)$$

precisamos calcular os termos que aparecem em H_2 . A aplicação dos resultados contidos nas equações 3.38–3.40 fornece

$$\frac{\langle z_1, z_2 | S_1^+ S_2^- | z_1, z_2 \rangle}{\langle z_1, z_2 | z_1, z_2 \rangle} = \frac{4S^2 z_1 \bar{z}_2}{(1 + |z_1|^2)(1 + |z_2|^2)} \quad (3.60)$$

$$\frac{\langle z_1, z_2 | S_1^- S_2^+ | z_1, z_2 \rangle}{\langle z_1, z_2 | z_1, z_2 \rangle} = \frac{4S^2 \bar{z}_1 z_2}{(1 + |z_1|^2)(1 + |z_2|^2)} \quad (3.61)$$

$$\frac{\langle z_1, z_2 | S_1^z S_2^z | z_1, z_2 \rangle}{\langle z_1, z_2 | z_1, z_2 \rangle} = S^2 \frac{(1 - |z_1|^2)(1 - |z_2|^2)}{(1 + |z_1|^2)(1 + |z_2|^2)}. \quad (3.62)$$

Com estes termos temos

$$\mathcal{H}_2 = JS^2 \left[2 \frac{z_1 \bar{z}_2 + \bar{z}_1 z_2}{(1 + |z_1|^2)(1 + |z_2|^2)} + (\sigma + 1) \frac{(1 - |z_1|^2)(1 - |z_2|^2)}{(1 + |z_1|^2)(1 + |z_2|^2)} \right]. \quad (3.63)$$

Como vimos na seção 2.3, o valor esperado da componente T_2^z do spin total $\mathbf{T}_2 = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$ é constante de movimento. Para referência futura escrevemos também a função clássica \mathcal{T}_2^z associada a T_2^z :

$$\mathcal{T}_2^z \equiv \frac{\langle z_1, z_2 | T_2^z | z_1, z_2 \rangle}{\langle z_1, z_2 | z_1, z_2 \rangle}. \quad (3.64)$$

Usando a eq. 3.40, obtemos

$$\mathcal{T}_2^z = -S \left(\frac{1 - |z_1|^2}{1 + |z_1|^2} + \frac{1 - |z_2|^2}{1 + |z_2|^2} \right). \quad (3.65)$$

Como já vimos, a transformação

$$w_l = \sqrt{\frac{2S_l}{1 + z_l \bar{z}_l}} z_l \quad l = 1, 2 \quad (3.66)$$

permite-nos escrever as equações de Hamilton 3.52. A partir destes pares de variáveis (w_l, \bar{w}_l) , podíamos expressar as equações de movimento em termos de pares de

variáveis canonicamente conjugadas (p_l, q_l) . Para os sistemas que tratamos, entretanto, será mais interessante definir pares (I_l, ϕ_l) de variáveis do tipo ação I_l e ângulo ϕ_l . Isto pode ser feito escrevendo-se as variáveis z_l diretamente como

$$z_l = \sqrt{\frac{S + I_l}{S - I_l}} e^{i\phi_l}. \quad (3.67)$$

Deste modo, todo o campo complexo pode ser representado, restringindo-se a variação de I_l e ϕ_l aos intervalos

$$\begin{aligned} -S &\leq I_l \leq S \\ 0 &\leq \phi_l \leq 2\pi. \end{aligned} \quad (3.68)$$

Como mostrado em detalhe por M.T. dos Santos [13], estes pares (I_l, ϕ_l) também são formados por variáveis canonicamente conjugadas, valendo as correspondentes equações de Hamilton

$$\dot{\phi}_l = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial I_l} \quad (3.69)$$

$$\dot{I}_l = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \phi_l}. \quad (3.70)$$

Substituindo a transformação 3.67 na hamiltoniana 3.63, temos

$$\mathcal{H}_2(I_1, \phi_1; I_2, \phi_2) = J \left[\sqrt{S^2 - I_1^2} \sqrt{S^2 - I_2^2} \cos(\phi_2 - \phi_1) + (\sigma + 1) I_1 I_2 \right]. \quad (3.71)$$

Com esta hamiltoniana já poderíamos estudar a dinâmica do sistema, segundo as equações de movimento 3.69 e 3.70. Entretanto, notemos ainda que, pelo resultado 3.40, temos

$$I_l = -S \frac{1 - |z_l|^2}{1 + |z_l|^2} \quad (3.72)$$

$$= \frac{\langle z_1, z_2 | S_l^z | z_1, z_2 \rangle}{\langle z_1, z_2 | z_1, z_2 \rangle}. \quad (3.73)$$

Como $\langle T_2^z \rangle = \langle S_1^z + S_2^z \rangle$ é constante de movimento, espera-se que $T_2^z = I_1 + I_2$ também o seja. Assim, é interessante fazer uso desta constante de movimento, diminuindo o número de dimensões do espaço de fase em que se dá a evolução temporal das variáveis. Para isto escrevemos as ações I_1 e I_2 como

$$I_1 = \frac{T_2^z}{2} - \frac{I_2 - I_1}{2} \quad (3.74)$$

$$I_2 = \frac{T_2^z}{2} + \frac{I_2 - I_1}{2}. \quad (3.75)$$

Definindo novos pares de variáveis (canonicamente conjugadas)

$$m = \frac{T_2^z}{2S} = \frac{I_1 + I_2}{2S} \quad \phi = \frac{1}{2}(\phi_1 + \phi_2) \quad (3.76)$$

e

$$\eta = \frac{I_2 - I_1}{2S} \quad \alpha = \frac{1}{2}(\phi_2 - \phi_1), \quad (3.77)$$

a hamiltoniana \mathcal{H}_2 fica

$$\mathcal{H}_2(\eta, \alpha; m, \phi) = JS^2 \left[\sqrt{(1-m)^2 - \eta^2} \sqrt{(1+m)^2 - \eta^2} \cos 2\alpha + (\sigma + 1)(m^2 - \eta^2) \right]. \quad (3.78)$$

Para estas variáveis finais os intervalos de variação são

$$\begin{aligned} -1 \leq m \leq 1 \quad 0 \leq \phi \leq 2\pi \\ -1 \leq \eta \leq 1 \quad -\pi \leq \alpha \leq \pi. \end{aligned} \quad (3.79)$$

Para nos certificarmos de que (η, α) e (m, ϕ) podem ser pares de variáveis canonicamente conjugadas, basta-nos calcular as equações de movimento. Como exemplo, calculemos $\frac{d\eta}{dt}$.

$$\begin{aligned} \frac{d\eta}{dt} &= \frac{1}{2S} \left(\frac{dI_2}{dt} - \frac{dI_1}{dt} \right) \\ &= -\frac{1}{2S} \left(\frac{\partial \mathcal{H}_2}{\partial \phi_2} - \frac{\partial \mathcal{H}_2}{\partial \phi_1} \right). \end{aligned} \quad (3.80)$$

Mas

$$\frac{\partial \mathcal{H}_2}{\partial \alpha} = \frac{\partial \mathcal{H}_2}{\partial \phi_2} - \frac{\partial \mathcal{H}_2}{\partial \phi_1}. \quad (3.81)$$

Redefinindo a variável temporal por um fator multiplicativo, $t' = \frac{t}{2S}$, temos

$$\frac{d\eta}{dt'} = -\frac{\partial \mathcal{H}_2}{\partial \alpha}. \quad (3.82)$$

Analogamente pode-se mostrar que

$$\dot{\alpha} = \frac{\partial \mathcal{H}_2}{\partial \eta} \quad (3.83)$$

$$\dot{m} = -\frac{\partial \mathcal{H}_2}{\partial \phi} \quad \text{e} \quad \dot{\phi} = \frac{\partial \mathcal{H}_2}{\partial m}, \quad (3.84)$$

onde tomamos derivadas com respeito à variável temporal t' .

Note-se, em particular, que na hamiltoniana dada pela eq. 3.78, a variável ϕ é cíclica, confirmando a constância de sua ação conjugada m . Como por definição $m = \frac{T_2^z}{2S}$, temos que T_2^z é constante de movimento, como esperado. Este é um fato a ser levado em conta na análise clássica que faremos, e do qual tiraremos proveito.

Como último comentário, anotamos que a transformação das variáveis $(I_1, \phi_1; I_2, \phi_2)$ para $(\eta, \alpha; m, \phi)$ foi feita, obviamente, para explorarmos a constante de movimento m . De resto, as variáveis (I_l, ϕ_l) são suficientemente adequadas para o estudo da dinâmica clássica dada pela hamiltoniana \mathcal{H}_2 .

Expressão para \mathcal{H}_3 . Para obtermos a função \mathcal{H}_3 correspondente ao hamiltoniano de Heisenberg para três spins

$$H_3 = J \sum_{l=1}^3 (\mathbf{S}_l \cdot \mathbf{S}_{l+1} + \sigma S_l^z S_{l+1}^z), \quad (3.85)$$

seguimos os mesmos passos apresentados para o caso de dois spins. De fato, H_3 pode ser visto como a soma

$$H_3 = \sum_{l=1}^3 h_{l,l+1}, \quad (3.86)$$

em que cada $h_{l,l+1}$ é um hamiltoniano de Heisenberg de dois spins. Assim como fizemos anteriormente, escrevemos

$$h_{l,l+1} = J \left[\frac{1}{2} (S_l^+ S_{l+1}^- + S_l^- S_{l+1}^+) + (\sigma + 1) S_l^z S_{l+1}^z \right] \quad (3.87)$$

e avaliamos a função

$$\aleph_{l,l+1} \equiv \frac{\langle z_1, z_2, z_3 | h_{l,l+1} | z_1, z_2, z_3 \rangle}{\langle z_1, z_2, z_3 | z_1, z_2, z_3 \rangle}, \quad (3.88)$$

com estados coerentes para três spins dados por

$$|z_1, z_2, z_3\rangle = e^{\bar{z}_1 S_1^+ + \bar{z}_2 S_2^+ + \bar{z}_3 S_3^+} | -S, -S, -S \rangle. \quad (3.89)$$

Como os operadores presentes em cada $h_{l,l+1}$ atuam somente sobre dois dos três índices do produto tensorial $|z_1, z_2, z_3\rangle$, resulta que $\aleph_{l,l+1}$ reproduz, com índices apropriados, a função \mathcal{H}_2 do caso de dois spins. Logo,

$$\mathcal{H}_3 = \sum_{l=1}^3 \aleph_{l,l+1} \quad (3.90)$$

com

$$\aleph_{l,l+1} = JS^2 \left[2 \frac{z_l \bar{z}_{l+1} + \bar{z}_l z_{l+1}}{(1 + |z_l|^2)(1 + |z_{l+1}|^2)} + (\sigma + 1) \frac{(1 - |z_l|^2)(1 - |z_{l+1}|^2)}{(1 + |z_l|^2)(1 + |z_{l+1}|^2)} \right]. \quad (3.91)$$

Também neste caso faremos uso do fato de que o valor esperado da componente T_3^z do spin total $\mathbf{T}_3 = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3$ é constante de movimento, como adiantado na seção 2.3. O análogo clássico neste caso acompanha aquele do caso dois spins

$$\mathcal{T}_3^z \equiv \frac{\langle z_1, z_2, z_3 | T_3^z | z_1, z_2, z_3 \rangle}{\langle z_1, z_2, z_3 | z_1, z_2, z_3 \rangle} \quad (3.92)$$

$$= -S \sum_{l=1}^3 \frac{1 - |z_l|^2}{1 + |z_l|^2}. \quad (3.93)$$

A mesma transformação 3.67

$$z_l = \sqrt{\frac{S + I_l}{S - I_l}} e^{i\phi_l} \quad (3.94)$$

com

$$\begin{aligned} -S &\leq I_l \leq S \\ 0 &\leq \phi_l \leq 2\pi. \end{aligned} \quad (3.95)$$

fornece

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_3(I_1, \phi_1; I_2, \phi_2, I_3, \phi_3) &= J \sum_{l=1}^3 \left[\sqrt{S^2 - I_l^2} \sqrt{S^2 - I_{l+1}^2} \cos(\phi_{l+1} - \phi_l) + \right. \\ &\quad \left. + (\sigma + 1) I_l I_{l+1} \right]. \end{aligned} \quad (3.96)$$

Analogamente ao caso anterior, $\mathcal{T}_3^z = I_1 + I_2 + I_3$. Para tirarmos proveito da esperada constância de \mathcal{T}_3^z , escrevemos as variáveis I_l como

$$I_1 = \frac{\mathcal{T}_3^z}{3} - \frac{2I_2 - I_3 - I_1}{3} - \frac{2I_3 - I_2 - I_1}{3} \quad (3.97)$$

$$I_2 = \frac{\mathcal{T}_3^z}{3} + \frac{2I_2 - I_3 - I_1}{3} \quad (3.98)$$

$$I_3 = \frac{\mathcal{T}_3^z}{3} + \frac{2I_3 - I_2 - I_1}{3} \quad (3.99)$$

e transformamos o conjunto $(I_1, \phi_1; I_2, \phi_2; I_3, \phi_3)$ no conjunto $(\eta, \alpha; \gamma, \beta; m, \phi)$ através das definições

$$m = \frac{\mathcal{T}_3^z}{3S} = \frac{I_1 + I_2 + I_3}{3S} \quad \phi = \frac{1}{3}(\phi_1 + \phi_2 + \phi_3) \quad (3.100)$$

$$\eta = \frac{2I_2 - I_3 - I_1}{3S} \quad \alpha = \frac{1}{3}(\phi_2 - \phi_1) \quad (3.101)$$

$$\gamma = \frac{2I_3 - I_2 - I_1}{3S} \quad \beta = \frac{1}{3}(\phi_3 - \phi_1). \quad (3.102)$$

As restrições 3.95 para a validade dos I_l e ϕ_l implicam em

$$\begin{aligned}
 -1 \leq m \leq 1 & \quad 0 \leq \phi \leq 2\pi \\
 -\frac{4}{3} \leq \eta \leq \frac{4}{3} & \quad -\frac{2\pi}{3} \leq \alpha \leq \frac{2\pi}{3} \\
 -\frac{4}{3} \leq \gamma \leq \frac{4}{3} & \quad -\frac{2\pi}{3} \leq \beta \leq \frac{2\pi}{3}.
 \end{aligned} \tag{3.103}$$

Substituindo estas variáveis finais na expressão 3.96 para \mathcal{H}_3 , temos

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H}_3 = JS^2 & \left\{ \left[1 - (m - \eta - \gamma)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \left[1 - (m + \eta)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \cos 3\alpha + \right. \\
 & + \left[1 - (m + \eta)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \left[1 - (m + \gamma)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \cos 3(\beta - \alpha) + \\
 & + \left[1 - (m + \gamma)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \left[1 - (m - \eta - \gamma)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \cos 3\beta + \\
 & \left. + (\sigma + 1) \left[3m^2 - (\eta^2 + \gamma^2 + \eta\gamma) \right] \right\}.
 \end{aligned} \tag{3.104}$$

Novamente, cálculo análogo àquele feito para as equações de movimento geradas por \mathcal{H}_2 mostra que os pares (m, ϕ) , (η, α) e (γ, β) são formados por variáveis canonicamente conjugadas, satisfazendo

$$\dot{m} = -\frac{\partial \mathcal{H}_3}{\partial \phi} \quad \dot{\phi} = \frac{\partial \mathcal{H}_3}{\partial m} \tag{3.105}$$

$$\dot{\eta} = -\frac{\partial \mathcal{H}_3}{\partial \alpha} \quad \dot{\alpha} = \frac{\partial \mathcal{H}_3}{\partial \eta} \tag{3.106}$$

$$\dot{\gamma} = -\frac{\partial \mathcal{H}_3}{\partial \beta} \quad \dot{\beta} = \frac{\partial \mathcal{H}_3}{\partial \gamma}. \tag{3.107}$$

Para estas últimas equações, as derivações temporais são tomadas relativamente à variável t' dada por $t' = \frac{t}{3S}$, como se poderia antever.

* * *

Terminamos este capítulo com três comentários sobre o limite clássico em si.

Como havíamos antecipado no final da subsecção 3.1.1, a estrutura clássica construída até aqui (espaço de fase, parênteses de Poisson e hamiltoniana clássica) ainda não representa o limite clássico dos modelos. Falta-nos explorar os limites $\hbar \rightarrow 0$ e $S \rightarrow \infty$. No ponto em que estamos, temos um exemplo da estrutura clássica ao

qual se aplica o tratamento desenvolvido por L.G. Yaffe [43]. Este tratamento diz respeito a sistemas, como os sistemas de spins, sensíveis a um dado parâmetro N e que admitem uma expansão em potências de $\frac{1}{N}$. Yaffe mostra que, para esses sistemas, o limite clássico adequado é obtido no limite em que o parâmetro N tende a infinito, quando flutuações de natureza quântica tornam-se desprezíveis. Esta afirmativa baseia-se na seguinte expansão, escrita na representação de estados coerentes para estes modelos [6, 43],

$$\frac{\langle z|AB|z\rangle}{\langle z|z\rangle} = \frac{\langle z|A|z\rangle}{\langle z|z\rangle} \frac{\langle z|B|z\rangle}{\langle z|z\rangle} + O\left(\frac{1}{N}\right) + \dots \quad (3.108)$$

Note-se que, além do limite clássico, oferece-se a possibilidade de correções de ordem $\frac{1}{N}$ para o produto entre os operadores A e B . Exemplos de sistemas que admitem este tipo de expansão podem ser encontrados também no modelo de Lipkin [46] e no modelo de emparelhamento [13]. No caso dos modelos de Heisenberg, o parâmetro N é dado pelo número quântico S e pode ser mostrado que o limite $S \rightarrow \infty$ conduz ao limite clássico adequado no sentido, descrito por Yaffe, de que a dinâmica gerada pela estrutura clássica construída é equivalente ao limite $S \rightarrow \infty$ do sistema quântico. Isto concorda com as condições descritas pelas eqs. 3.6 e 3.7:

$$\hbar \rightarrow 0, \quad (3.109)$$

$$S \rightarrow \infty \quad (3.110)$$

e

$$\hbar\sqrt{S(S+1)} = 1. \quad (3.111)$$

Como temos usado $\hbar = 1$, é natural que nas expressões para \mathcal{H}_2 e \mathcal{H}_3 (eqs. 3.78 e 3.104) tenha aparecido o fator JS^2 , onde deveríamos ter $J\hbar^2S^2$. Portanto, aplicar a condição $\hbar\sqrt{S(S+1)} = 1$ é equivalente a escalar as expressões para \mathcal{H}_2 e \mathcal{H}_3 por S^2 .

Ficamos, finalmente, com as seguintes expressões para as hamiltonianas clássicas

$$\mathcal{E}_2 = J \left[\sqrt{(1-m)^2 - \eta^2} \sqrt{(1+m)^2 - \eta^2} \cos 2\alpha + (\sigma+1)(m^2 - \eta^2) \right] \quad (3.112)$$

²Escalar as hamiltonianas por S^2 ou $S(S+1)$ é apenas uma questão de conveniência, uma vez que

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0, S \rightarrow \infty} \frac{\hbar^2 S(S+1)}{\hbar^2 S^2} = 1.$$

e

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}_3 = J \left\{ & \left[1 - (m - \eta - \gamma)^2\right]^{\frac{1}{2}} \left[1 - (m + \eta)^2\right]^{\frac{1}{2}} \cos 3\alpha + \right. \\
& + \left[1 - (m + \eta)^2\right]^{\frac{1}{2}} \left[1 - (m + \gamma)^2\right]^{\frac{1}{2}} \cos 3(\beta - \alpha) + \\
& + \left[1 - (m + \gamma)^2\right]^{\frac{1}{2}} \left[1 - (m - \eta - \gamma)^2\right]^{\frac{1}{2}} \cos 3\beta + \\
& \left. + (\sigma + 1) \left[3m^2 - (\eta^2 + \gamma^2 + \eta\gamma)\right] \right\}. \tag{3.113}
\end{aligned}$$

Estas hamiltonianas, \mathcal{E}_2 e \mathcal{E}_3 , fornecerão a dinâmica clássica que será confrontada com os resultados obtidos do sistema quântico, como foi estabelecido na Introdução.

Em segundo lugar, retornemos à questão da aplicação a \mathcal{E}_2 e \mathcal{E}_3 da definição de integrabilidade discutida no final da seção 2.1. Ali argumentávamos que esta aplicação somente terá sentido se os limites clássicos \mathcal{E}_2 e \mathcal{E}_3 , obtidos neste capítulo 3 a partir dos hamiltonianos quânticos H_2 e H_3 , corresponderem efetivamente aos sistemas de spins clássicos \mathcal{H}_2 e \mathcal{H}_3 do capítulo 2. A verificação desta correspondência é imediata, se usarmos as substituições

$$I_l = S \cos \theta_l = p_l \tag{3.114}$$

$$\phi_l = q_l \tag{3.115}$$

na hamiltoniana 3.71 para dois spins, obtida via estados coerentes. A expressão resultante destas substituições é idêntica àquela obtida para o sistema de dois spins clássicos, escrevendo-se

$$\mathcal{S}_l \equiv \mathcal{S}(\text{sen} \theta_l \cos \phi_l, \text{sen} \theta_l \text{sen} \phi_l, \cos \theta_l). \tag{3.116}$$

De fato, esta equivalência já estava implícita nas relações 3.41 em que os estados coerentes foram representados por coordenadas esféricas. A mesma justificativa se aplica ao caso de três spins, já que neste caso o hamiltoniano resume-se à soma de três parcelas idênticas a hamiltonianos para o modelo de dois spins.

Por fim, enfatizamos que as órbitas geradas pelas hamiltonianas clássicas \mathcal{E}_2 e \mathcal{E}_3 não devem ser entendidas como representando partículas movendo-se num espaço de fase clássico. Nos casos integráveis, particularmente, as órbitas periódicas geradas dividem-se basicamente em “rotações” e “librações”. Não se depreenda daí que haverá qualquer corpo ou partícula desenvolvendo rotações em torno de algum eixo ou mesmo librações. Estas órbitas representam, isto sim, a evolução temporal de um dado estado do sistema, representado por um ponto $(\alpha, \eta; \beta, \gamma; \phi, m)$ ou $(\alpha, \eta; \phi, m)$ do espaço de fase, segundo a evolução destas variáveis, ditada pela hamiltoniana \mathcal{E}_3 ou \mathcal{E}_2 .

Capítulo 4

Métodos e técnicas de análise

A comparação proposta na Introdução, entre os resultados obtidos dos sistemas quânticos H_2 e H_3 e a dinâmica clássica gerada pelas correspondentes hamiltonianas \mathcal{E}_2 e \mathcal{E}_3 , exige que o tratamento dos modelos seja desenvolvido em dois regimes.

Na prática a aproximação semiclássica é obtida, a partir do sistema quântico, para valores de S grandes, mas finitos. Trata-se, então, de se iniciar pela resolução do problema quântico

$$H |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle. \quad (4.1)$$

Observe-se que, neste regime quântico, estaremos nos atendo somente ao estudo das propriedades relacionadas aos estados estacionários fornecidos pela resolução do problema 4.1. A exploração de propriedades ligadas à dinâmica quântica – comentada no capítulo final – constitui uma linha de pesquisa importante e a ser considerada em trabalhos futuros, mas que não terá lugar neste texto.

Por outro lado, nosso termo de comparação baseia-se no limite clássico, discutido no capítulo anterior e dado pelas hamiltonianas \mathcal{E}_2 e \mathcal{E}_3 . Neste regime clássico as propriedades a serem usadas como referência decorrem essencialmente das soluções do sistema dinâmico, representado em forma genérica pelas $2N$ equações de Hamilton

$$\begin{aligned} \dot{q}_i &= \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial p_i} \\ \dot{p}_i &= -\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial q_i}. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Seguindo a distinção acima, apresentaremos nas duas seções deste capítulo alguns métodos e técnicas a serem utilizados nos capítulos 5–7 durante a manipulação e análise das soluções obtidas dos problemas 4.1 e 4.2. No capítulo 8, final, comentaremos sobre algumas possibilidades adicionais e sugestões para trabalhos futuros.

4.1 Métodos e técnicas para o sistema clássico

Um vasto e sofisticado aparato técnico-matemático tem sido desenvolvido com vistas ao tratamento dos sistemas dinâmicos clássicos em geral, e hamiltonianos em especial. Invariavelmente, entretanto, parte-se de um objeto inicial, as soluções das equações de movimento do sistema dinâmico, sobre o qual são aplicados aqueles resultados, teoremas e técnicas. De modo geral, sistemas do tipo 4.2 dificilmente são resolvidos analiticamente, recorrendo-se quase sempre à integração numérica das equações de movimento. No caso dos sistemas hamiltonianos, estas soluções podem ser escritas e estudadas através das órbitas

$$(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))_{(\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0)} \equiv (q_1(t), p_1(t); q_2(t), p_2(t); \dots; q_N(t), p_N(t)), \quad (4.3)$$

soluções do sistema 4.2 com condições iniciais $(\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0)$. Estas órbitas constituem a matéria prima de que se tem valido no desenvolvimento do aparato mencionado acima e exposto em bons livros textos [4, 5]. Mencionaremos aqui apenas duas características ligadas ao conceito de integrabilidade como exposto no capítulo 2. Sistemas integráveis, com N constantes de movimento independentes e em involução, para o qual todas as órbitas são periódicas, não são a regra entre os sistemas dinâmicos. Ao contrário, em geral os sistemas são não-integráveis, podendo executar movimento periódico em determinadas regiões do espaço de fase, e caótico em outras. Nestas regiões as órbitas são extremamente sensíveis às condições iniciais, divergindo exponencialmente ao longo do tempo e desenvolvendo movimento não-periódico. Outra característica de sistemas não-integráveis está na destruição dos toros invariantes (ver subsecção 2.1.1), prevista pelo teorema KAM. Tanto a divergência exponencial, como a não-periodicidade e como a destruição dos toros podem ser observadas através de cortes do espaço de fase (projeções e seções), escolhidos convenientemente.

Em nosso trabalho as comparações dos resultados do sistema quântico com aqueles do sistema clássico basearam-se principalmente em dois produtos daquele aparato: seções e projeções do espaço de fase, e regra de quantização de Bohr-Sommerfeld para o caso integrável de dois spins. Segue abaixo uma breve descrição destes produtos juntamente com algumas características válidas para os modelos \mathcal{E}_2 e \mathcal{E}_3 (eqs. 3.112 e 3.113).

SEÇÕES DE POINCARÉ. Para um sistema com N graus de liberdade, as soluções das equações de Hamilton 4.2 podem ser bastante complexas, seja pela possibilidade de coexistência de órbitas periódicas e caóticas em dadas regiões do espaço de fase, seja pela dificuldade de visualização das órbitas num espaço de fase de dimensão $2N$. A construção de seções de Poincaré permite-nos reduzir o grau de complexidade das soluções das equações de movimento. Inicialmente, escolhe-se uma superfície P de dimensão $2N - 1$, transversal ao fluxo associado ao sistema dinâmico 4.2. Sobre esta superfície P considera-se apenas o conjunto de pontos $\{P_0, P_1, P_2, \dots\}$ da intersecção entre a solução $(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))_{(\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0)}$ e a superfície P , quando a intersecção se dá

numa direção previamente escolhida. Este conjunto de pontos define uma seção da superfície P , a seção de Poincaré associada à solução $(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))_{(\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0)}$.

Seções de Poincaré são construções eficientes e engenhosas para o estudo das propriedades das soluções $(\mathbf{q}(t), \mathbf{p}(t))_{(\mathbf{q}_0, \mathbf{p}_0)}$. Apesar de não descreverem continuamente a evolução temporal de (\mathbf{q}, \mathbf{p}) – são conjuntos discretos de pontos sobre a superfície P –, elas conservam propriedades gerais da topologia do fluxo a partir do qual são formadas; além de simplificarem as representações gráficas, graças ao fato de se estar trabalhando num espaço de dimensão menor do que a do espaço de fase original. Esta construção será particularmente interessante no caso do modelo de três spins. Neste caso, como se vê pela equação 3.113,

$$\mathcal{E}_3 = \mathcal{E}_3(\eta, \alpha; \gamma, \beta; m). \quad (4.4)$$

Ora, m e \mathcal{E}_3 são constantes de movimento. Portanto, podemos expressar uma das variáveis em termos das restantes e dos parâmetros m e \mathcal{E}_3 . Por exemplo,

$$\beta = \beta(\eta, \alpha; \gamma). \quad (4.5)$$

Definindo a superfície P por $\gamma = \text{constante}$, temos

$$\beta = \beta_{m, \mathcal{E}_3}(\eta, \alpha; \gamma = \text{cte}), \quad (4.6)$$

onde duas variáveis, η e α , bastam para a seção de Poincaré. Desta maneira, especificadas as condições iniciais $(\eta_0, \alpha_0; \gamma_0, \beta_0)$ e as constantes m e \mathcal{E}_3 , poderemos visualizar a evolução temporal das variáveis, observando apenas o plano (α, η) , fazendo uso, para tanto, da superfície $\gamma = \text{cte}$.

PROJEÇÕES DO ESPAÇO DE FASE. As projeções mais simples são obtidas resolvendo-se o problema 4.2 e acompanhando ao longo do tempo pares de variáveis $(q_l(t), p_l(t))$. Estes planos (q_l, p_l) são interessantes nos casos dos sistemas \mathcal{E}_2 e \mathcal{E}_3 , por serem diretamente comparáveis a projeções da distribuição de Husimi, como veremos na próxima seção.

Para o caso de dois spins, o plano (α, η) coincide com o subespaço do espaço de fase $(\alpha, \eta; \phi, m)$, uma vez que $\mathcal{E}_2 = \mathcal{E}_2(\alpha, \eta; m)$ e m é constante. Logo, podemos resolver o problema dinâmico 4.2 especificando as constantes m e \mathcal{E}_2 e escrevendo a função das órbitas

$$\eta = \eta_{m, \mathcal{E}_2}(\alpha). \quad (4.7)$$

Para o caso de três spins, acompanha-se, por exemplo, a evolução temporal das órbitas, projetadas no plano (α, η) .

REGRA DE QUANTIZAÇÃO. Por ser integrável e ter seu movimento restrito a duas dimensões, o sistema de dois spins H_2 permite uma comparação direta entre o espectro quântico para valores grandes de S e a energia clássica como função das órbitas.

Sendo integrável, todas as órbitas (α, η) são periódicas. Pode-se, então, calcular a ação \mathcal{J} de uma dada órbita através da integral

$$\mathcal{J} = 2S \oint \eta d\alpha, \quad (4.8)$$

onde a integração é realizada sobre um período da variável α , comparecendo um fator $2S$, característico do grupo $SU(2)$ e devido ao uso da representação de estados coerentes e da imposição do princípio variacional dependente do tempo, como no capítulo 3 [19]. No limite clássico para o sistema quântico, esta ação deve corresponder à regra de quantização de Bohr-Sommerfeld

$$\mathcal{J} \leftrightarrow 2\pi\hbar \left(n + \frac{\mu}{4} \right), \quad (4.9)$$

em que o índice de Maslov μ dá conta de correções ao número quântico n [4, 5]. Desta forma, pode-se contrapor a curva dada pelo espectro semiclássico $\frac{E_n}{S^2} \times \frac{n}{S^2}$ e a curva clássica $\mathcal{E}_2 \times \frac{n(\mathcal{J})}{S^2}$.

4.2 Métodos e técnicas para o sistema quântico

Assim como no regime clássico, também para sistemas quânticos busca-se métodos e técnicas que permitam sua caracterização quanto a integrabilidade e, sobretudo, caos. Ora, ao se tratar de sistemas quânticos, perde-se a noção de órbitas no espaço de fase, e grande parte daqueles indicadores úteis para sistemas não-integráveis clássicos tem sua utilização dificultada. Com isso o estudo de integrabilidade e caos em sistemas quânticos traduziu-se na busca de manifestações de natureza quântica (ou semiclássica), características de sistemas cujos correspondentes clássicos exibem integrabilidade ou caos. Nessa busca, no regime quântico, também se vale de matéria prima apropriada. De fato, na resolução do problema 4.1 de autovalores e autovetores do operador quântico hamiltoniano H , obtém-se duas quantidades primárias: o espectro de energias, na forma dos autovalores E_n de H , e os autoestados do sistema quântico, através de seus autovetores $|\psi_n\rangle$. Há métodos e resultados específicos para cada uma dessas quantidades, que apresentaremos separadamente a seguir.

4.2.1 Distribuições de Husimi

Como foi citado anteriormente, no regime quântico desfazem-se as manifestações das órbitas e outras estruturas clássicas aparentes no espaço de fase clássico. Age então, e de forma essencial, o impedimento contido no princípio de incerteza que não permite o conhecimento exato e simultâneo de pares de coordenadas que não comutam. Com base no princípio de correspondência espera-se, entretanto, que aquelas

estruturas clássicas invariantes voltem a se manifestar no limite clássico, através dos estados estacionários quânticos $|\psi_n\rangle$. Isto dá lugar à busca por representações do espaço de fase por meio de funções quânticas de variáveis (q, p) , como tentativa de se estudar a correspondência entre mecânica quântica e mecânica clássica. Estas funções trariam nos estados $|\psi_n\rangle$ toda informação disponível a respeito do sistema quântico, ao mesmo tempo que revelariam as estruturas clássicas, no limite clássico, através das coordenadas (q, p) .

Em 1932 E.P. Wigner propôs uma tal função, dada por

$$W_\psi(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^N} \int d\mathbf{Q} \left\langle \mathbf{q} + \frac{\mathbf{Q}}{2} | \psi \right\rangle \left\langle \psi | \mathbf{q} - \frac{\mathbf{Q}}{2} \right\rangle e^{\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{Q}} \quad (4.10)$$

para um sistema com N graus de liberdade. Esta função tem propriedades interessantes, como

$$\int d\mathbf{q} W_\psi(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = |\psi(\mathbf{p})|^2, \quad (4.11)$$

$$\int d\mathbf{p} W_\psi(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = |\psi(\mathbf{q})|^2, \quad (4.12)$$

$$\int d\mathbf{q} d\mathbf{p} W_\psi(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = 1, \quad (4.13)$$

que sugerem interpretá-la como algo próximo de uma densidade de probabilidade. Próximo apenas, pois, apesar de fornecer corretas densidades de probabilidade para \mathbf{q} e \mathbf{p} , a função de Wigner W_ψ assume necessariamente valores negativos em determinadas regiões. Uma maneira de se corrigir este “defeito”, conservando as qualidades de densidade de probabilidade, é suavizar a função de Wigner. A distribuição de Husimi

$$h_\psi = \frac{1}{(\pi\hbar)^N} \int d\mathbf{q}' d\mathbf{p}' W_\psi(\mathbf{q}', \mathbf{p}') e^{-\left[\frac{(\mathbf{q}-\mathbf{q}')^2}{b^2} + \frac{(\mathbf{p}-\mathbf{p}')^2}{\hbar^2}\right]}, \quad (4.14)$$

resultante da suavização gaussiana da função W_ψ , é de fato não-negativa em todos os pontos do espaço de fase. Além disso, a gaussiana usada tem largura dada por

$$\Delta q = \frac{b}{\sqrt{2}} \quad \Delta p = \frac{\hbar}{b\sqrt{2}}, \quad (4.15)$$

o que minimiza a relação de incerteza ($\Delta q \Delta p = \frac{\hbar}{2}$) e faz da distribuição de Husimi uma distribuição interessante para estudos no regime semiclassical. M.A.M. de Aguiar e A.M. Ozório de Almeida mostraram que ser gaussiana é essencial para que a suavização garanta não-negatividade [47]. Nesse trabalho, e também nas referências [6, 48, 49], pode-se encontrar diversas comparações entre as distribuições W_ψ e h_ψ .

Pode-se mostrar que a distribuição dada pela eq. 4.14 é equivalente a [49]

$$h_\psi(z) = \frac{|\langle z | \psi \rangle|^2}{\langle z | z \rangle}, \quad (4.16)$$

em que $|z\rangle$ é o estado coerente para a oscilador harmônico N -dimensional ou, na linguagem da teoria de grupos, o estado coerente para o grupo de Weyl W_N [6, 45]. A eq. 4.16 deixa claro o papel de h_ψ como distribuição de probabilidade, fornecendo a probabilidade de se encontrar o sistema numa célula do espaço de fase de volume (mínimo) \hbar^N e centrada em

$$z = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{q}{b} + i \frac{bp}{\hbar} \right). \quad (4.17)$$

Esta definição em termos de estados coerentes (eq. 4.16) pode ser generalizada para sistemas cujos hamiltonianos quânticos podem ser escritos em termos de operadores geradores de um grupo de Lie [6]. Nestes casos, o limite clássico é atingido, quando um certo parâmetro N , característico do grupo de Lie em questão, tende a infinito. Como vimos no capítulo anterior, este é precisamente o caso dos hamiltonianos H_2 e H_3 , que podem ser escritos usando-se os operadores S^+ , S^- e S^z , geradores do grupo $SU(2)$. Ademais, este limite clássico é, apropriadamente, o limite apresentado no capítulo anterior dentro do contexto do trabalho de L.G. Yaffe [43]. Para nossos propósitos de comparação com a dinâmica clássica, esta generalização (eq. 4.16), usando estados coerentes, é particularmente justificável, já que os estados coerentes para spins, grupo $SU(2)$, tendem aos estados coerentes para o oscilador harmônico, grupo de Weyl, no limite $S \rightarrow \infty$ [45].

No regime semiclássico a distribuição de Husimi para o estado estacionário $|\psi_n\rangle$ tende a se concentrar próxima às estruturas clássicas invariantes (órbitas, toros,...), de energia correspondente a $|\psi_n\rangle$. Neste sentido, tem se revelado uma ferramenta poderosa na busca por cicatrizes de órbitas periódicas instáveis em regiões de caos [2, 3]. De modo distinto, esta propriedade da distribuição de Husimi é de extrema importância para nossos objetivos, pois permite-nos comparar diretamente os resultados obtidos das hamiltonianas clássicas \mathcal{E}_2 e \mathcal{E}_3 com estes das correspondentes distribuições de Husimi. Assim como a representação de estados coerentes permitiu-nos identificar um espaço de fase generalizado através das variáveis complexas $z = \frac{1}{\sqrt{2}}(q + ip)$, aqui também podemos escrever as distribuições de Husimi em termos das mesmas variáveis daquele espaço de fase e fazer as comparações. Nosso objetivo será associar um dado estado estacionário $|\psi_n\rangle$ a uma dada estrutura clássica correspondente (órbita, toro,...). Exemplos destas comparações, feitas para sistemas que possuem graus de liberdade associados a spins, podem ser encontrados em [6, 7, 9, 11].

SEÇÕES QUÂNTICAS E PROJEÇÕES DA DISTRIBUIÇÃO DE HUSIMI. Por outro lado, enfrentamos com as distribuições de Husimi o mesmo problema de visualização de estruturas num espaço de fase multidimensional. No caso de um sistema com um grau de liberdade, duas variáveis bastam para se descrever o espaço de fase, assim como a distribuição de Husimi. Este é o caso do sistema de dois spins, para o qual,

eliminadas as constantes de movimento, resulta um espaço bidimensional. Assim também, a correspondente distribuição de Husimi pode ser escrita como

$$h_n = h_n(\alpha, \eta). \quad (4.18)$$

Com isso a projeção da intensidade h_n sobre o plano (α, η) permite a comparação direta com as órbitas clássicas do sistema de dois spins, dadas por \mathcal{E}_2 (eq. 4.7).

Este mesmo tipo de comparação pode ser tentada para o caso de três spins. Como vimos, a hamiltoniana clássica para este caso escreve-se como função de quatro variáveis

$$\mathcal{E}_3 = \mathcal{E}_3(\eta, \alpha; \gamma, \beta). \quad (4.19)$$

Para se comparar os resultados de

$$h_n = h_n(\eta, \alpha; \gamma, \beta) \quad (4.20)$$

com as órbitas clássicas, deve-se resolver dois problemas. Inicialmente, note-se que, para um dado valor de energia \mathcal{E}_3 , há vários conjuntos de condições iniciais $(\eta_0, \alpha_0; \gamma_0, \beta_0)$ que geram órbitas com energia \mathcal{E}_3 . Para associar-se uma única órbita a um dado estado estacionário, pode-se tomar como conjunto ótimo de condições iniciais $(\eta_0, \alpha_0; \gamma_0, \beta_0)$ o ponto do espaço quadridimensional em que $h_n(\eta, \alpha; \gamma, \beta)$ assume seu valor máximo [6]. Assim, tem-se uma única órbita associada ao estado $|\psi_n\rangle$. A partir daí, podemos proceder como no caso clássico e definir seções quânticas correspondentes às seções de Poincaré clássicas, usando as próprias distribuições de Husimi. Fixamos uma das variáveis ($\gamma = \text{constante}$, por exemplo) e integramos h_n na variável conjugada (β), obtendo a seção S

$$S_\gamma(\alpha, \eta) = \int d\beta h_n(\eta, \alpha; \gamma = \text{cte}, \beta). \quad (4.21)$$

Esta seção quântica pode ser comparada com a seção de Poincaré clássica, definida anteriormente por $\gamma = \text{constante}$.

Outra alternativa reside em projeções da distribuição de Husimi, como, por exemplo,

$$P(\alpha, \eta) = \int d\beta d\gamma h_n(\eta, \alpha; \gamma, \beta), \quad (4.22)$$

a ser comparada com a projeção clássica em que acompanhamos a evolução das órbitas clássicas, projetadas sobre o plano (α, η) .

4.2.2 Espectro de energias

Curiosamente, a maior parte dos indicadores de integrabilidade e caos para sistemas quânticos baseia-se em propriedades dos espectro de autovalores de energia, e não em propriedades e valores médios proporcionados pelos autoestados $|\psi_n\rangle$. Estas propriedades espectrais, por sua vez, referem-se invariavelmente a apenas duas

quantidades calculadas a partir dos autovalores: o espaçamento $\Delta_n = \epsilon_{n+1} - \epsilon_n$ entre os níveis vizinhos ϵ_{n+1} e ϵ_n , e a correlação entre os níveis. O tratamento estatístico destas quantidades dentro do formalismo da Teoria das Matrizes Aleatórias [50] proporciona uma série de indicadores que têm sido muito úteis na caracterização de sistemas quânticos cujos análogos clássicos são caóticos [1]. Dizemos indicadores para os sistemas quânticos, pois, em certo sentido, esta caracterização faz-se dependentemente daquela válida para sistemas clássicos: sabemos mostrar que um dado sistema clássico é caótico ou não; a partir daí, verificamos que o espectro de energias do sistema quântico correspondente obedece a um dado comportamento estatístico em sua distribuição. Por sua vez, a derivação das propriedades das órbitas do sistema clássico análogo, a partir das propriedades estatísticas espectrais do sistema quântico, não é imediata e tem sido um problema de difícil solução, sobretudo quando o sistema clássico apresenta regiões do espaço de fase em que coexistem órbitas periódicas e caóticas [51]. Para os sistemas de spins que tomamos, entretanto, é possível obter-se muita informação sobre as órbitas e o espaço de fase clássicos a partir de propriedades simples do espectro, observadas diretamente nos gráficos $\Delta_{n+1} \times \Delta_n$ e $\Delta_n \times n$. Veremos, por exemplo, que a presença de uma órbita clássica separatriz ou o intervalo de energias em que predominam órbitas caóticas podem ser apontados nos próprios gráficos $\Delta_{n+1} \times \Delta_n$ e $\Delta_n \times n$, sendo confirmados pelas seções de Poincaré e projeções das órbitas no espaço de fase clássico.

Parte II

Capítulo 5

Manifestações clássicas e quânticas de quebra de simetria no modelo de Heisenberg de dois spins

Neste capítulo vamos analisar, nos contextos clássico e quântico, algumas consequências da quebra de simetria no modelo de Heisenberg de dois spins¹. Nosso propósito será o estabelecimento de uma correspondência simples e direta entre os espectros quânticos, obtidos para diferentes valores do parâmetro de anisotropia σ , e as órbitas no espaço de fase clássico, obtidas para os correspondentes valores de σ . De fato, veremos que esta correspondência pode ser estabelecida no limite de valores grandes para spins, sendo resumida pelo seguinte resultado. Como consequência da quebra de simetria na interação spin-spin, o espectro quântico exibe um ponto de inflexão. A contrapartida clássica deste comportamento se revela na existência de duas classes distintas de órbitas periódicas, separadas por uma órbita limitante. Esta última tem precisamente a energia correspondente ao ponto de inflexão do espectro.

Para tanto, na seção 5.1, analisamos a distribuição espectral de energias segundo diferentes valores de spin e do parâmetro de anisotropia. A seção 5.2 é dedicada à discussão da dinâmica proporcionada pelo sistema clássico associado e sua conexão com os espectros quânticos. Alguns comentários finais são apresentados na seção 5.3.

¹Os resultados apresentados neste capítulo estão publicados em *Chaos, Solitons and Fractals* [52].

5.1 O modelo e seus espectros quânticos

O modelo anisotrópico de Heisenberg com dois spins é descrito pelo Hamiltoniano H_2 :

$$H_2 = J(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \sigma S_1^z S_2^z), \quad (5.1)$$

em que J é um número real positivo (caso antiferromagnético²) e S_l^α ($l = 1, 2$; $\alpha = x, y, z$) correspondem aos operadores usuais de spin. Ao longo de todo este capítulo tomaremos $\hbar = 1$, $J = 1$ e faremos variar o parâmetro de anisotropia σ , também um número real, dentro do intervalo $-3 \leq \sigma \leq 1$.

Com as regras de comutação para os operadores de spins, é fácil verificar que a componente z do spin total $\mathbf{T}_2 = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$ é uma constante de movimento,

$$[T_2^z, H_2] = 0. \quad (5.2)$$

Para o sistema de dois spins, as duas constantes de movimento – H_2 e T_2^z – são suficientes para atestar a integrabilidade do modelo, como está explicado no capítulo 2.

Além dos valores acima, tomaremos $|\mathbf{S}_1| = |\mathbf{S}_2| = S$ e usaremos os estados para dois spins dados por

$$|m_1 m_2\rangle = \frac{1}{2!} [|S, m_1; S, m_2\rangle \pm |S, m_2; S, m_1\rangle] \quad (5.3)$$

como base para resolver o problema de autovalores do operador H_2 . Na eq. 5.3 os sinais $+$ e $-$ referem-se a spins inteiros e semi-inteiros respectivamente, e m_1 e m_2 , aos números quânticos correspondentes às componentes S_1^z e S_2^z . m_1 e m_2 foram escolhidos tais que $m_1 + m_2 = 0$, de modo a satisfazer o valor esperado $\langle T_2^z \rangle = 0$. Esta escolha não apenas simplifica os cálculos, mas significa também que estamos escolhendo uma situação estritamente antiferromagnética, conveniente para um eventual estudo sobre frustração e a dinâmica caótica associada, possíveis no sistema três spins [16]. Com estas escolhas, a resolução numérica do problema de autovalores de H_2 é relativamente simples e rápida. Apresentamos a seguir a discussão para o caso de dois spins inteiros.

Comportamento típico dos espectros quânticos do modelo de Heisenberg para diferentes valores de spins pode ser visto na figura 5.1. Observa-se que, para um dado valor do parâmetro σ , o espectro quântico tende a uma curva universal à medida que cresce o valor de S e, no limite $S \rightarrow \infty$, o espectro, escalado por S^2 , não depende do valor do spin³. Este comportamento para valores grandes de S é característico de uma classe de modelos conhecidos por modelos de Curie-Weiss, que tem exemplos nos modelos de Heisenberg [52], no modelo de Lipkin [46] e no modelo

²O caso ferromagnético ($J < 0$), resultando simplesmente na troca de sinal para os valores de energia, pode ser estudado de maneira similar e sem nenhuma dificuldade especial.

³Em todas as figuras deste capítulo, as energias estão escaladas pelo fator JS^2 .

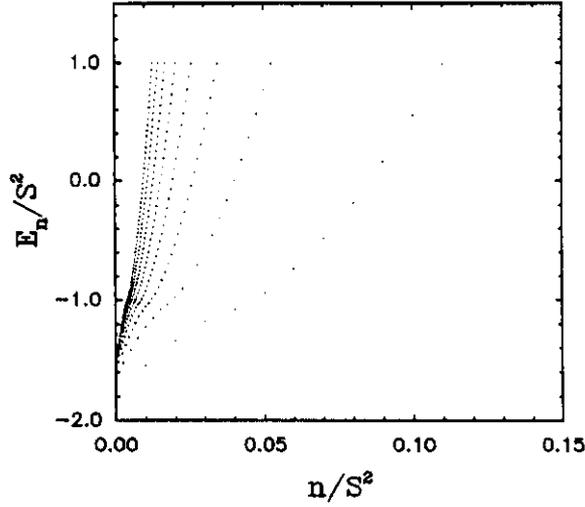


Figura 5.1: Distribuições espectrais $\frac{E_n}{S^2} \times \frac{n}{S^2}$ para valores crescentes de spin ($S = 10, 20, 30, \dots, 80$), obtidas com parâmetro de anisotropia $\sigma = 0.5$.

de emparelhamento [12, 13]. Em vista dos comentários finais do capítulo 3, sobre as expansões $\frac{1}{N}$ [43], espera-se intuitivamente que esta curva universal seja dada, outrossim, pelo limite clássico \mathcal{E}_2 lá calculado.

Com respeito à variação de σ , para um dado valor grande de S , o espectro comporta-se como apresentado na figura 5.2⁴. Na figura 5.2(a) temos espectros para $S = 200$ e vários valores negativos de σ dentro do intervalo $-3 < \sigma < 0$, e na figura 5.2(b) estão os espectros para valores positivos de σ em $0 < \sigma < 1$. Uma característica comum a todos estes espectros está na existência de um ponto de inflexão. Dependendo do valor de σ , este ponto de inflexão pode assumir dois comportamentos distintos:

i) $-2.0 < \sigma < 0.0$: Ocorrendo no valor de energia $\left(\frac{E_n}{S^2}\right)_{ip} = -1.0$ para $\sigma = 0.0$, o ponto de inflexão desloca-se para cima no espectro, à medida que σ assume valores abaixo de zero e crescentes em módulo. Neste intervalo de validade para σ , a energia mais baixa está em $\left(\frac{E_n}{S^2}\right)_{min} = -1.0$ e o ponto de inflexão ocorre em $\left(\frac{E_n}{S^2}\right)_{ip} = -1.0 + |\sigma|$. Este comportamento se mantém até $\sigma = -2.0$, quando a isotropia do modelo é recuperada, fazendo com que o espectro tenha apenas uma concavidade e o ponto de inflexão esteja na energia máxima para o espectro de $\sigma = -2.0$ ⁵;

⁴ $S \approx 200$ é suficientemente grande para ilustrar nossos resultados.

⁵Esta recuperação da isotropia original ($\sigma = 0.0$) é vista facilmente através da eq. 5.1, onde

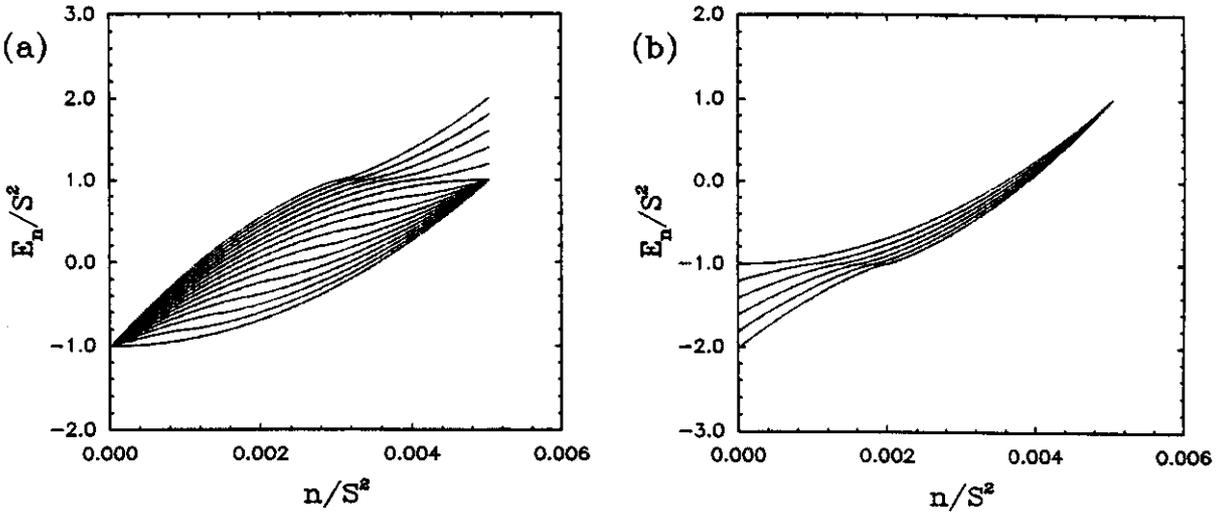


Figura 5.2: Distribuições espectrais para um único valor de spin ($S = 200$) e vários valores de σ : (a) $\sigma = -3.0, -2.8, -2.6, \dots, 0.0$; (b) $\sigma = 0.0, 0.2, 0.4, \dots, 1.0$.

ii) $\sigma \leq -2.0$: À medida que $|\sigma|$ assume valores maiores do que -2.0 , o ponto de inflexão reaparece. A energia em que ocorre, entretanto, não muda com σ , permanecendo fixa no valor $\left(\frac{E_n}{S^2}\right)_{ip} = 1.0$.

iii) $\sigma \geq 0.0$: Comportamento semelhante ao descrito em *ii)* ocorre para $\sigma \geq 0.0$. O ponto de inflexão ocorre no valor fixo de energia dado por $\left(\frac{E_n}{S^2}\right)_{ip} = -1.0$. A energia mínima, entretanto, tem uma regra própria, ocorrendo em $\left(\frac{E_n}{S^2}\right)_{min} = -(1.0 + \sigma)$.

Na próxima seção veremos que a existência do ponto de inflexão e seus comportamentos, distintos segundo o valor de σ , possuem correspondentes bem definidos no análogo clássico para o modelo.

o fator $1 + \sigma = 1.0$ para $\sigma = 0.0$ torna-se $1 + \sigma = -1.0$ para $\sigma = -2.0$. No último caso temos simplesmente o modelo isotrópico com a direção do eixo z invertida, o que se reflete nos espectros para $\sigma > 0.0$ (fig. 5.2(b)).

5.2 Dinâmica clássica e sua conexão com os espectros quânticos

A versão clássica do modelo de Heisenberg de dois spins é representada por $\mathcal{E}_2(\alpha, \eta; \phi, m)$, conforme calculado no capítulo 3:

$$\mathcal{E}_2 = J \left[\sqrt{(1-m)^2 - \eta^2} \sqrt{(1+m)^2 - \eta^2} \cos 2\alpha + (\sigma + 1)(m^2 - \eta^2) \right]. \quad (5.4)$$

As variáveis da hamiltoniana \mathcal{E}_2 estão restritas aos intervalos

$$\begin{aligned} -\pi \leq \alpha \leq \pi & \quad -1 \leq \eta \leq 1 \\ 0 \leq \phi \leq 2\pi & \quad -1 \leq m \leq 1. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Como vimos no capítulo 3, m é constante de movimento associada a $\frac{T_z^2}{2S}$ (eq. 3.76). Tendo tomado $\langle T_z^2 \rangle = 0$ nos cálculos da seção anterior, vamos aqui analisar o caso correspondente $m = 0$. Com esta escolha, a hamiltoniana clássica fica ($J = 1$)

$$\mathcal{E}_2 = -(1 + \sigma)\eta^2 + (1 - \eta^2)\cos 2\alpha. \quad (5.6)$$

O espaço de fase é descrito pelas variáveis α e η . Bidimensional, o sistema é também integrável para todos os valores de σ . As superfícies de energia sobre o espaço (α, η) , dadas pela expressão 5.6, estão representadas na figura 5.3⁶.

Destas figuras observa-se qualitativamente dois tipos de superfície de energia, correspondendo a $\sigma < 0.0$ e $\sigma > 0.0$. O caso $\sigma < 0.0$ (figs. 5.3(a) e 5.3(b)) exhibe um ponto de mínimo na superfície, que se encontra numa região com o aspecto de uma “cesta”. Para $\sigma = -2.0$ (fig. 5.3(a)), a região dada pela abertura da “cesta” ocupa todo o espaço de fase, mas vai se fechando à medida que crescem os valores de σ , até o caso $\sigma = 0.0$ (fig. 5.3(c)), quando a “cesta” desaparece, tendo se transformado em uma linha. Para $\sigma > 0.0$ (fig. 5.3(d)), esta linha de pontos de mínimo de energia adquire um ponto de máximo, revelando-se uma estrutura do tipo ponto de sela.

Estas características estão presentes nas órbitas dadas pelas equações de Hamilton para \mathcal{E}_2 , e podem ser evidenciadas nos espectros quânticos obtidos na seção anterior.

5.2.1 Órbitas clássicas e espectros quânticos

Os pontos de equilíbrio indicados pelas superfícies de energia podem ser obtidos das equações de movimento

$$\dot{\eta} = 2(1 - \eta^2)\sin 2\alpha \quad (5.7)$$

$$\dot{\alpha} = -2(1 + \sigma)\eta - 2\eta\cos 2\alpha, \quad (5.8)$$

⁶Em todas as figuras referentes ao sistema clássico, apresentamos apenas o intervalo $0 \leq \alpha \leq \pi$, visto que a variável α é periódica e tem período π .

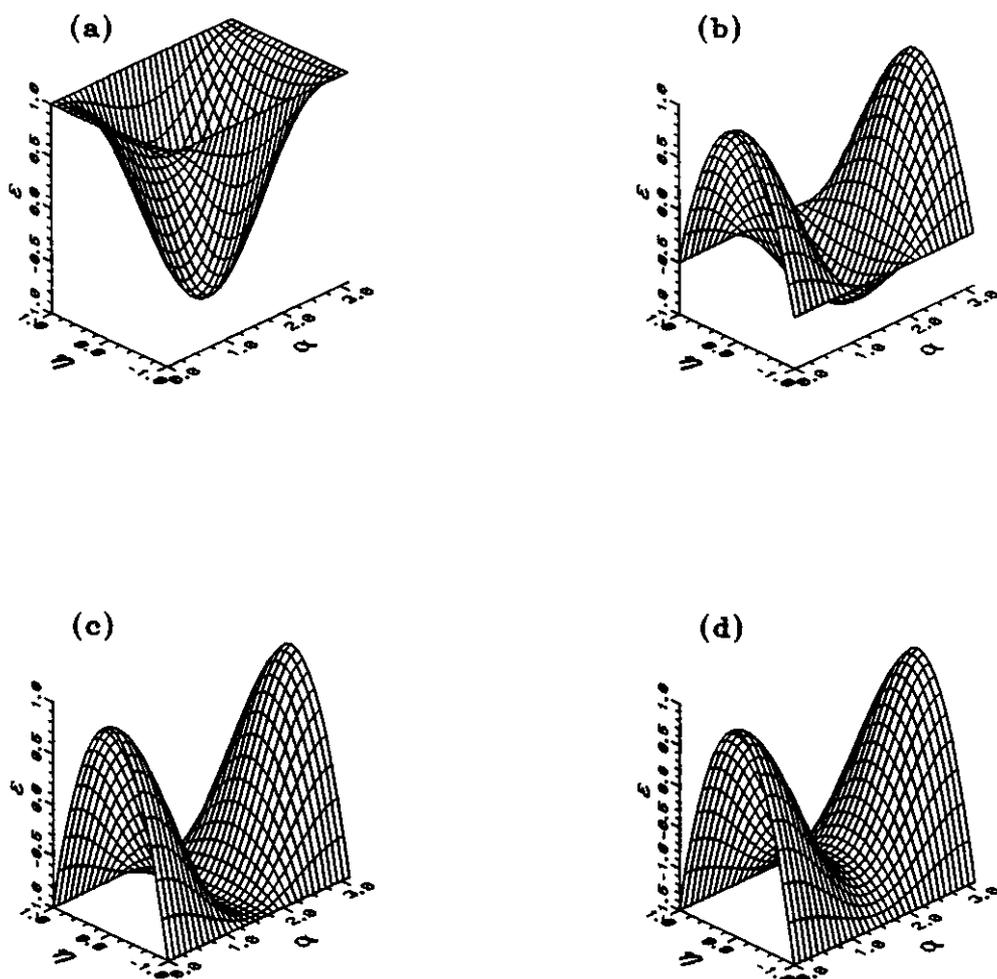


Figura 5.3: Superfícies de energia $\mathcal{E}_2(\alpha, \eta)$ para os intervalos: $-1 \leq \eta \leq 1$ e $0 \leq \alpha \leq \pi$: (a) para $\sigma = -2.0$ a “cesta” cobre todo o espaço de fase; (b) para $\sigma = -0.5$, em que o ponto de equilíbrio e mínimo de energia está no fundo da “cesta” ($\alpha = \frac{\pi}{2}$, $\eta = 0$); (c) para $\sigma = 0.0$ há um linha de pontos de equilíbrio e mínimos de energia em $\alpha = \frac{\pi}{2}$; (d) para $\sigma = 0.5$ as órbitas de energia mais baixa correspondem ao par de linhas $\eta = -1$ e $\eta = 1$, e o ponto ($\alpha = \frac{\pi}{2}$, $\eta = 0$) torna-se um ponto de sela.

impondo-se as condições de extremo $\dot{\eta} = 0$ e $\dot{\alpha} = 0$. Obtemos os seguintes resultados:

i) (a) para $\sigma < 0.0$, o ponto $(\alpha = \pm \frac{\pi}{2}, \eta = 0)$ é um ponto de equilíbrio estável e de energia mínima com $(\mathcal{E}_2)_{min} = -1.0$ (ver figs. 5.3(a) e 5.3(b));

(b) para $\sigma = 0.0$, há uma linha de pontos de equilíbrio estável, dada por $(\alpha = \pm \frac{\pi}{2}, \eta)$ (ver fig. 5.3(c));

(c) para $\sigma > 0.0$, o ponto $(\alpha = \pm \frac{\pi}{2}, \eta = 0)$ transforma-se em ponto de sela (ver fig. 5.3(d));

ii) para qualquer valor de σ entre $-2.0 < \sigma < 0.0$, há um ponto de equilíbrio instável (máximo da superfície) em $(\alpha = 0, \eta = 0)$;

iii) para valores negativos de σ , $-2.0 < \sigma \leq 0.0$, há dois pontos de equilíbrio instável, correspondendo a:

(a) $(\alpha_{min} = \frac{1}{2} \arccos[-(1 + \sigma)], \eta = \pm 1)$ com energia $\mathcal{E}_2 = -(1 + \sigma)$;

(b) $(\alpha_{max} = \pi - \frac{1}{2} \arccos[-(1 + \sigma)], \eta = \pm 1)$ com energia $\mathcal{E}_2 = -(1 + \sigma)$.

As órbitas $(\alpha(t), \eta(t))$ também podem ser obtidas das eqs. 5.7 e 5.8. Para um sistema bidimensional como este, é mais simples inverter a expressão 5.6, reescrevendo η como função de α e \mathcal{E}_2 :

$$\eta(\alpha) = \left[\frac{\cos 2\alpha - \mathcal{E}_2}{\cos 2\alpha + (1 + \sigma)} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (5.9)$$

Podemos, então, fazer a correspondência entre as órbitas periódicas clássicas e os espectros quânticos mostrados na seção anterior. Para tanto vamos discutir as órbitas no espaço de fase para os valores de σ dos itens *i)*, *ii)* e *iii)* acima.

Na figura 5.4(a) vemos as órbitas clássicas para várias energias, típicas do caso $-2.0 < \sigma < 0.0$ ($\sigma = -0.5$ nesta figura). Notemos que as órbitas são todas limitadas na variável α e pertencem a dois grupos. No centro da figura, vemos um conjunto de órbitas, que contém a órbita de energia mínima em particular, e que corresponde às órbitas que estão dentro da “cesta” exibida na figura 5.3(b). Para comparação com o espectro quântico para $\sigma = -0.5$, apresentamo-lo na figura 5.4(b). Observe-se que o valor da energia mínima coincide com o correspondente clássico ($(\mathcal{E}_2)_{min} = -1.0$). O ponto de inflexão do espectro quântico está intimamente ligado à órbita de energia mais alta dentre as órbitas da “cesta” (veja item *iii)* (a) acima). Esta última órbita, que desenha a abertura da “cesta”, tem energia idêntica à energia do espectro quântico correspondente ao ponto de inflexão. Assim, pode-se dizer que o ponto de inflexão no espectro quântico reflete a presença, no espaço de fase clássico, de uma órbita que separa dois regimes dinâmicos distintos.

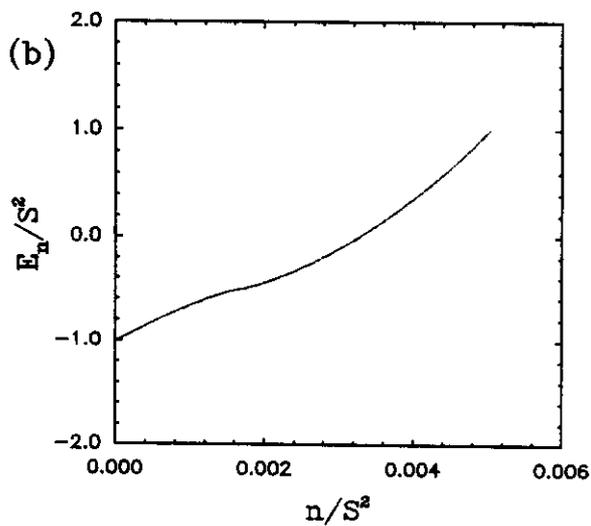
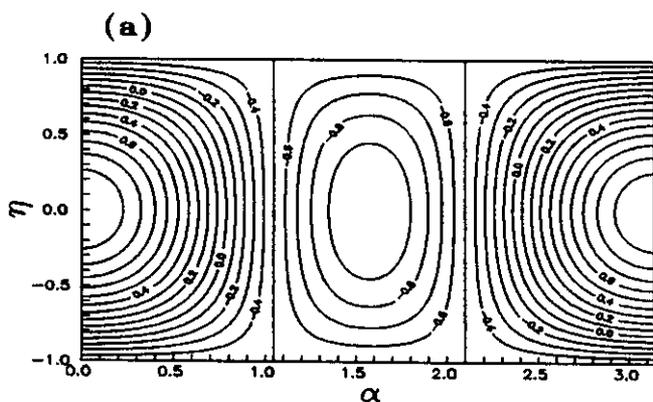


Figura 5.4: (a) Órbitas periódicas correspondentes à fig. 5.3(b) para $\sigma = -0.5$ e energias $\mathcal{E}_2 = -0.9, -0.8, \dots, 0.9$ ($\mathcal{E}_2 = -0.5$ correspondendo à separatriz dada pela abertura da “cesta” na fig. 5.3(b)); as órbitas de energia $\mathcal{E}_2 = -1.0$ e $\mathcal{E}_2 = 1.0$ correspondem respectivamente ao mínimo e aos máximos de energia; (b) distribuição espectral para $\sigma = -0.5$ e $S = 200$, mostrando o ponto de inflexão em $\frac{E_n}{S^2} = -0.5$ (energia da órbita separatriz clássica).

Esta correspondência com a órbita separatriz mantém-se para todos os valores de σ . Para σ tendendo a zero, a seqüência de órbitas, que na figura 5.4(a) estava dentro da “cesta”, tem seu espaço diminuído gradativamente com o aumento de σ , até que a “cesta” termina por fechar-se para $\sigma = 0.0$, tornando-se uma linha de pontos de equilíbrio de energia mínima (veja item *i*) (b) e fig. 5.5(a)). Correspondentemente, o ponto de inflexão no espectro quântico desloca-se até o mínimo de energia $\left(\frac{E_n}{S^2}\right)_{min} = -1.0$, quando o espectro passa a ter uma única concavidade (fig. 5.5(b)).

O caso $\sigma > 0.0$ (figs. 5.6(a) e 5.6(b)) pode ser analisado de maneira similar ao caso em que $-2.0 < \sigma < 0.0$. Difere daquele no tipo de órbitas que têm energia abaixo da energia da separatriz: para $E_2 < -1.0$ as órbitas representam “rotações” no espaço de fase, e para $E_2 > -1.0$ são librações⁷.

Completando os casos possíveis, mencionaremos apenas que o caso $\sigma < -2.0$ pode ser visto exatamente como o caso $\sigma > 0.0$, fazendo-se apenas uma translação de $\frac{\pi}{2}$ na variável α (figs. 5.7(a) e 5.7(b)). De fato, lembremos que para $\sigma \leq -2.0$, os espectros quânticos eram reflexos dos espectros $\sigma > 0.0$, pois em $\sigma = -2.0$ a isotropia do modelo era recuperada.

5.2.2 Regra de quantização

A correspondência apresentada na subseção anterior pode ainda ser aprofundada e estendida a todos os pontos do espectro semiclássico e às correspondentes órbitas clássicas. O análogo clássico do número quântico n (índice do nível de energia E_n) pode ser obtido como condição de quantização semiclássica do tipo Bohr-Sommerfeld, impondo a condição de analiticidade da função de onda sobre um circuito fechado no espaço de fase. Este argumento tem sido usado ao longo dos anos por A. Einstein, M.L. Brillouin, J.B. Keller, V.P. Maslov e M.V. Fedoriuk [53] na tentativa de refinar a regra original de quantização semiclássica de Bohr-Sommerfeld. O procedimento está descrito, por exemplo, em [5] e a condição de quantização resultante é dada por

$$\oint p dq = 2\pi\hbar \left(n + \frac{\mu}{4} \right), \quad (5.10)$$

em que o índice de Maslov μ corrige discrepâncias no número quântico n . Aplicações destes argumentos em contextos diversos têm sido feitas por vários autores para obtenção de espectros de outros sistemas de Curie-Weiss: modelo de emparelhamento [54], modelo de Lipkin [55] e modelos de spins [56]. De forma mais geral, para sistemas que admitem a expansão $\frac{1}{N}$ na representação de estados coerentes, pode-se ter uma derivação elegante da regra de quantização acima, bem como correções de ordem $\frac{1}{N}$, consultando a referência [7].

⁷Para um esclarecimento sobre os termos “rotação” e “libração” em sistemas de spins, ver o último parágrafo do capítulo 3.

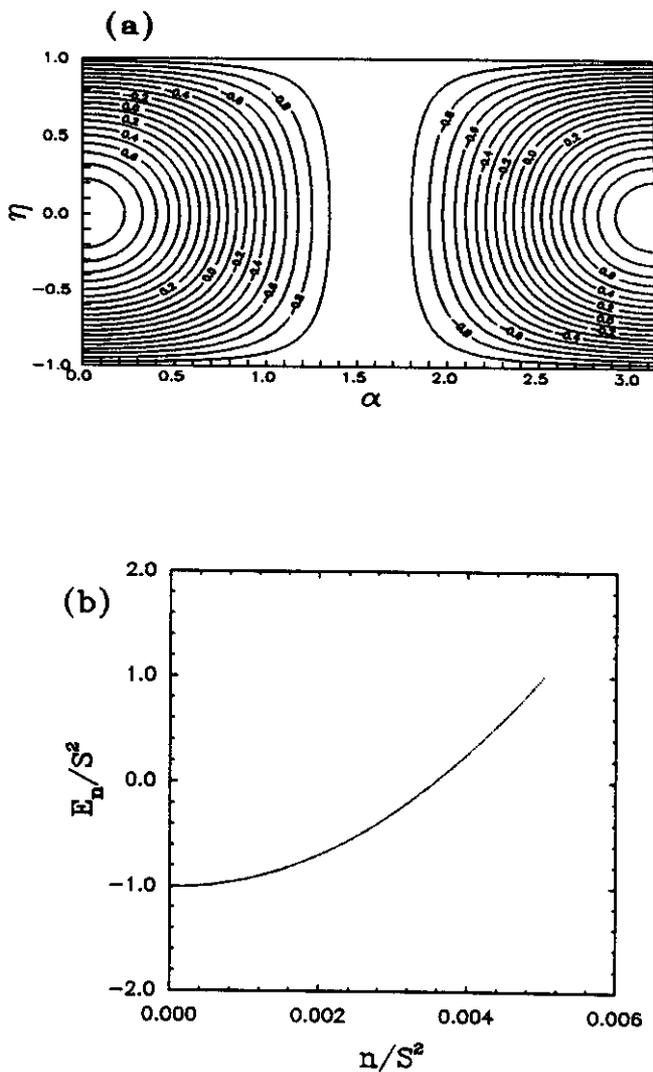


Figura 5.5: (a) Órbitas periódicas correspondentes à fig. 5.3(c) para $\sigma = 0.0$ e energias $\mathcal{E}_2 = -0.9, -0.8, \dots, 0.9$. A linha de pontos de mínimo é dada pela reta $\alpha = \frac{\pi}{2}$ com energia $\mathcal{E}_2 = -1.0$ e os pontos de máximo estão em $(\alpha = 0, \eta = 0)$ e $(\alpha = \pi, \eta = 0)$; (b) distribuição espectral para $\sigma = 0.0$ e $S = 200$, mostrando que o ponto de inflexão desaparece neste caso isotrópico.

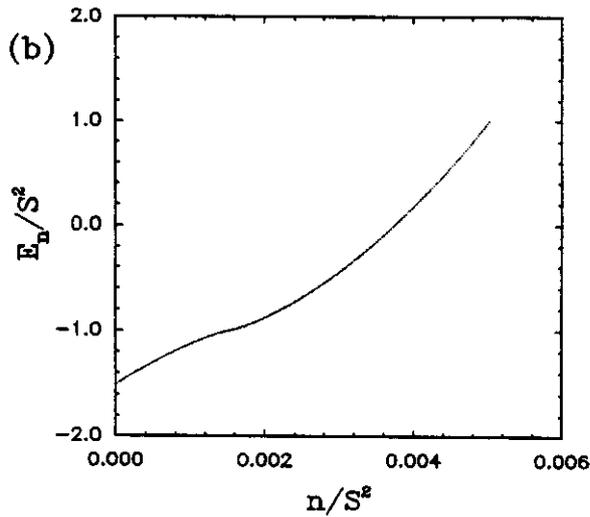
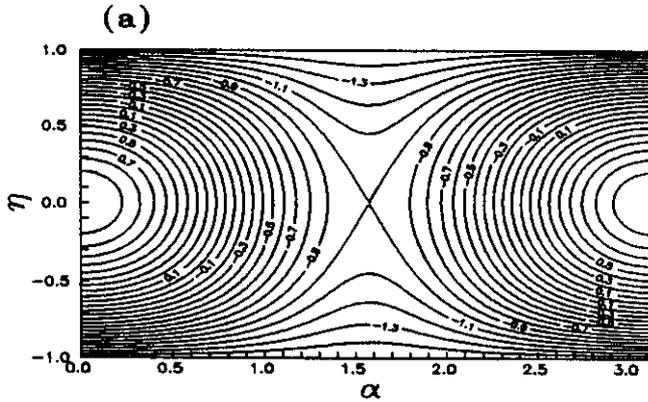


Figura 5.6: (a) Órbitas periódicas correspondentes à fig. 5.3(d) para $\sigma = 0.5$, mostrando a mudança em suas características: para $\mathcal{E}_2 = -1.5, -1.4, \dots, -1.1$ as órbitas são do tipo “rotação” e a separatriz aparece em $\mathcal{E}_2 = -1.0$; para $\mathcal{E}_2 = -0.9, -0.8, \dots, 0.9$ elas são do tipo “libração”; os dois pontos de máximo estão em $(\alpha = 0, \eta = 0)$ e $(\alpha = \pi, \eta = 0)$; (b) distribuição espectral para $\sigma = 0.5$ e $S = 200$, mostrando o ponto de inflexão com energia $\frac{E_n}{S^2} = -1.0$ coincidindo com a energia da separatriz clássica.

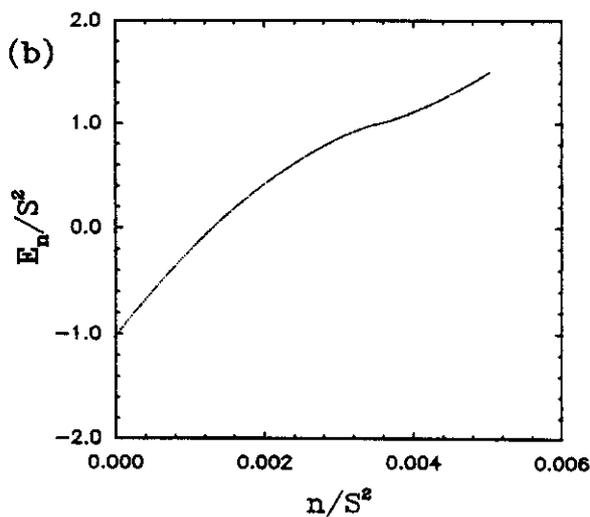
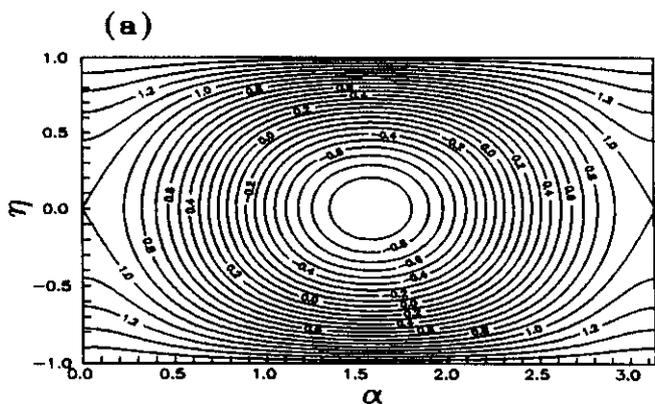


Figura 5.7: (a) Órbitas periódicas para $\sigma = -2.5$; aqui, como no fig. 5.3(a), pode-se ver a mudança em sua natureza: “rotações” para $\mathcal{E}_2 = 1.1, 1.2, \dots, 1.4$ e “librações” para $\mathcal{E}_2 = -0.9, -0.8, \dots, 0.9$; a órbita separatriz tem energia $\mathcal{E}_2 = 1.0$ e o ponto de mínimo situa-se em $(\alpha = \frac{\pi}{2}, \eta = 0)$; (b) distribuição espectral para $\sigma = -2.5$ e $S = 200$; a energia do ponto de inflexão, $\frac{E_n}{S^2} = 1.0$, coincide, também aqui, com a energia da órbita clássica separatriz.

No nosso caso a correspondência entre a ação (eq. 4.8)

$$\mathcal{J} = 2S \oint \eta d\alpha \quad (5.11)$$

e o número quântico n do n -ésimo nível de energia E_n pode ser simplificada. Como já temos as órbitas, não se trata de refazer todo o caminho para a quantização de funções de onda ligadas a toros invariantes [5]. Iremos apenas contrapor as curvas $\frac{E_n}{S^2} \times \frac{n}{S^2}$ e $\mathcal{E}_2 \times \frac{n(\mathcal{J})}{S^2}$, e verificar a correspondência

$$\mathcal{J} \leftrightarrow 2 \times (2\pi n) \quad (5.12)$$

no limite de valores grandes para S . Lembremos que estamos tomando $\hbar = 1$ e que o índice de Maslov tem aqui conseqüências desprezíveis, uma vez que estamos dividindo todas as quantidades por S^2 .

Antes das curvas, um último lembrete. A regra de quantização exibida na equação 5.10 não leva em conta o fato de que estamos tratando com spins idênticos. Ao simetrizarmos a função de onda, estamos eliminando vários vetores de estado do espaço de Hilbert que, de resto, levariam a resultados fisicamente inconsistentes [57]. No caso do sistema de dois spins, há $2S + 1$ estados $|S, m_k; S, -m_k\rangle$ satisfazendo $\langle T_2^z \rangle = 0$, mas apenas $S + 1$ estados simetrizados

$$|m_k, -m_k\rangle = \frac{1}{2!} [|S, m_k; S, -m_k\rangle + |S, -m_k; S, m_k\rangle]. \quad (5.13)$$

Ou seja, no limite de grandes valores para S , o número de níveis de energia obtidos após simetrização da função de onda é aproximadamente a metade do que seria obtido sem a simetrização. Como as órbitas clássicas são idênticas localmente ⁸, trate-se de spins distinguíveis ou não, explica-se o fator 2, extraordinário, presente na equação 5.12. Construimos, então, a curva $\mathcal{E}_2 \times \frac{\mathcal{J}(\mathcal{E}_2)}{4\pi S^2}$, onde $\mathcal{J}(\mathcal{E}_2)$ é a ação da órbita clássica de energia \mathcal{E}_2 , apresentada na figura 5.8(a) juntamente com o espectro quântico $\frac{E_n}{S^2} \times \frac{n}{S^2}$ para o mesmo valor de σ do caso clássico e valor grande de S . Como se pode ver, não há diferença apreciável entre as curvas, senão por ampliação de regiões, como a do retângulo da figura 5.8(a). A equiparação entre as curvas mantém-se por toda a extensão do espectro, valendo também para a região correspondente à separatriz, mostrada na figura 5.8(b) como ampliação da área em torno do ponto de inflexão (retângulo da fig. 5.8(a)). A concordância entre estas curvas é tão melhor quanto maior o valor de S , confirmando a sugestão inicial de que a curva clássica representa a curva universal para a qual tende o espectro quântico no limite $S \rightarrow \infty$.

Na obtenção das ações clássicas foi feita a integração numérica da área do plano (α, η) delimitada pelas órbitas. Estas integrações podem ser feitas analiticamente e

⁸Ver, entretanto, os resultados do capítulo 7 para uma manifestação clássica da identidade dos spins, que tem um caráter global.

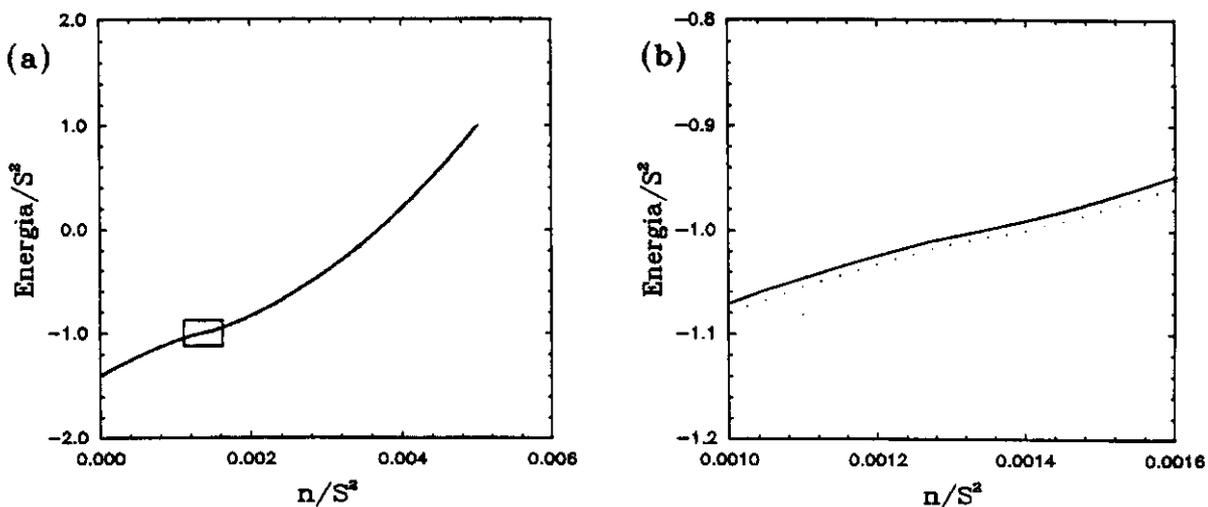


Figura 5.8: (a) Energia clássica \mathcal{E}_2 versus $\frac{\mathcal{J}}{4\pi S^2}$ (linha contínua) e distribuição espectral $\frac{E_n}{S^2} \times \frac{n}{S^2}$ (pontos isolados) para $\sigma = 0.4$; (b) ampliação da área delimitada pelo retângulo da parte (a).

as ações podem, então, ser descritas por meio de funções conhecidas. São expressões pouco atraentes, todavia, devido às integrais elípticas dadas pelo integrando $\eta(\alpha, \mathcal{E}_2)$ (eq. 5.9). Tendo $\mathcal{J}(\mathcal{E}_2)$, pode-se calcular analiticamente o período τ das órbitas, através de

$$\tau = \frac{\partial \mathcal{J}}{\partial \mathcal{E}_2}. \quad (5.14)$$

Para as energias $\left(\frac{E_n}{S^2}\right)_{ip}$, correspondentes ao ponto de inflexão dos espectros quânticos, este cálculo mostra que, de fato, os períodos das órbitas clássicas tendem a infinito no limite $\mathcal{E}_2 \rightarrow \left(\frac{E_n}{S^2}\right)_{ip}$, como se espera para órbitas clássicas separatrizes. Tanto as expressões para a ação $\mathcal{J}(\mathcal{E}_2)$ como para o período τ estão explicitadas no Apêndice A.

5.3 Discussão

Vimos neste capítulo algumas características dos modelos de Heisenberg de dois spins, que se manifestam no limite semiclássico. Além das confirmações do comportamento de escala do espectro quântico para valores grandes de spin, comportamento típico dos sistemas de Curie-Weiss, e da regra de quantização de Bohr-Sommerfeld, que se espera valer para sistemas integráveis, apresentamos um resultado relacionado à forma da curva espectral. Resumindo, a presença de um ponto de inflexão no

espectro quântico do sistema de dois spins indica a existência de uma órbita separatriz no espaço de fase do sistema clássico associado. Este resultado pode tornar-se interessante, dada a importância da região em torno das órbitas separatrizes para o estudo de manifestações de caos e integrabilidade em sistemas dinâmicos clássicos.

Entretanto, o sistema de Heisenberg de dois spins apresenta algumas características simplificadoras e aparentemente limitantes.

Em primeiro lugar, seus espectros quânticos são não-degenerados, o que possibilita uma curva contínua e bem comportada no limite clássico $S \rightarrow \infty$, bem como uma boa definição do que sejam ponto de inflexão ou concavidade. Degenerescências no espectro semiclássico, comuns diga-se, podem inviabilizar não apenas a curva em si, mas sobretudo a existência de um ponto de inflexão.

Em segundo lugar, o sistema de dois spins possui espaço de fase bidimensional, correspondendo a um sistema dinâmico com um grau de liberdade apenas. Sistemas de mais de um grau de liberdade apresentam, em geral, comportamento mais complexo e rico do que aqueles. Isto posto, seria difícil esperar que sistemas de spins de dois ou mais graus de liberdade acompanhassem o comportamento relativo à presença de um ponto de inflexão no espectro quântico.

Ainda assim, o principal resultado deste capítulo pode ser bastante útil no estudo de sistemas mais complexos. Veremos no próximo capítulo que, para o sistema de Heisenberg de três spins – um sistema de três graus de liberdade e com espectro degenerado – um análogo do ponto de inflexão também se apresenta, permitindo-nos estabelecer uma correspondência similar àquela que exibimos neste capítulo. Para o sistema de três spins, ela será tanto mais interessante quanto se puder explorar o comportamento caótico que se sabe ocorrer naquele sistema.

Capítulo 6

Manifestações clássicas e quânticas de quebra de simetria no modelo de Heisenberg de três spins

Uma abordagem similar àquela vista no capítulo 5, pode ser efetuada também no caso do modelo de Heisenberg de três spins, em que pesem as degenerescências de seus espectros e seu comportamento caótico para $\sigma \neq 0$ [16]. Para este modelo, entretanto, as degenerescências pedem um tratamento preliminar dos espectros quânticos, antes de se estabelecer a correspondência entre estes espectros e a dinâmica clássica associada, como exibida para o caso de dois spins. Neste capítulo apresentaremos uma análise numérica algo detalhada dos espectros quânticos e mostraremos que aspectos importantes das relações entre quebra de simetria, integrabilidade e caos no modelo de Heisenberg de três spins podem ser evidenciados através de dois tipos bastante simples de gráficos: aquele em que se mostra os espaçamentos Δ_n entre níveis de energia vizinhos versus o índice n do nível, e os gráficos de correlação $\Delta_{n+1} \times \Delta_n$ ¹. Para o sistema de dois spins, estes gráficos trazem não apenas a correspondência vista no capítulo 5 e na ref. [52], mas estendem as possibilidades de informação sobre o sistema clássico, a ser obtida tão somente da análise dos espectros quânticos. Interessante para nossos objetivos neste capítulo, o caso de dois spins é um excelente guia para os procedimentos a serem observados e as análises a serem feitas no caso mais complexo de três spins. Como resultados a serem notados no modelo de três spins, veremos que os gráficos $\Delta_n \times n$ e $\Delta_{n+1} \times \Delta_n$ mostram claramente o intervalo de energias onde o caos começa a se manifestar e também aquele para o qual a dinâmica clássica correspondente mostra a coexistência de órbitas re-

¹Um conjunto parcial dos resultados apresentados neste capítulo compõe um artigo que se encontra aceito para publicação em *Chaos* [58].

gulares e caóticas. Além destes resultados, os gráficos estabelecem um valor crítico de energia, acima do qual a dinâmica clássica associada é sabidamente regular [16].

Estudos semelhantes, que traziam a proposição dos gráficos $\Delta_n \times n$ e $\Delta_{n+1} \times \Delta_n$ como indicadores de caos quântico – e objeções a esta proposição –, foram feitos para sistemas de espaço de Hilbert infinitos [59, 60, 61, 62], isto é, sistemas para os quais o limite clássico é atingido quando o índice n do nível de energia tende a infinito. Sistemas de spins mostram diferenças importantes. O espaço de Hilbert finito (para valores finitos de S) fornece espectros finitos, como resultado dos graus de liberdade associados a spins. Com a propriedade de escala para valores grandes de S , conhecida para estes modelos de Heisenberg [52], podemos dividir todas as energias do espectro por $J\hbar^2 S(S+1)$. Esta operação fixa os extremos inferior e superior do espectro em valores independentes de S (para S grande), permitindo-nos explorar o espectro por inteiro no limite semiclássico, sem a necessidade de se suprimir os níveis de energia mais baixos, como é usual proceder em se tratando de sistemas de partículas. Pela mesma razão, e uma vez que o limite clássico em sistemas de spins aproxima-se com valores crescentes de S , o controle de S permite também o controle da aproximação ao limite clássico para o espectro como um todo. Como corolário desta propriedade, este controle de S significa também uma maneira de se estudar e controlar a densidade de níveis de energia numa dada região do espectro. Assim, as características destes sistemas de Heisenberg, resultantes da finitude do espaço de Hilbert e do bem definido limite clássico, conformam uma situação diferente, comparada com os casos de sistemas de partículas. Numa tal situação de sistemas de spins, veremos que os gráficos usados originalmente por H. Hirooka *et al.* [59] num contexto de partículas podem proporcionar muita informação, e de maneira que pode ser facilmente traduzida em termos de conceitos físicos básicos.

Para mostrarmos o que foi proposto nos parágrafos anteriores, estudamos os modelos anisotrópicos de Heisenberg de dois e três spins relativamente aos efeitos que ocorrem em três situações distintas:

- i*) efeito de quebra de simetria no modelo de dois spins, sem quebra de integrabilidade;
- ii*) efeito do aumento do número de graus de liberdade, através do aumento do número de spins, mantendo a integrabilidade;
- iii*) efeito de quebra de simetria no modelo de três spins com concomitante quebra de integrabilidade.

No caso integrável do modelo de dois spins (item *i*)), a quebra de simetria provoca uma dobra na curva de correlação $\Delta_{n+1} \times \Delta_n$. Apesar do alto grau de degenerescência do espectro para o modelo de três spins (item *ii*)) isotrópico, um resultado análogo

para a curva de correlação pode ser obtido, removendo-se as degenerescências do espectro através de um procedimento bastante simples: toma-se um único nível como representante para cada grupo de níveis degenerados e usa-se este “espectro” selecionado para o estudo de $\Delta_{n+1} \times \Delta_n$. Com este procedimento obtém-se uma curva similar àquela obtida para o caso de dois spins isotrópico. Baseados neste resultado, utilizamos este mesmo procedimento para estudar situações em que a integrabilidade é quebrada no modelo de três spins através de ligeiros desvios do caso isotrópico (item *iii*)).

Ainda que se possa adentrar regiões do parâmetro de anisotropia onde o regime dinâmico seja predominantemente caótico, veremos que o aspecto mais interessante do uso dos gráficos propostos acima está na possibilidade de se trabalhar em regiões de transição entre regimes dinâmicos fraca e moderadamente caóticos. Nestas regiões estes gráficos podem ser úteis, fornecendo indicações sobre onde aplicar técnicas mais sofisticadas no estudo de manifestações de caos em sistemas quânticos. Além disso, eles podem ser facilmente aplicáveis a casos em que seja difícil a separação de simetrias como preparação para aplicação de técnicas baseadas na Teoria de Matrizes Aleatórias [50].

O restante deste capítulo está organizado como segue. Na seção 6.1 apresentamos algumas características gerais e comuns a ambos os sistemas de dois e três spins. Na seção 6.2 analisamos o modelo de dois spins, apresentando alguns resultados conhecidos desde o capítulo anterior e os gráficos $\Delta_{n+1} \times \Delta_n$ e $\Delta_n \times n$ para este modelo. Na seção 6.3 seguimos o mesmo procedimento para o caso de três spins e os resultados obtidos são comparados com o caso “guia” de dois spins estudado na seção 6.2. Para facilitar a apresentação e o entendimento do papel da quebra de simetria, dividimos as seções seguintes em três partes: um pequeno resumo das propriedades do modelo em questão, caso isotrópico e caso anisotrópico (no caso de três spins há ainda uma seção com resultados da dinâmica clássica associada, para confirmação dos resultados obtidos). Uma última seção é dedicada a discussões e comentários.

6.1 Características gerais dos modelos

Nas seções seguintes estaremos estudando os modelos

$$H_2 = J(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \sigma S_1^z S_2^z) \quad (6.1)$$

e

$$H_3 = J \sum_{l=1}^3 (\mathbf{S}_l \cdot \mathbf{S}_{l+1} + \sigma S_l^z S_{l+1}^z), \quad (6.2)$$

onde $\mathbf{S}_4 \equiv \mathbf{S}_1$, J e o parâmetro de anisotropia σ são números reais, e S_l^x, S_l^y, S_l^z ($l = 1, 2, 3$) correspondem aos operadores de spin $SU(2)$. Daremos

atenção especial à transição do caso isotrópico ($\sigma = 0$) ao caso anisotrópico ($\sigma \neq 0$). Também neste capítulo usaremos $\hbar = 1$ e $|\mathbf{S}_l| = S$ ($l = 1, 2, 3$).

Notemos antes de tudo as seguintes propriedades, válidas para os sistemas de dois e três spins e que fundamentarão os procedimentos a serem seguidos nas próximas seções:

i) Os espaços de Hilbert associados aos sistemas 6.1 e 6.2 são finitos. Esta propriedade decorre da álgebra de Lie associada ao grupo $SU(2)$, gerado pelos operadores de spins, e garante que os espectros de energia desses sistemas são também finitos.

ii) Os sistemas 6.1 e 6.2 têm limites clássicos bem definidos. Como visto no capítulo 5 e na ref. [52], estes modelos de Heisenberg pertencem à classe de modelos de Curie-Weiss e são caracterizados pelo comportamento de escala para valores grandes de S . Esta propriedade garante a existência de seus limites clássicos, que, mostra-se, são únicos para estes modelos de Heisenberg.

iii) A quebra de isotropia tem efeitos importantes sobre a integrabilidade dos modelos. Enquanto o modelo de dois spins é integrável para todos os valores de σ [52], o modelo de três spins é integrável para $\sigma = 0$ e não-integrável para $\sigma \neq 0$ (e $S > \frac{1}{2}$), como mostrado por K. Nakamura e A.R. Bishop [16]. Este último caso apresenta espaço de fase associado e espectro de energia possuindo, ambos, regiões de movimento regular, associadas a órbitas periódicas, e regiões de movimento irregular, associadas pelos autores a movimento caótico e destruição de toros KAM.

6.2 O modelo de dois spins

6.2.1 Resumo do modelo

O modelo de Heisenberg anisotrópico para dois spins

$$H_2 = J(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \sigma S_1^z S_2^z). \quad (6.3)$$

tem a energia e a componente z do spin total $\mathbf{T}_2 = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$ como constantes de movimento:

$$[H_2, T_2^z] = 0. \quad (6.4)$$

Como estaremos tomando spins idênticos, $|\mathbf{S}_1| = |\mathbf{S}_2| = S$, diagonalizamos H_2 , usando como base o conjunto de estados simetrizados de spins

$$|m_1 m_2\rangle \equiv \frac{1}{2!} [|S, m_1; S, m_2\rangle \pm |S, m_2; S, m_1\rangle], \quad (6.5)$$

em que o sinal $+$ ($-$) corresponde a estados bosônicos (fermiônicos). Em toda esta seção vamos nos restringir ao subespaço onde $\langle T_2^z \rangle = 0$, o que implica a relação

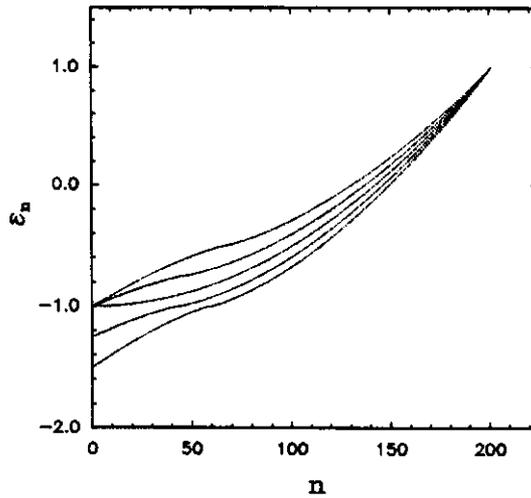


Figura 6.1: Distribuições espectrais do sistema de dois spins para $S = 200$ e alguns valores do parâmetro de anisotropia: $\sigma = -0.5, -0.25, 0.0, 0.25, 0.5$. Os espectros inferiores correspondem aos maiores valores de σ .

$m_1 + m_2 = 0$ para m_1 e m_2 , os números quânticos respectivamente correspondentes aos operadores S_1^z e S_2^z . Restringimo-nos também ao caso $J > 0$ com $J = 1^2$, e valores inteiros para S , o que significa que estaremos lidando com o caso bosônico (sinal + na eq. 6.5)³.

Exemplos típicos de espectros que estaremos analisando podem ser vistos na figura 6.1 para $S = 200$ (suficientemente grande para ilustrar nossos resultados) e alguns valores do parâmetro de anisotropia σ .

O comportamento de escala para valores grandes de S pode ser verificado novamente na figura 6.2: conforme S tende a infinito, o espectro quântico tende a seu limite clássico na forma de uma curva universal. Enfatizamos que, para o modelo de dois spins, os espectros são todos não-degenerados. Note-se também que em todas estas figuras os valores de energia do espectro quântico E_n foram divididos convenientemente pelo fator $J\hbar^2 S(S+1)$. Este fator de escala fixa os extremos do espectro escalado \mathcal{E}_n em valores que, no limite clássico, não dependem de S , dependendo apenas de σ . Decorre disto, como se pode ver na figura 6.2, que para um dado valor de σ o número de níveis de energia aumenta com S , diminuindo conseqüentemente o espaçamento entre dois níveis vizinhos. Como está detalhado no Apêndice B, este

²Toda análise apresentada neste capítulo pode ser feita de modo análogo para o caso $J < 0$ com uma troca de sinal em todos os valores de energia.

³O caso fermiônico é estudado de maneira idêntica.

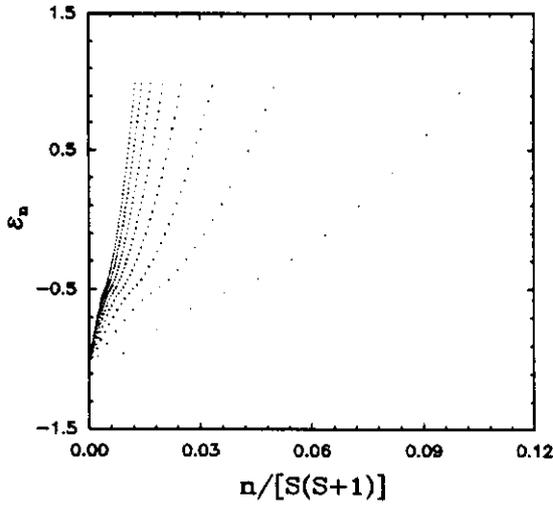


Figura 6.2: Distribuições espectrais do sistema de dois spins para um único valor do parâmetro de anisotropia, $\sigma = -0.5$, e vários valores de spin, $S = 10, 20, 30, \dots, 80$. Note-se como a distribuição espectral tende a uma curva limitante conforme S aumenta seu valor.

procedimento permite um controle quantitativo da aproximação ao limite clássico, variando-se o valor de S .

6.2.2 Caso isotrópico ($\sigma = 0$)

As figuras 6.3(a)–6.3(c) mostram o caso isotrópico ($\sigma = 0$) do modelo de dois spins para $S = 200$. O espectro é visto na figura 6.3(a) e nas figuras 6.3(b) e 6.3(c) graficamos respectivamente $\Delta_{n+1} \times \Delta_n$ e $\Delta_n \times n$, onde

$$\Delta_n = \mathcal{E}_{n+1} - \mathcal{E}_n \quad (6.6)$$

é a diferença entre os níveis de energia (escalada) de índices $n + 1$ e n . Estas figuras mostram espectros típicos de rotores quânticos e serão úteis para se estabelecerem conceitos e vocabulário que aparecerão nas próximas seções.

Um dos pontos a se explorar diz respeito ao controle quantitativo da aproximação ao limite clássico. A análise dos dados da figura 6.3(a), feita no apêndice B, mostra que para $S = 200$ estamos trabalhando com $\hbar \approx 5 \times 10^{-3}$. Uma vez seguros de que estamos em um regime que pode ser considerado aproximadamente clássico, podemos obter muita informação dos gráficos. Por exemplo, a figura 6.3(c) reflete

a densidade de estados ρ por unidade de energia

$$\rho = \frac{1}{\frac{d\mathcal{E}}{dn}}, \quad (6.7)$$

que é maior para baixos valores de energia. Em certo sentido podemos dizer que a região em torno do mínimo de energia na figura 6.3(a), com $\mathcal{E} = -1.0$, adquire características semiclássicas “mais rapidamente” do que as outras regiões; um comportamento que pode ser útil para indicar onde poderemos aplicar com segurança métodos mais sofisticados para estudo de caos e outras estruturas clássicas⁴. Comportamento análogo parece ocorrer em outros sistemas integráveis de espaço de Hilbert finito, como o modelo de Lipkin $SU(2)$ [46].

No capítulo 5 e na ref. [52] tiramos proveito da existência do limite clássico para estabelecer a correspondência entre os espectros quânticos e as ações das órbitas periódicas clássicas, obtidas para este modelo através do uso de estados coerentes. Apresentamos aqui um argumento simples segundo o qual aquela correspondência pode ser estabelecida diretamente pelo gráfico $\Delta_n \times n$. Na figura 6.3(c) o passo na variável n é $dn = 1$. Logo, na figura temos de fato

$$\mathcal{E}_{n+1} - \mathcal{E}_n = \frac{\mathcal{E}_{n+dn} - \mathcal{E}_n}{dn}. \quad (6.8)$$

No limite semiclássico temos simplesmente $\frac{d\mathcal{E}}{dn}$ e n é, à parte fatores de escala, a ação \mathcal{J} da órbita periódica de energia \mathcal{E} . Portanto, temos

$$\frac{\mathcal{E}_{n+dn} - \mathcal{E}_n}{dn} \approx A \frac{d\mathcal{E}}{d\mathcal{J}} = A\nu, \quad (6.9)$$

a frequência (escalada) ν da órbita periódica correspondente (a constante A dá conta de fatores de escala). Pode ser visto na figura 6.3(c) que, como decorrência da finitude do espaço de Hilbert associado e da integrabilidade deste caso, o gráfico $\Delta_n \times n$ revela um intervalo finito de frequências bem definidas para as órbitas periódicas⁵.

Como observação final a respeito de isotropia, anotamos que sua manifestação imediatamente visível é a linha mostrada na figura 6.3(b). Esta manifestação da isotropia reflete-se na figura 6.3(c) como uma correspondência unívoca: a cada frequência permitida está associada uma energia única, ou, em outras palavras, uma única órbita periódica.

⁴Para métodos semiclássicos relacionados à representação de estados coerentes, ver por exemplo as referências [7, 63, 64].

⁵As frequências indicadas na figura 6.3(c) poderiam fornecer, com fatores de escala apropriados, uma estimativa simples do período das órbitas. Embora grosseira, esta estimativa permitir-nos-ia evitar a integração numérica das equações de movimento e as integrais elípticas presentes nos cálculos (ver ref. [52]).

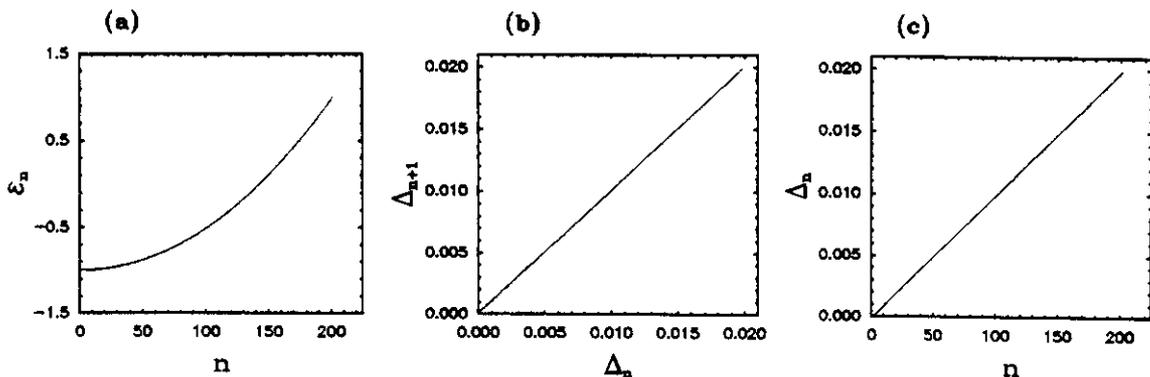


Figura 6.3: O caso isotrópico para dois spins ($S = 200$ e $\sigma = 0.0$): (a) distribuição espectral; (b) correlação $\Delta_{n+1} \times \Delta_n$ entre diferenças de energia; (c) diferença entre níveis de energia Δ_n versus índice n do nível.

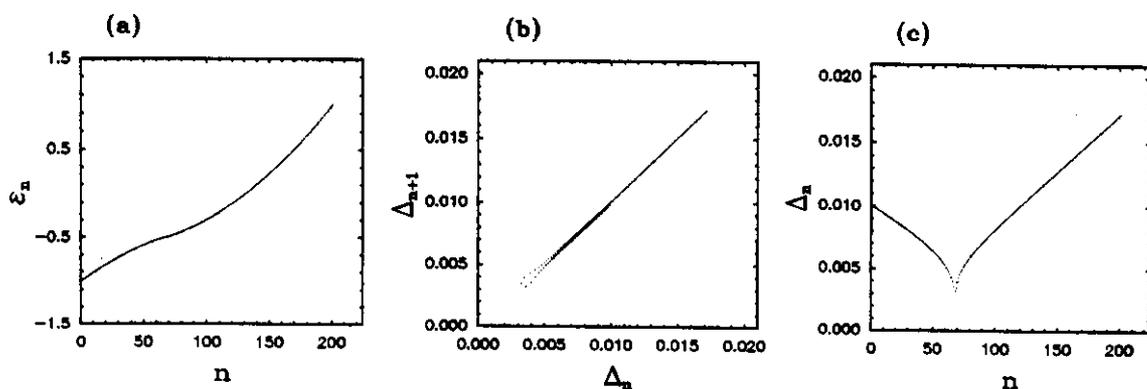


Figura 6.4: Semelhante à fig. 6.3. Aqui mostra-se o caso anisotrópico ($S = 200$ e $\sigma = -0.5$).

6.2.3 Caso anisotrópico ($\sigma \neq 0$)

O caso anisotrópico para dois spins está representado no conjunto de figuras 6.4(a)–6.4(c) para $\sigma = -0.5$ e $S = 200$. Observe-se que a quebra de isotropia altera a curva espectral, aparecendo então um ponto de inflexão em $\mathcal{E}_{i,p} = -1.0 + |\sigma|$ para $-1.0 \leq \sigma \leq 0.0$ (veja figura 6.4(a)). Ademais, o ponto do espectro de maior densidade de níveis, mostrado na figura 6.4(c) como um pico invertido, acompanha este ponto de inflexão, conforme variamos o valor de σ . O comentário acerca do limite clássico apresentado nas subseções anteriores e no apêndice B continua válido, e na figura 6.4(b) vemos que há uma correlação entre Δ_{n+1} e Δ_n também neste caso. Embora não seja uma relação tão simples como no caso $\sigma = 0$ (veja expressão B.1 no apêndice B), pode-se garantir que aqui também estamos seguros no que diz respeito à aproximação semiclássica, o caso isotrópico atuando como um calibrador para esta aproximação.

A figura 6.4(c) revela, como na subseção anterior, um intervalo finito de frequências com um ponto especial onde a frequência tende a zero à medida que o limite clássico vai sendo aproximado. Pode-se, então, assegurar a existência de uma órbita periódica – pois o sistema é integrável – de período infinito e associada ao pico invertido. Esta afirmativa concorda com os resultados do capítulo 5 e ref. [52] onde mostramos que o ponto de inflexão no espectro corresponde à órbita separatriz com período infinito, como calculado no apêndice A. Além disso, como pode ser visto na figura 6.4(c), este ponto de inflexão está no centro da região de maior densidade de níveis de energia. Pode-se mostrar também que a densidade de níveis ρ tem sua variação máxima com o aumento de S no ponto de inflexão, isto é, $\frac{d\rho}{dS}$ tem um máximo positivo no ponto de inflexão. Espera-se, portanto, que numa versão não-integrável do modelo, o comportamento caótico se manifeste de maneira mais pronunciada nesta região. Sabe-se que o modelo de dois spins pode tornar-se caótico com a introdução de anisotropias locais [33]. Assim, a figura 6.4(c) sugere que a região em torno do ponto de inflexão, ou seja, em torno da órbita separatriz, seria a região apropriada para se buscar manifestações da dinâmica clássica caótica. Esta sugestão concorda com nossa expectativa de que, à medida que o comportamento caótico se revela, é na região próxima à separatriz que começam a aparecer órbitas irregulares.

Com respeito à quebra de isotropia, vemos na figura 6.4(b) que a linha reta do caso isotrópico (veja figura 6.3(b)) apresenta agora uma dobra, em que o ramo inferior corresponde ao ramo do espectro quântico à esquerda do pico invertido. Nota-se também, na figura 6.4(c), que neste caso anisotrópico a correspondência entre frequências e energias já não é unívoca: na região em torno da frequência mais baixa existem duas energias diferentes, isto é, duas órbitas com o mesmo período.

6.3 O modelo de três spins

6.3.1 Resumo do modelo

O modelo de Heisenberg de três spins é representado pelo hamiltoniano 6.2

$$H_3 = J \sum_{l=1}^3 (\mathbf{S}_l \cdot \mathbf{S}_{l+1} + \sigma S_l^z S_{l+1}^z), \quad (6.10)$$

em que $\mathbf{S}_4 \equiv \mathbf{S}_1$. Vamos nos concentrar no caso $J > 0$, fixar $J = 1$ e tomar iguais valores para os spins, $|\mathbf{S}_l| = S$ ($l = 1, 2, 3$).

Como no caso anterior de dois spins, este modelo tem como constante de movimento a componente T_3^z do spin total

$$\mathbf{T}_3 = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3, \quad (6.11)$$

já que

$$[H_3, T_3^z] = 0, \quad (6.12)$$

e, também como no modelo anterior, estaremos trabalhando sempre com o subespaço onde $\langle T_3^z \rangle = 0$. Para referência futura anotamos aqui que o operador \mathbf{T}_3^2 também é constante de movimento no caso isotrópico $\sigma = 0$. Como cada \mathbf{S}_l^2 é individualmente uma constante, a expressão para \mathbf{T}_3^2 , resultante da eq. 6.11 fica

$$\mathbf{T}_3^2 = 3S(S+1) + 2 \sum_{l=1}^3 \mathbf{S}_l \cdot \mathbf{S}_{l+1}. \quad (6.13)$$

Notemos que o segundo termo do lado direito da eq. 6.13 é justamente o hamiltoniano H_3 com $\sigma = 0$ (e $J = \frac{1}{2}$).

A diagonalização de H_3 é feita usando-se a base (anti)simetrizada de estados de spins para S (semi)inteiros:

$$\begin{aligned} |m_1 m_2 m_3\rangle \equiv & \frac{1}{3!} \{ |S, m_1; S, m_2; S, m_3\rangle + |S, m_3; S, m_1; S, m_2\rangle \\ & + |S, m_2; S, m_3; S, m_1\rangle \pm [|S, m_3; S, m_2; S, m_1\rangle \\ & + |S, m_1; S, m_3; S, m_2\rangle + |S, m_2; S, m_1; S, m_3\rangle] \}. \end{aligned} \quad (6.14)$$

Aqui, mais uma vez, o sinal $+$ ($-$) corresponde ao caso bosônico (fermiônico) e restringimo-nos a valores inteiros de S (sinal $+$ na eq. 6.14), tomando $m_1 + m_2 + m_3 = 0$ para satisfazer $\langle T_3^z \rangle = 0$.

Espectros típicos para o modelo de três spins são mostrados na figura 6.5(a) para $S = 50$ e alguns valores do parâmetro de anisotropia σ . A região de dentro do retângulo desta figura está ampliada na figura 6.5(b). Nestas figuras podemos ver que o espectro do caso isotrópico é altamente degenerado, exibindo o aspecto de

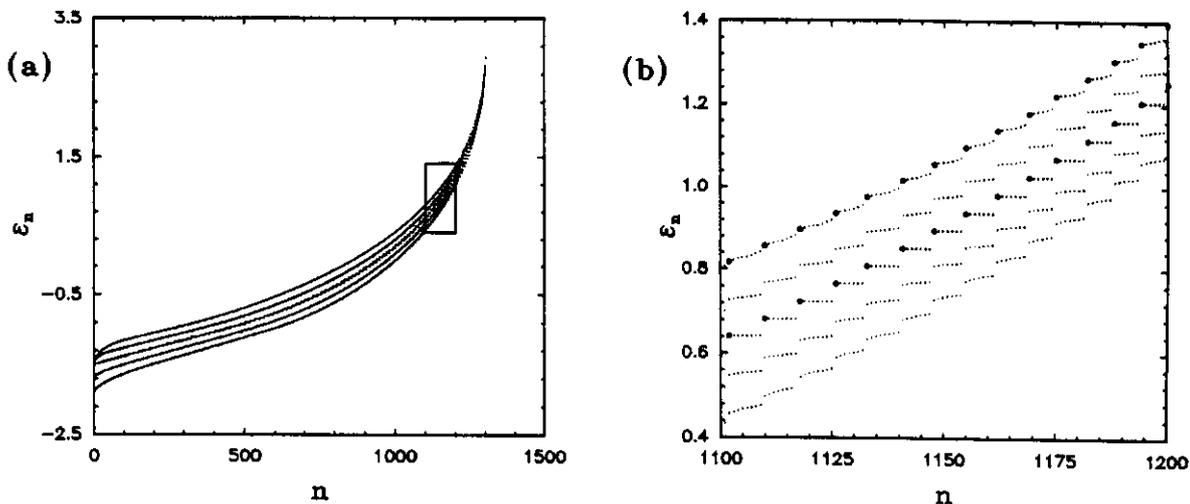


Figura 6.5: (a) Distribuições espectrais do sistema de três spins para $S = 50$ e alguns valores do parâmetro de anisotropia: $\sigma = -0.5, -0.25, 0.0, 0.25, 0.5$. Os espectros inferiores correspondem aos maiores valores de σ ; (b) Ampliação do retângulo da parte (a), onde as bolinhas pretas ilustram o procedimento de seleção de espectros apropriados em dois casos: $\sigma = 0.0$ e $\sigma = -0.5$ (pontos superiores).

uma escada. Este deve-se às muitas maneiras de se obter o mesmo valor para $\langle T_3^2 \rangle$, combinando-se três spins sob a condição $\langle T_3^z \rangle = 0$. À medida que fazemos σ ligeiramente diferente de zero, os degraus do espectro isotrópico distorcem-se adiabaticamente (veja figura 6.5(b)). Além disso, para um dado valor de σ , esta distorção dos degraus é mais pronunciada na parte inferior do espectro para o caso anisotrópico, enquanto em sua parte superior o espectro mantém-se mais próximo ao espectro do caso isotrópico. Esta transição ocorre suavemente, de modo que não se pode apontar nestes espectros valores bem definidos de energia que mostrem claramente o início desta mudança de característica.

A figura 6.6 mostra o comportamento de escala para valores grandes de S , válido também para este modelo de três spins. Este comportamento é similar àquele observado na figura 6.2 para o modelo de dois spins, exceto pelo fato de que aqui temos espectros degenerados ou quase degenerados. Embora este fato impeça que se fale de uma *curva* universal limitante, existe um espectro universal limitante também neste caso. À parte este detalhe, toda análise da figura 6.2 pode ser transportada para a figura 6.6. É interessante notar que os espectros obtidos para casos anisotrópicos (por exemplo para $\sigma = -0.5$) exibem claramente duas regiões de curvaturas distintas, invocando a imagem de um ponto de inflexão, como nos espectros para o caso integrável do sistema de dois spins.

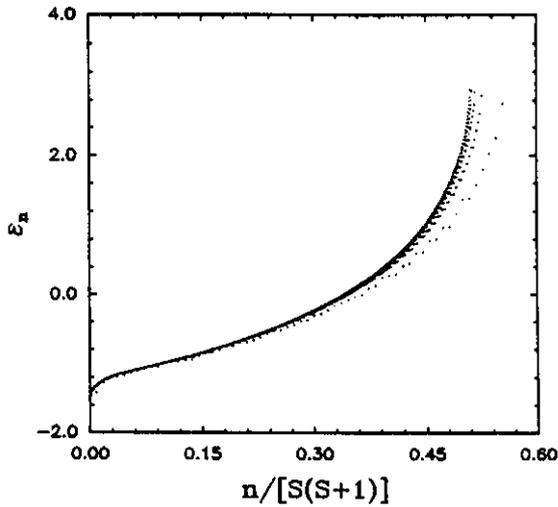


Figura 6.6: Distribuições espectrais do sistema de três spins para um único valor do parâmetro de anisotropia, $\sigma = -0.5$, e vários valores de spin, $S = 10, 20, 30, 40, 50$. Note-se como a distribuição espectral tende a um espectro limitante conforme S aumenta seu valor.

Por outro lado, degenerescências e quase-degenerescências fazem bastante diferença nos gráficos $\Delta_{n+1} \times \Delta_n$ e $\Delta_n \times n$. Níveis degenerados dão lugar a pontos sobre o eixo $\Delta_n = 0$ no caso isotrópico ($\sigma = 0$) e não são bons para se trabalhar, se queremos comparar os gráficos resultantes com aqueles do modelo de dois spins (não-degenerados). Para a comparação fazer sentido e obtermos alguma informação dos espectros para três spins, o procedimento mais simples consiste em eliminar as degenerescências apenas contando como um único nível todos os níveis de um dado conjunto degenerado ⁶. É importante enfatizar que aqui, contrariamente ao que fizemos para o sistema de dois spins, estamos considerando n apenas como um índice contador dos níveis de energia, sem lhe atribuir qualquer interpretação física. Este procedimento sugere uma possível estratégia a ser seguida, quando nos desviarmos ligeiramente do caso $\sigma = 0$: para os espectros anisotrópicos do modelo de três spins, tomamos os pontos correspondentes aos primeiros pontos de cada degrau do espectro para o caso isotrópico $\sigma = 0$. Tal procedimento está ilustrado na figura 6.5(b), onde tomamos apenas os níveis representados por bolinhas pretas. O “espectro” resultante contém apenas um nível representando cada degrau, associado por sua vez a cada valor de $\langle \mathbf{T}_3^2 \rangle$ ⁷.

⁶Uma vez que a eq. 6.13 mostra que a cada degrau corresponde um único valor de \mathbf{T}_3^2 , este procedimento significa tomar-se o espectro mod \mathbf{T}_3^2 .

⁷Ao usar este procedimento, tentamos manter o intento inicial deste capítulo, qual seja, obter o

Para pequenos valores de $|\sigma|$, o comportamento geral não muda, se mudarmos o critério de escolha e tomarmos o segundo ponto (ou o ponto médio) dos degraus deformados em lugar dos primeiros. Isto reflete o fato, mostrado no apêndice C, de que o autoestado correspondente a cada ponto de um degrau deformado tem uma componente dominante, quando projetado sobre o conjunto de estados do caso isotrópico que constituem o degrau correspondente [65]. À medida que aumentamos o valor de $|\sigma|$, passa a fazer diferença qual seqüência de pontos escolhemos. Não surpreende que assim seja, uma vez que a deformação dos degraus torna-se maior para maiores valores de $|\sigma|$; e isto também é esperado, dado que não mais se pode falar de um valor dominante para $\langle \mathbf{T}_3^2 \rangle$ na expansão de um autoestado anisotrópico numa base de autoestados do caso isotrópico.

Nas subseções seguintes damos detalhes destes gráficos: na subseção 6.3.2 comparamos os sistemas de dois e três spins isotrópicos, ambos integráveis, e na subseção 6.3.3 discutimos o efeito das quebras concomitantes de isotropia e integrabilidade para o sistema de três spins.

6.3.2 Caso isotrópico ($\sigma = 0$)

O espectro selecionado e os correspondentes gráficos $\Delta_{n+1} \times \Delta_n$ e $\Delta_n \times n$ para o modelo de três spins isotrópico ($\sigma = 0$) e spins $S = 50$ aparecem nas figuras 6.7(a)–6.7(c). Comparando-os com o conjunto de figuras 6.3(a)–6.3(c) do modelo de dois spins, vê-se que ambos os conjuntos são inteiramente análogos, seja na curva parabólica para $\mathcal{E}_n \times n$, seja nos gráficos $\Delta_{n+1} \times \Delta_n$ e $\Delta_n \times n$. Este não é um resultado óbvio, pois, se pensarmos em termos dos espaços de fase clássicos, veremos que estamos incorporando duas dimensões adicionais e mais vínculos. Esta analogia surpreendente permite-nos estender ao modelo de três spins a discussão sobre o limite clássico e as relações envolvendo o valor de \hbar (veja o final do apêndice B).

De um ponto de vista mais geral, observamos que os modelos de dois e três spins são sistemas de um grau de liberdade – eliminadas as constantes de movimento – possuindo ambos análogos clássicos integráveis [52, 16]. A integrabilidade deste caso $\sigma = 0$ está implícita na figura 6.7(c). O comportamento suave da curva ali descrita, simultaneamente com a regularidade implicada pelas relações B.3 e B.4, reflete a existência neste caso de órbitas periódicas somente, isto é, para $\sigma = 0$ o sistema de três spins é integrável. Neste sentido nossa análise dos níveis de energia (selecionados) regularmente espaçados, vistos na figura 6.7(c), concorda com a análise apresentada por Nakamura e Bishop na referência [16], onde os degraus bem regulares de níveis agrupados são vistos como contrapartida quântica para órbitas periódicas clássicas.

máximo possível de informação de gráficos simples como $\Delta_{n+1} \times \Delta_n$ e $\Delta_n \times n$, sem nos envolvermos com questões mais complicadas como simetrias ou técnicas mais sofisticadas para se estudar caoticidade. Estes pontos serão explorados em trabalho futuro.

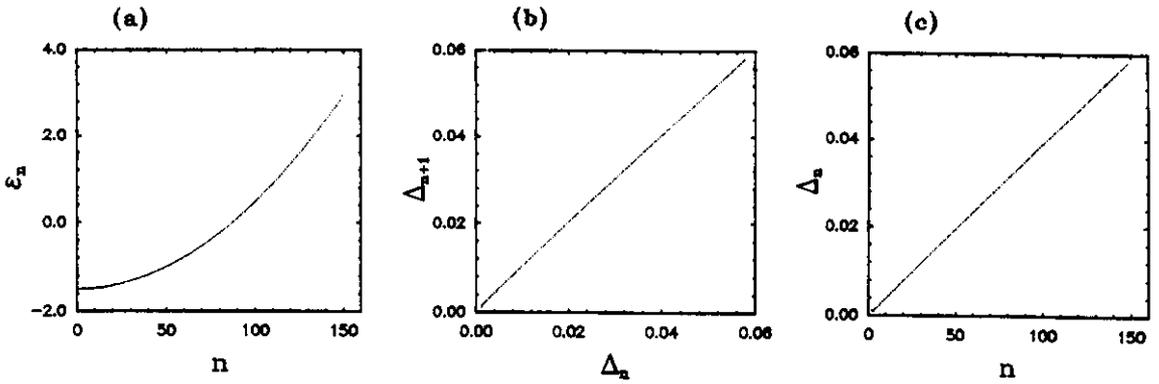


Figura 6.7: O caso isotrópico para três spins ($S = 50$ e $\sigma = 0.0$): (a) distribuição espectral selecionada conforme o procedimento mostrado na fig. 6.5(b); (b) correlação $\Delta_{n+1} \times \Delta_n$ entre diferenças de energia; (c) diferença entre níveis de energia Δ_n versus índice n do nível.

6.3.3 Caso anisotrópico ($\sigma \neq 0$)

Como mencionado anteriormente, a referência [16] mostra que a quebra de simetria produz também a quebra de integrabilidade para o modelo de três spins, juntamente com a quebra da constância de $\langle \mathbf{T}_3^2 \rangle$.

As figuras 6.8(a)–6.8(c), 6.9(a)–6.8(c) e 6.10(a)–6.10(c) mostram os gráficos para os espectros selecionados, obtidos para $S = 50$ e $\sigma = -0.05, -0.1, -0.3$ respectivamente. O tratamento preliminar dos espectros quânticos, através do procedimento de escolha de níveis dos degraus deformados, é o que nos permitirá a comparação com as figuras correspondentes do modelo de dois spins anisotrópico. De início, temos, aqui também, assegurado um bom controle da aproximação ao limite clássico, visto que, para cada valor de σ , o espectro do caso isotrópico para três spins funciona como calibrador nesta aproximação (veja apêndice B). O segundo ponto a ser notado nas figuras 6.8–6.10 é que os espectros para $\sigma \neq 0$ possuem valores críticos do índice dos níveis de energia, n_c , acima do qual eles mostram uma seqüência de diferenças Δ_n regular e correlacionada. Este valor crítico n_c é uma função de σ , aumentando conforme aumenta $|\sigma|$. Na subseção 6.3.1 adiantamos esta tendência do espectro quântico original para a recuperação da forma escada do espectro para $\sigma = 0$, observando entretanto que, naquela forma, seria difícil apontar um valor definido para a energia, acima do qual esta recuperação dar-se-ia. Estes gráficos $\Delta_n \times n$ proporcionam, entretanto, um valor preciso para n_c e um valor correspondente para uma energia crítica \mathcal{E}_c , acima da qual pode-se afirmar a regularidade do espectro. Esta análise concorda com a análise dos espectros quânticos apresentada por Nakamura e Bishop [16], seus valores indicativos para \mathcal{E}_c permanecendo, todavia, ligeiramente abaixo daqueles dados pelos gráficos $\Delta_n \times n$.

No modelo integrável de dois spins a quebra de isotropia foi associada ao apare-

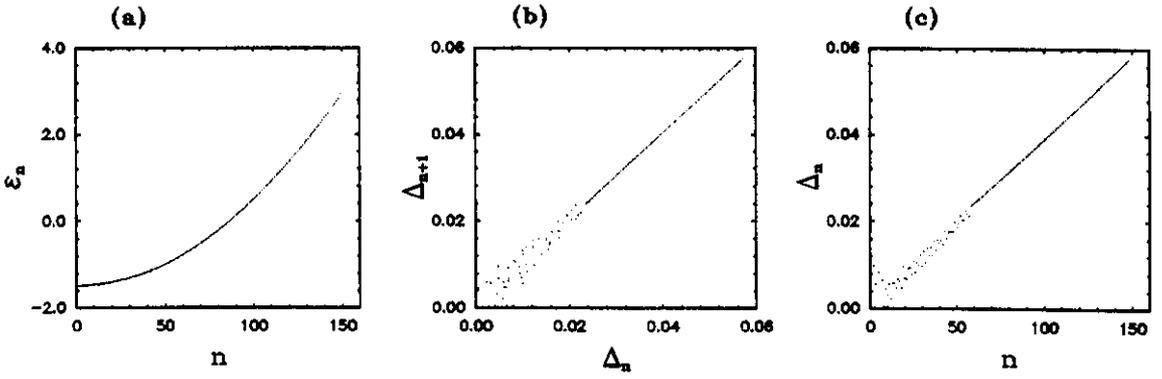


Figura 6.8: Semelhante à fig. 6.7. Aqui se mostra o caso anisotrópico ($S = 50$ e $\sigma = -0.05$).

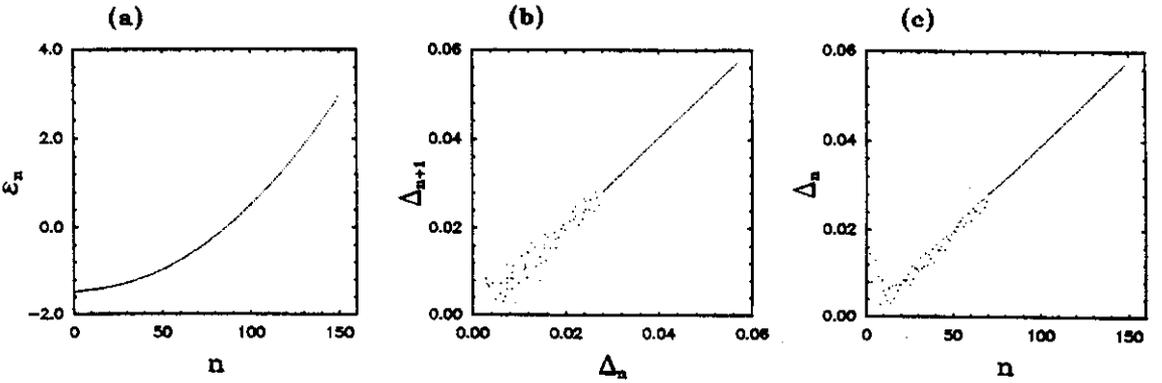


Figura 6.9: Semelhante à fig. 6.7. Aqui se mostra o caso anisotrópico ($S = 50$ e $\sigma = -0.1$).

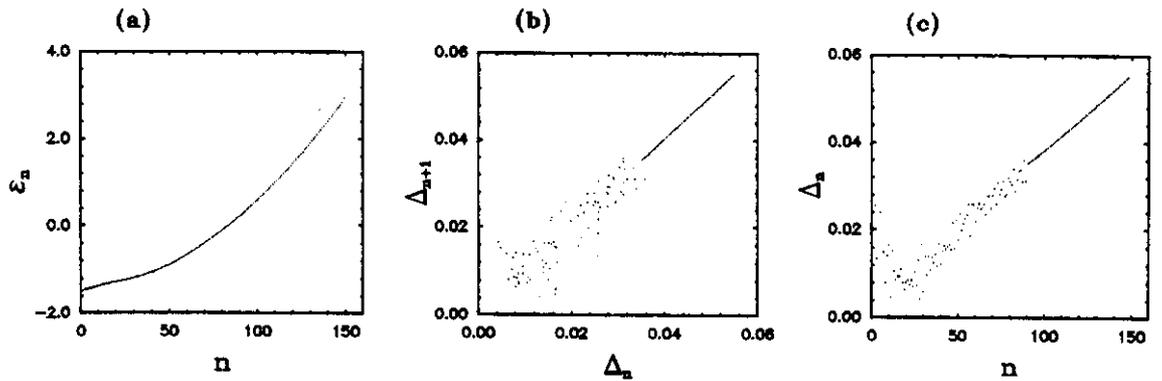


Figura 6.10: Semelhante à fig. 6.7. Aqui se mostra o caso anisotrópico ($S = 50$ e $\sigma = -0.3$).

cimento de um ponto de inflexão no correspondente espectro, marcando a presença de uma órbita separatriz em seu análogo clássico. Nos gráficos $\Delta_n \times n$ este ponto de inflexão se fez presente através de um pico invertido, denotando ambos um período infinito para a órbita separatriz e uma região de alta densidade de níveis de energia. Sugerimos, então, que esta seria a região mais propícia à observação de manifestações de caos numa versão caótica do modelo. Estas idéias podem ser aplicadas também ao modelo de três spins. Primeiramente notemos que, conforme nos distanciamos de $\sigma = 0$, os espectros nas figuras 6.8(a)–6.10(a) adquirem duas curvaturas distintas, como se tivessem um ponto de inflexão com um comportamento similar àquele observado na figura 6.4(a). Obviamente este não é um verdadeiro ponto de inflexão, pois os espectros não são curvas contínuas, como vemos nas figuras 6.8(c)–6.10(c). Ainda assim, o comportamento médio dos pontos nestas figuras sugere a presença de um pico invertido, acompanhando este pseudo-ponto de inflexão do espectro (compare com a figura 6.4(c)). Analogamente ao que se viu no caso do modelo de dois spins, esta situação sugere que a região em torno deste pico invertido seja a região apropriada para se observar onde o caos começa a se manifestar, à medida que $|\sigma|$ cresce. De fato, as seções do espaço de fase mostradas na ref. [16] e as seções de Poincaré que mostraremos na subseção seguinte confirmam esta sugestão, exibindo manifestação mais intensa de órbitas caóticas na região de energia próxima à energia do pseudo-ponto de inflexão.

As figuras 6.8(c)–6.10(c) sugerem os seguintes valores para os índices n_{ip} e correspondentes energias \mathcal{E}_{ip} para os picos invertidos, segundo o valor de σ :

- a) para $\sigma = -0.05$, $n_{ip} \approx 10$ com $\mathcal{E}_{ip} \approx -1.45$
- b) para $\sigma = -0.1$, $n_{ip} \approx 12$ com $\mathcal{E}_{ip} \approx -1.42$
- c) para $\sigma = -0.3$, $n_{ip} \approx 22$ com $\mathcal{E}_{ip} \approx -1.26$.

As regiões dos espectros correspondentes em torno destes valores representam o intervalo de energia onde o caos é mais facilmente observado. Distanciando-se destas regiões em energia, órbitas periódicas têm maior probabilidade de coexistirem com órbitas caóticas, até que, longe do pico invertido, acabam por predominar. Ultrapassando o valor crítico \mathcal{E}_c , entramos na parte regular do espectro, para a qual somente órbitas periódicas podem ser observadas. Anotamos aqui que esta abordagem, usando o pseudo-ponto de inflexão, está de acordo com os cálculos envolvendo diferenças segundas da energia com respeito ao parâmetro σ , feitos por Nakamura e Bishop [16]. Em particular, observamos que as regiões em torno dos valores apresentados nos itens a), b) e c) estão dentro das regiões caóticas apresentadas em [16], não excluindo, todavia, a possibilidade de que se possa observar órbitas periódicas mesmo para baixas energias (próximas ao estado fundamental), se o valor de σ for

suficientemente grande.

6.3.4 Dinâmica clássica para o modelo de três spins

Apresentaremos nesta subseção alguns resultados da dinâmica clássica para o modelo de três spins. Não há intenção de se proceder a uma análise exaustiva do sistema dinâmico clássico, mas tão somente verificar as sugestões para este modelo, advindas da abordagem caracterizada pelo ponto de inflexão no espectro.

A versão clássica do modelo de Heisenberg de três spins é dada pela hamiltoniana $\mathcal{E}_3(\alpha, \eta; \beta, \gamma; \phi, m)$, segundo o procedimento descrito no capítulo 3 (eq. 3.113):

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_3 = & J \left\{ \left[1 - (m - \eta - \gamma)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \left[1 - (m + \eta)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \cos 3\alpha + \right. \\ & + \left[1 - (m + \eta)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \left[1 - (m + \gamma)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \cos 3(\beta - \alpha) + \\ & + \left[1 - (m + \gamma)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \left[1 - (m - \eta - \gamma)^2 \right]^{\frac{1}{2}} \cos 3\beta + \\ & \left. + (\sigma + 1) \left[3m^2 - (\eta^2 + \gamma^2 + \eta\gamma) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (6.15)$$

As variáveis que descrevem o espaço de fase estão restritas aos intervalos

$$\begin{aligned} -1 \leq m \leq 1 \quad 0 \leq \phi \leq 2\pi \\ -\frac{4}{3} \leq \eta \leq \frac{4}{3} \quad -\frac{2\pi}{3} \leq \alpha \leq \frac{2\pi}{3} \\ -\frac{4}{3} \leq \gamma \leq \frac{4}{3} \quad -\frac{2\pi}{3} \leq \beta \leq \frac{2\pi}{3}. \end{aligned} \quad (6.16)$$

No capítulo 3, vimos também que a variável m está associada à constante de movimento $\left\langle \frac{T_x^2}{3S} \right\rangle$. Como tomamos $\langle T_3^z \rangle = 0$ e $J = 1$ nos cálculos anteriores, vamos usar aqui os valores correspondentes $m = 0$ e $J = 1$. Com estes valores, as órbitas no espaço de fase de quatro dimensões são dadas pelas soluções do sistema dinâmico

$$\begin{aligned} \dot{\eta} &= -\frac{\partial \mathcal{E}_3}{\partial \alpha} & \dot{\alpha} &= \frac{\partial \mathcal{E}_3}{\partial \eta} \\ \dot{\gamma} &= -\frac{\partial \mathcal{E}_3}{\partial \beta} & \dot{\beta} &= \frac{\partial \mathcal{E}_3}{\partial \gamma}, \end{aligned} \quad (6.17)$$

onde a derivada temporal é tomada com relação à variável $t' = \frac{t}{3S}$, como foi explicado no capítulo 3.

Para podermos visualizar as soluções do sistema 6.17, construímos seções de Poincaré dadas pelo plano $\gamma = 0$ e pela energia \mathcal{E}_3 . Sobre esta seção acompanhemos no plano (α, η) a evolução temporal das órbitas dadas por diferentes conjuntos de condições iniciais $(\alpha_0, \eta_0; \beta_0, \gamma_0)$, sujeitas ao valor escolhido para \mathcal{E}_3 , conforme a relação 6.15. Na figura 6.11(a) apresentamos um caso típico descrito nas seções

anteriores ($\sigma = -0.3$) e que engloba as sugestões a serem verificadas. Nesta figura temos o gráfico $\Delta_n \times n$ para $\sigma = -0.3$ e $S = 50$, onde marcamos com bolinhas pretas os níveis de energia a serem usados na confecção das seções de Poincaré. Em comparação com as figuras 6.11(b)–6.11(f), observamos os seguintes resultados

i) Para a energia correspondente a $n = 130$, marcado na figura 6.11(a), esperamos observação de órbitas periódicas somente. Como vemos, a seção de Poincaré para esta energia mostra que as órbitas periódicas dominam todo o espaço de fase disponível (ver figura 6.11(b)).

ii) No caso $n = 80$ já estamos abaixo do valor crítico n_c , embora longe do ponto de inflexão. De acordo com as seções anteriores esperamos, então, que as órbitas periódicas predominem, mas que possa haver, já neste ponto, uma pequena manifestação de órbitas caóticas. A predominância de órbitas periódicas é evidente na seção correspondente (ver figura 6.11(c)). A ampliação da região retangular desta figura, mostrada na figura 6.11(d), mostra, entretanto, que uma pequena região de caos começa a se fazer notar.

iii) À medida que nos aproximamos do ponto de inflexão, esperamos que a região caótica se expanda e, em contrapartida, as órbitas periódicas se tornem menos evidentes. Esta expectativa, baseada na abordagem do ponto de inflexão, pode ser confirmada pelas figuras 6.11(e) e 6.11(f).

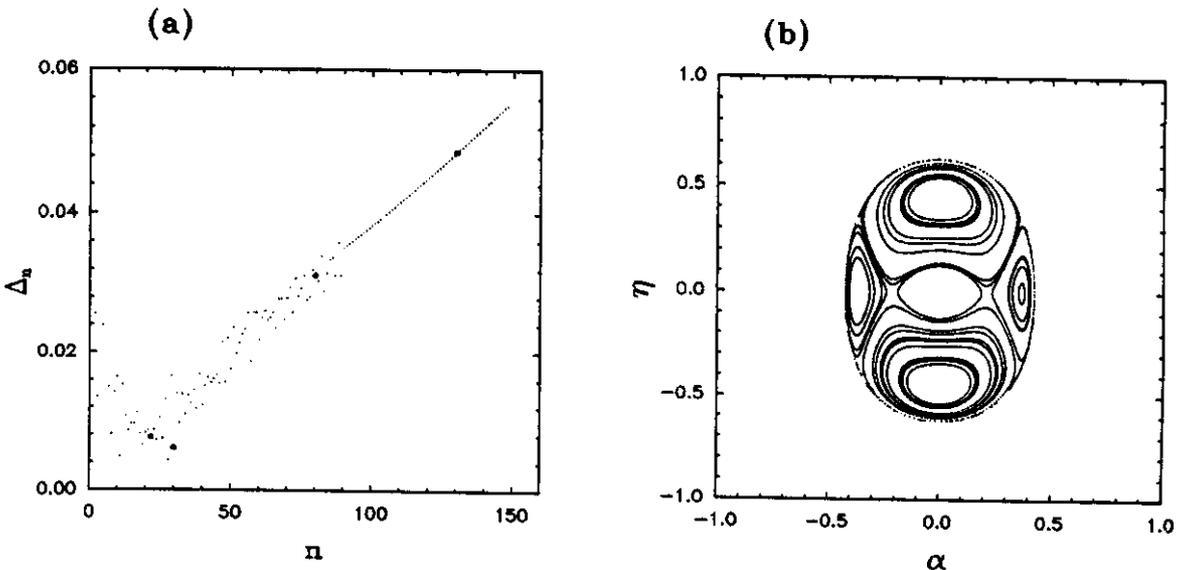


Figura 6.11: Continua na página seguinte.

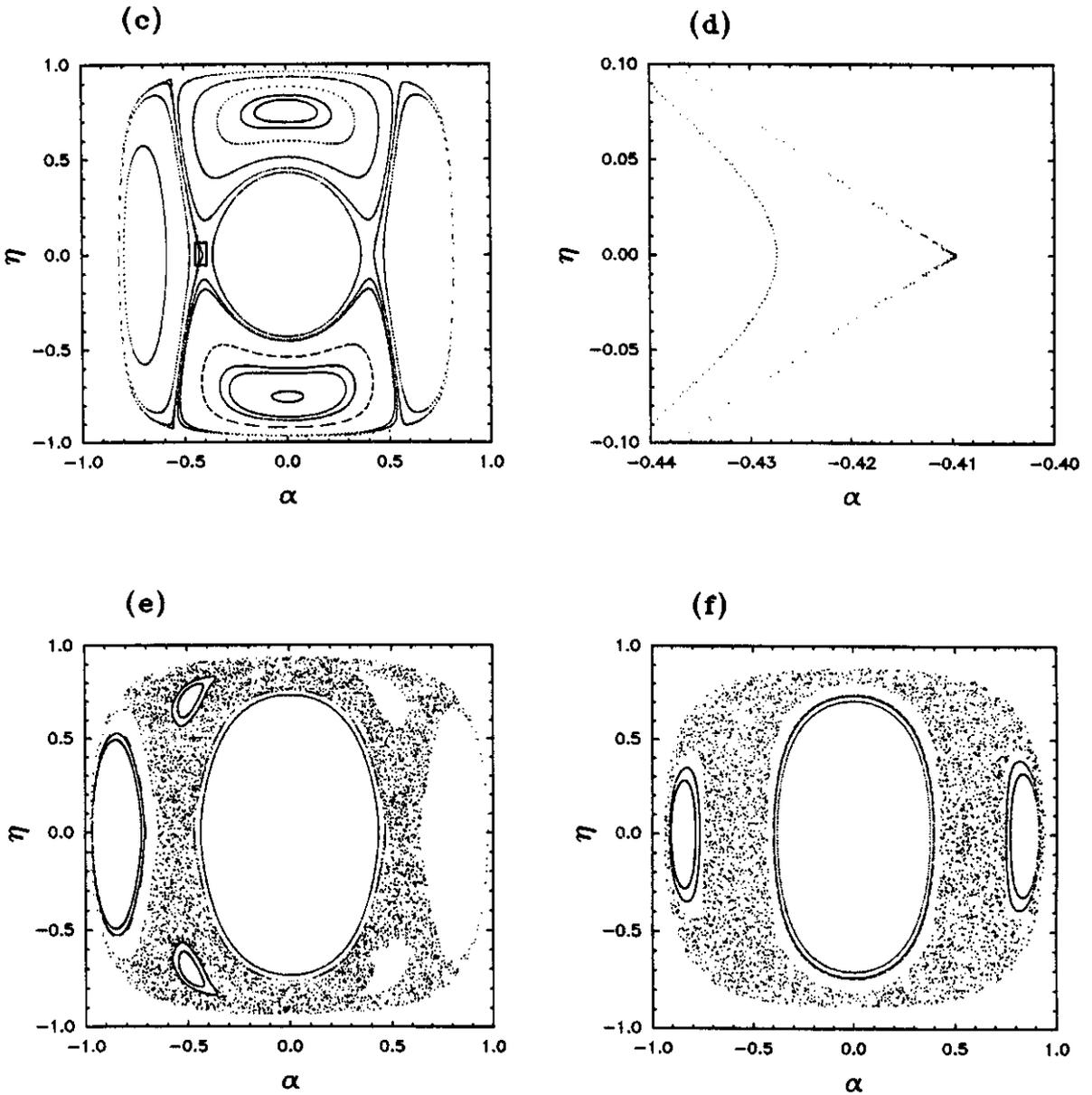


Figura 6.11: (a) diferença entre níveis de energia Δ_n versus índice n do nível para o caso $S = 50$ e $\sigma = -0.3$; os pontos marcados referem-se às energias tomadas para as seções de Poincaré; (b) seção de Poincaré para energia $\mathcal{E}_{130} = 1.896$ correspondente a $n = 130$; (c) seção de Poincaré para $\mathcal{E}_{80} = -0.104$ e $n = 80$; (d) ampliação da região retangular marcada na parte (c), onde se percebe uma pequena área de caos; (e) seção de Poincaré para $\mathcal{E}_{30} = -1.188$ e $n = 30$; (f) seção de Poincaré para $\mathcal{E}_{22} = -1.262$ e $n = 22$, onde se encontra aproximadamente o ponto de inflexão da parte (a).

6.4 Discussão

Neste capítulo estudamos vários casos de quebra de simetria envolvendo os modelos de dois e três spins. Mostramos que se pode obter um considerável montante de informação sobre estes sistemas a partir de gráficos simples como $\Delta_{n+1} \times \Delta_n$ e $\Delta_n \times n$. Em especial, estudamos os efeitos que aparecem junto às transições isotropia \leftrightarrow anisotropia e integrabilidade \leftrightarrow não-integrabilidade. De forma resumida, examinamos aspectos relacionados aos seguintes casos:

i) quebra de isotropia, mantendo-se integrabilidade, no modelo de dois spins, onde confirmamos a presença de um ponto de inflexão no espectro, associado a uma órbita separatriz;

ii) aumento do número de spins, mantendo-se integrabilidade, em que mostramos que os gráficos usados permitem a comparação de sistemas bastante distintos do ponto de vista dinâmico, como os sistemas de dois e três spins;

iii) quebra de isotropia com concomitante quebra de integrabilidade no modelo de três spins, onde surpreendentemente o comportamento do sistema quase-integrável de dois graus de liberdade (sistema de três spins) pode ser entendido em termos do sistema de um grau de liberdade (sistema de dois spins).

No apêndice B mostramos também que os gráficos usados propiciam uma maneira de controlar a aproximação destes sistemas ao limite clássico; um controle que pode ser bastante útil em cálculos numéricos.

Cabe, afinal, um comentário sobre o tratamento estatístico de espectros quânticos. As propriedades de flutuações dos espectros de sistemas de comportamento misto, onde coexistem órbitas periódicas e caóticas, tem entendimento difícil dentro do contexto da Teoria das Matrizes Aleatórias [51, 66]. Neste regime misto, não-ergódico, os gráficos que usamos neste capítulo podem ser úteis, fornecendo indicações relevantes para o estudo destes casos. Não se pretende, entretanto, que estes gráficos e procedimentos tenham o mesmo status da Teoria citada; na verdade, não existe termo de comparação entre eles. Para deixar clara esta distinção, observemos dois pontos. Em primeiro lugar, a Teoria das Matrizes Aleatórias, escorada em aparato matemático rigoroso, fornece uma descrição detalhada e quantitativa das propriedades de espectros quânticos caóticos, enquanto os gráficos que usamos proporcionam uma análise indicativa e qualitativa das regiões de energia onde o caos se manifesta. Em segundo lugar, a aplicação da Teoria das Matrizes Aleatórias requer completo conhecimento das simetrias envolvidas no problema, bem como saber separá-las, o que pode ser um problema difícil. Diversamente, a principal vantagem dos gráficos e análise que apresentamos neste capítulo é prática e revela-se em suas

imediatas construção e aplicação. Portanto, a Teoria de Matrizes Aleatórias e nossos procedimentos agem em domínios distintos, e em níveis de rigor e exigência próprios, fornecendo informações que podem, ainda assim, ser úteis e complementares umas às outras. Esta discussão mostra-se particularmente justificada no regime perturbativo de pequenos desvios do caso isotrópico (pequenos valores de $|\sigma|$) para o modelo de três spins ⁸. Entretanto, há indicações de que o mesmo tratamento oferece bons resultados também para valores apreciáveis de $|\sigma|$, o que significa regimes fortemente caóticos.

⁸No apêndice C apresentamos um pequeno estudo das funções de onda do sistema de três spins, que dá suporte a nossos procedimentos no regime de pequenos valores de $|\sigma|$.

Capítulo 7

Torção no espaço de fase clássico: uma consequência da indistinguibilidade quântica de dois spins interagentes

Ao lidarmos com sistemas de dois e três spins interagentes, deparamo-nos com as possibilidades de que estes spins sejam idênticos ou distintos. Nos capítulos anteriores trabalhamos apenas com a primeira possibilidade. Entretanto, esta escolha inicial na preparação do sistema a ser estudado sugere por si um resultado bastante interessante¹: a indistinguibilidade quântica de dois spins interagentes manifesta-se no espaço de fase clássico como uma propriedade global da topologia deste espaço, diferenciando os casos em que os spins são idênticos ou distintos. Como parte do corpo desta dissertação, este seria, em princípio, um capítulo marginal. Acreditamos, todavia, que esta manifestação pode ter desdobramentos relacionados também a caos e integrabilidade.

7.1 Spins idênticos e o espaço de fase clássico

Nos capítulos anteriores tivemos uma pequena mostra da importância do espaço de fase clássico para o estudo de aspectos quânticos e clássicos relacionados a integrabilidade, caos, e também para o estabelecimento de conexões entre esses regimes, via princípio de correspondência em limites semiclássicos. Referindo-se ao espaço de fase clássico como limite para sistemas quânticos, bem menos atenção tem sido dada a eventuais manifestações da identidade das partículas no regime quântico. De nosso conhecimento há apenas os trabalhos recentes de H.M. Sommermann e H.A.

¹Os resultados apresentados neste capítulo estão publicados em *Europhysics Letters* [67].

Weidenmüller [68], em que é deduzido o análogo da fórmula de Weyl para a densidade média de níveis de energia, e o trabalho de H.A. Weidenmüller [69], onde a fórmula de Gutzwiller [4] é aplicada a partículas idênticas não interagentes. Nestes trabalhos, particularmente em [69], explicita-se um aspecto importante relacionado a simetrias: usualmente elas são tais que o operador associado à simetria, aplicado sucessivamente a parte do espaço de fase, termina por reproduzir inteiramente este espaço, enquanto a simetria de permutação associada à identidade de partículas não funciona do mesmo modo, introduzindo modificações globais no espaço de fase e também nas órbitas periódicas do sistema clássico. Anterior a estes, e num contexto mais básico e mais geral, há o importante trabalho de 1977 de J.M. Leinaas e J. Myrheim [70], onde os autores estudam o caso de duas partículas idênticas em uma, duas e três dimensões, generalizando os resultados para N partículas idênticas.

Diversamente dos sistemas de partículas, os sistemas de spins apresentam peculiaridades tanto no espaço de Hilbert dos vetores de estado, que tem dimensão finita, como no correspondente espaço de fase clássico, que apresenta efeitos dessa finitude (veja, por exemplo, refs. [9, 10, 11]). Além disso, como veremos nas próximas seções, a simetria presente na função de onda do sistema quântico, devida à identidade dos spins², pode induzir uma torção no espaço de fase correspondente. Enfatizamos que, diferentemente do trabalho de Leinaas e Myrheim, vamos nos concentrar em resultados mecânico-quânticos. Na referência [70], mecânica clássica de partículas idênticas é o ponto de partida e, após ter sido identificado qual é o espaço de fase correto e fundamental, a teoria clássica é quantizada, com uma linha (ou parede) de simetria impondo condições de contorno sobre as funções de onda. Funções de onda simétricas ou antissimétricas emergem, então, como consequência natural deste processo de quantização, sem necessidade de um postulado de simetrização. Aqui, ao contrário, assumimos desde o início o postulado de simetrização da mecânica quântica e usamo-lo para escrever funções de onda apropriadas para o sistema de spins. Por outro lado, sabemos que, para sistemas integráveis no limite semiclássico, a distribuição de Husimi de autofunções individuais tende a se concentrar sobre estruturas clássicas invariantes (órbitas periódicas, toros, etc.) de energia correspondente à energia daquelas autofunções. Baseados neste resultado, usaremos a distribuição de Husimi das autofunções de nosso sistema de spins para estudar a estrutura topológica do espaço de fase clássico resultante. Para levar adiante a proposta acima, tomaremos o modelo de Heisenberg de dois spins, H_2 . É um modelo simples na interação entre os spins, integrável como visto anteriormente, e que exhibe claramente o fenômeno em que estamos interessados. Além disso, a interação de Heisenberg ali presente pode se apresentar em modelos com mais graus de liberdade e mesmo com comportamento caótico, como no caso do modelo anisotrópico de três

²Nos sistemas que estudamos, não há parte espacial envolvida, razão pela qual qualquer propriedade de simetria das autofunções relativa a objetos idênticos deve-se exclusivamente às variáveis de spins.

spins [16].

O hamiltoniano H_2 escreve-se como

$$H_2 = J(\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 + \sigma S_1^z S_2^z), \quad (7.1)$$

em que $J = 1$, $\hbar = 1$ e σ é um número real; S_l^x, S_l^y e S_l^z ($l = 1, 2$) são os operadores de spin, e $S_l = |\mathbf{S}_l|$ é o número quântico de spin. Além dos valores de J e \hbar , tomaremos $\sigma = 0.5$ e faremos uso do fato de que a componente z do spin total $\mathbf{T}_2 = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$ é constante de movimento, restringindo-nos ao caso em que o valor médio $\langle T_2^z \rangle$ é zero.

A pergunta básica que tentaremos responder é: *A simetria de natureza essencialmente quântica imposta pela identidade dos spins manifesta-se classicamente?* Para tentar respondê-la, examinaremos dois casos distintos no limite semiclássico:

- a) dois spins ligeiramente diferentes;
- b) dois spins idênticos.

O procedimento que seguiremos baseia-se na comparação entre as órbitas clássicas obtidas via estados coerentes (ver capítulo 3) e as regiões de concentração das distribuições de Husimi de autofunções individuais.

7.2 Espaço de fase clássico para o sistema de dois spins

No capítulo 3 foi visto que o limite clássico para o hamiltoniano H_2 existe, é bem definido e pode ser obtido através dos estados coerentes para spins $|z_1, z_2\rangle$ (eq. 3.57)

$$|z_1, z_2\rangle = e^{\bar{z}_1 S_1^+ + \bar{z}_2 S_2^+} | -S_1, -S_2 \rangle \quad (7.2)$$

como

$$\mathcal{H}_2 = \frac{\langle z_1, z_2 | H_2 | z_1, z_2 \rangle}{\langle z_1, z_2 | z_1, z_2 \rangle}, \quad (7.3)$$

com imposição da condição $\hbar \sqrt{S_l(S_l + 1)} = 1$. Assim como no capítulo 3, faremos aqui o mesmo cálculo para a função hamiltoniana \mathcal{E}_2 (ver subseção 3.1.3), exceto pelo fato de que mantemos aqui a distinção entre os spins S_1 e S_2 . Escrito em termos dos números complexos z_1 e z_2 , \mathcal{H}_2 fica

$$\mathcal{H}_2 = JS_1 S_2 \left[2 \frac{z_1 \bar{z}_2 + \bar{z}_1 z_2}{(1 + |z_1|^2)(1 + |z_2|^2)} + (\sigma + 1) \frac{(1 - |z_1|^2)(1 - |z_2|^2)}{(1 + |z_1|^2)(1 + |z_2|^2)} \right]. \quad (7.4)$$

A partir deste ponto, seguindo M.C. Cambiaggio *et al.* [19], usaremos uma transformação de variáveis ligeiramente diferente daquela usada no capítulo 3. Tomemos

a transformação dada em dois passos:

$$\begin{cases} w_l = \sqrt{\frac{2S_l}{1+|z_l|^2}} z_l \\ w_l = |w_l| e^{i\phi_l} \quad l = 1, 2 \end{cases} \quad (7.5)$$

e

$$\begin{cases} \phi = \frac{1}{2}(\phi_1 + \phi_2) & m = \frac{|w_1|^2 + |w_2|^2}{S_1 + S_2} - 1 \\ \alpha = \frac{1}{2}(\phi_2 - \phi_1) & \eta = \frac{|w_2|^2 - |w_1|^2}{S_1 + S_2}. \end{cases} \quad (7.6)$$

Com as transformações 7.5 e 7.6, a hamiltoniana fica

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_2 = & (\sigma + 1) \left[\frac{S_1}{\left(\frac{S_1 + S_2}{2}\right)} - (m + 1 - \eta) \right] \left[\frac{S_2}{\left(\frac{S_1 + S_2}{2}\right)} - (m + 1 + \eta) \right] + \\ & + [(m + 1)^2 - \eta^2]^{\frac{1}{2}} \left[2 \frac{S_1}{\left(\frac{S_1 + S_2}{2}\right)} - (m + 1 - \eta) \right]^{\frac{1}{2}} \times \\ & \times \left[2 \frac{S_2}{\left(\frac{S_1 + S_2}{2}\right)} - (m + 1 + \eta) \right]^{\frac{1}{2}} \cos 2\alpha, \end{aligned} \quad (7.7)$$

onde (α, η) e (ϕ, m) são pares de variáveis canonicamente conjugadas, e m é constante de movimento classicamente análoga a $\frac{T_z^2}{S_1 + S_2}$. Definidas pelas eqs. 7.6, estas variáveis estão restritas aos seguintes intervalos

$$0 \leq \phi \leq 2\pi \quad -\pi \leq \alpha \leq \pi \quad -1 \leq m \leq 1 \quad (7.8)$$

e

$$\max \left\{ -1; 1 - \frac{2S_1}{(S_1 + S_2)} \right\} \leq \eta \leq \min \left\{ 1; \frac{2S_2}{(S_1 + S_2)} - 1 \right\}. \quad (7.9)$$

Para a restrição 7.9 acima, contribuem as escolhas $m = 0$ - compatível com $\langle T_z^2 \rangle = 0$ - e, no caso de dois spins distintos, tomarmos S_1 como o maior.

Observando a eq. 7.7, notamos inicialmente que ela traz em si a expressão de \mathcal{E}_2 para dois spins idênticos $S_1 = S_2 = S$,

$$\mathcal{E}_2 = (1 + \sigma)(m^2 - \eta^2) + [(m + 1)^2 - \eta^2]^{\frac{1}{2}} [(m - 1)^2 - \eta^2]^{\frac{1}{2}} \cos 2\alpha, \quad (7.10)$$

com η variando dentro do intervalo simétrico $-1 \leq \eta \leq 1$, válido para este caso. Além disso, notamos que a hamiltoniana clássica \mathcal{E}_2 (eq. 7.7) pode ser vista como uma função contínua das variáveis S_1 e S_2 . Deste ponto de vista, possíveis diferenças, observadas na estrutura do espaço de fase clássico com a mudança de spins

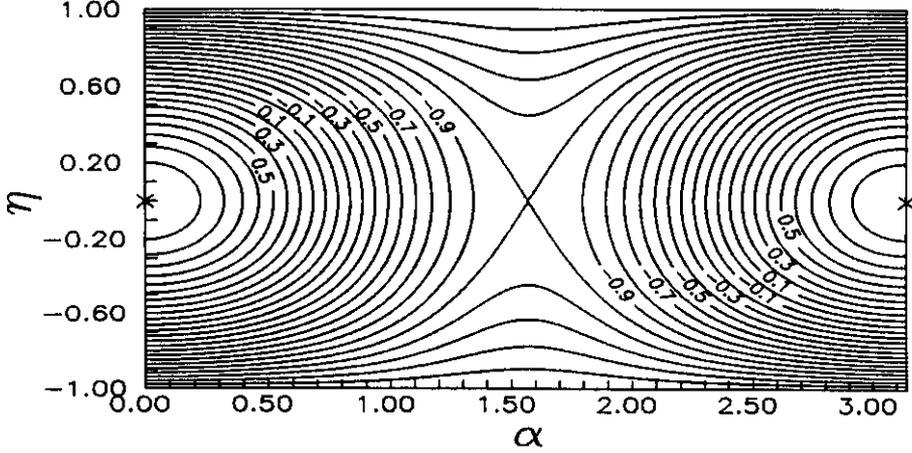


Figura 7.1: Órbitas periódicas $\eta(\alpha)$ dadas pela hamiltoniana \mathcal{E}_2 para $\sigma = 0.5$. As órbitas de energia mais baixa ($\mathcal{E}_2 = -1.5$) correspondem ao par de linhas ($\eta = -1$) e ($\eta = 1$). Os máximos de energia correspondem aos pontos marcados com cruzeiros ($\alpha = 0, \eta = 0$) e ($\alpha = \pi, \eta = 0$).

ligeiramente diferentes para spins idênticos, seriam devidas à indistinguibilidade dos spins. De fato, representadas no plano, as órbitas clássicas

$$\eta = \eta_{m, \mathcal{E}_2}(\alpha), \quad (7.11)$$

dadas pelas expressões 7.7 para spins S_1 e S_2 grandes e de valores aproximados e 7.10, são igualmente bem descritas pela figura 7.1³.

7.3 Distribuições de Husimi para o sistema de dois spins

Para o cálculo da distribuição de Husimi de autoestados individuais $|\psi_n\rangle$, dada por

$$h_n = \frac{|\langle z_1, z_2 | \psi_n \rangle|^2}{\langle z_1, z_2 | z_1, z_2 \rangle}, \quad (7.12)$$

³Visto que o espaço de fase é periódico com relação à variável α (eq. 7.7), representamos em todas as figuras apenas o intervalo relevante $0 \leq \alpha \leq \pi$.

precisamos inicialmente conhecer duas quantidades. O autoestado

$$|\psi_n\rangle = \sum_{k=1}^N c_k^n |u_k\rangle \quad (7.13)$$

expandido em base conveniente $\{|u_k\rangle\}_{k=1}^N$, e o produto $\langle z_1, z_2 | u_k \rangle$. Nas duas situações que descreveremos a seguir, usaremos, como adiantado, os valores $\langle T_2^z \rangle = 0$, $\sigma = 0.5$, e também valores para spins em torno de $S \approx 200$, que na prática são suficientemente grandes para uma boa aproximação ao limite clássico e também para evidenciar o resultado em que estamos interessados.

7.3.1 Caso a) Dois spins diferentes: $S_1 = 201$, $S_2 = 200$

Para o caso de spins distintos, o autoestado $|\psi_n\rangle$ pode ser obtido resolvendo-se numericamente o problema de autovetores do hamiltoniano H_2 na base de estados de spins

$$\begin{aligned} |u_k\rangle &= |S_1, m_1^z; S_2, m_2^z\rangle \\ &= |S_1, m_k; S_2, -m_k\rangle, \end{aligned} \quad (7.14)$$

satisfazendo $\langle T_2^z \rangle = m_1^z + m_2^z = 0$.

Expandindo em série de potências o operador exponencial que aparece em $|z_1, z_2\rangle$ (eq. 3.57), temos a seguinte expressão para o produto $\langle z_1, z_2 | u_k \rangle$

$$\begin{aligned} \frac{\langle z_1, z_2 | S_1, m_k; S_2, -m_k \rangle}{\langle z_1, z_2 | z_1, z_2 \rangle} &= \left[\frac{(2S_1)!(2S_2)!}{(S_1 + m_k)!(S_1 - m_k)!(S_2 + m_k)!(S_2 - m_k)!} \right]^{\frac{1}{2}} \times \\ &\times \frac{\bar{z}_1^{(S_1+m_k)} \bar{z}_2^{(S_2-m_k)}}{(1 + |z_1|^2)^{S_1} (1 + |z_2|^2)^{S_2}}. \end{aligned} \quad (7.15)$$

Com estes termos a distribuição de Husimi, como função dos números complexos z_1 e z_2 , escreve-se como

$$\begin{aligned} h_n(z_1, z_2) &= \left| \sum_{k=1}^N c_k^n \left[\frac{(2S_1)!(2S_2)!}{(S_1 + m_k)!(S_1 - m_k)!(S_2 + m_k)!(S_2 - m_k)!} \right]^{\frac{1}{2}} \times \right. \\ &\times \left. \frac{\bar{z}_1^{(S_1+m_k)} \bar{z}_2^{(S_2-m_k)}}{(1 + |z_1|^2)^{S_1} (1 + |z_2|^2)^{S_2}} \right|^2, \end{aligned} \quad (7.16)$$

onde N é o número de estados de spins $|S_1, m_k; S_2, -m_k\rangle$ da base usada, e c_k^n são os coeficientes de $|\psi_n\rangle$, quando expandido nesta base.

Para comparar os resultados fornecidos pela distribuição 7.16, com o espaço de fase clássico visto na seção anterior, usamos as mesmas transformações de variáveis

dadas por 7.5 e 7.6. Com estas a distribuição h_n assume a seguinte forma em termos das variáveis α e η

$$\begin{aligned}
 h_n(\alpha, \eta) = & \left| \sum_{k=1}^N c_k^n \frac{(S_1 + S_2)^{(S_1+S_2)}}{4^{(S_1+S_2)} S_1^{S_1} S_2^{S_2}} \left[\frac{(2S_1)!(2S_2)!}{(S_1 + m_k)!(S_1 - m_k)!(S_2 + m_k)!(S_2 - m_k)!} \right]^{\frac{1}{2}} \right. \\
 & \times (1 - \eta)^{\binom{S_1+m_k}{2}} \left[\frac{2S_1}{\binom{S_1+S_2}{2}} - (1 - \eta) \right]^{\binom{S_1-m_k}{2}} \times \\
 & \left. \times (1 + \eta)^{\binom{S_2-m_k}{2}} \left[\frac{2S_2}{\binom{S_1+S_2}{2}} - (1 + \eta) \right]^{\binom{S_2+m_k}{2}} e^{2im_k\alpha} \right|^2. \quad (7.17)
 \end{aligned}$$

Para o estado de energia mais baixa deste caso, a distribuição $h_1(\alpha, \eta)$ resultante é mostrada na figura 7.2. As órbitas periódicas do espaço de fase clássico correspondente, obtidas das eqs. 7.7 e 7.11, aparecem na figura 7.3. Comparadas as figuras, vê-se que ocorre de fato a esperada concentração da distribuição h_1 sobre a órbita de energia mais baixa ($\mathcal{E}_2 = -1.5$).

7.3.2 Caso b) Dois spins idênticos: $S_1 = S_2 = S = 200$

Postulando a simetrização da função de onda ψ_n , usamos uma base de estados simetrizados para diagonalizar H_2 e obter os autoestados $|\psi_n\rangle$:

$$|u_k\rangle = \frac{1}{2!} [|S, m_k; S, -m_k\rangle + |S, -m_k; S, m_k\rangle]. \quad (7.18)$$

Usando o resultado 7.15 e as transformações 7.5 e 7.6, obtemos

$$\begin{aligned}
 h_n(\alpha, \eta) = & \left| \sum_{m_k=-S}^S \frac{a_{m_k}^n}{2^{2S}} \left[\frac{(2S)!}{(S + m_k)!(S - m_k)!} \right] \times \right. \\
 & \left. \times (1 - \eta)^{(S+m_k)} (1 + \eta)^{(S-m_k)} e^{2im_k\alpha} \right|^2, \quad (7.19)
 \end{aligned}$$

onde os $a_{m_k}^n$ são os coeficientes de $|\psi_n\rangle$ escrito na base simetrizada de estados de spins (eq. 7.18).

A distribuição $h_1(\alpha, \eta)$ para o autoestado de energia mais baixa e a representação das órbitas no espaço de fase clássico são mostradas nas figuras 7.4 e 7.5, respectivamente.

7.4 Discussão

A diferença observada nos dois casos é uma consequência da simetrização da função de onda. No caso b) a estrutura topológica do espaço de fase difere daquela

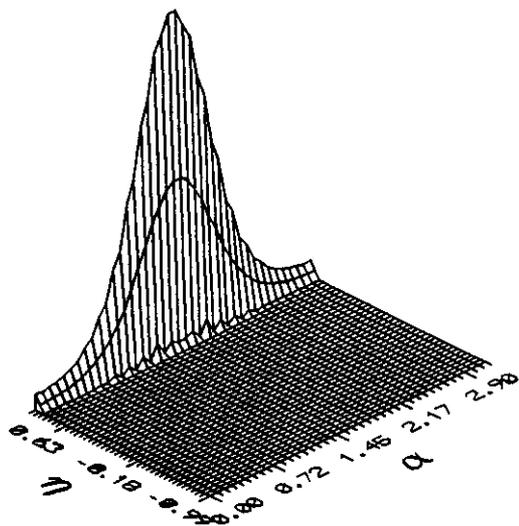
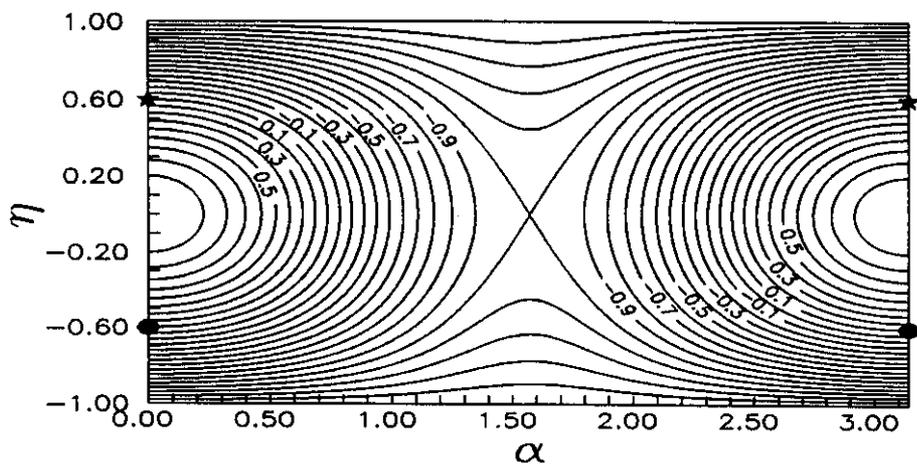


Figura 7.2: O caso de diferentes spins ($S_1 = 201$, $S_2 = 200$) para $\sigma = 0.5$: distribuição de Husimi para o autoestado correspondente ao nível de energia mais baixa (o eixo vertical foi omitido, dependendo apenas de normalização conveniente).



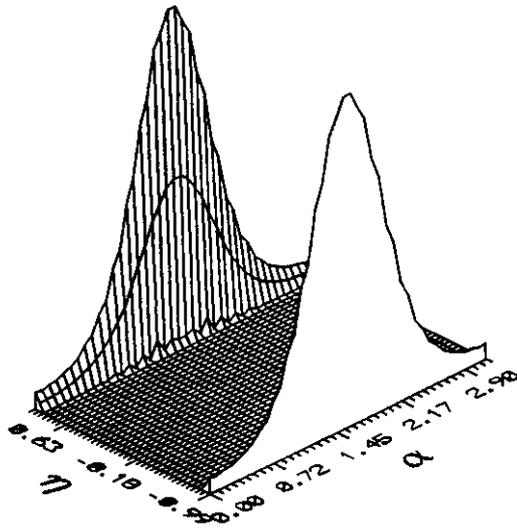


Figura 7.4: O caso de spins idênticos ($S_1 = S_2 = 200$) para $\sigma = 0.5$: distribuição de Husimi para o autoestado correspondente ao nível de energia mais baixa.

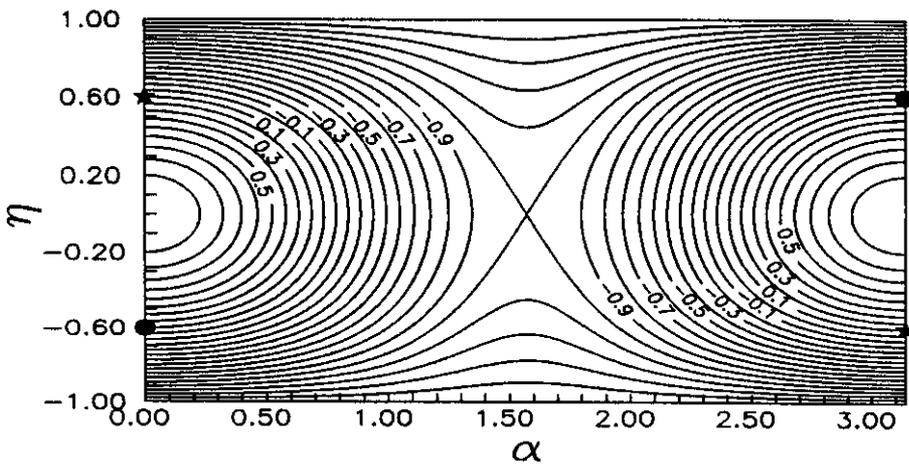


Figura 7.5: O caso de spins idênticos ($S_1 = S_2 = 200$) para $\sigma = 0.5$: espaço de fase clássico com as órbitas periódicas, fechado como uma fita torcida, onde os pontos marcados com símbolos iguais são identificados.

do caso a) de forma essencial, como pode ser visto nos figuras 7.3 e 7.5. A torção no espaço de fase permite que se faça a identificação da órbita clássica em acordo com a distribuição de Husimi obtida para a mesma energia.

De fato esta torção no espaço de fase pode ser evidenciada, notando-se que:

i) como o período da variável α é π , podemos identificar os ângulos 0 e π , desprezando o intervalo $-\pi \leq \alpha \leq 0$, visto que ele não acrescenta estados novos ao espaço de fase;

ii) no caso $S_1 = S_2 = S$, a troca de índices 1 e 2 dos spins transforma η em $-\eta$, α em $-\alpha$ e m no próprio m (eqs. 7.6). Ora, como os spins são fisicamente indistinguíveis, esta troca também deve sê-lo. Isto é compatível com a hamiltoniana clássica para $S_1 = S_2 = S$ (eq. 7.10) e com o intervalo simétrico $-1 \leq \eta \leq 1$, válido neste caso (eq. 7.9). Notemos que este argumento não se sustenta na situação em que $S_1 \neq S_2$, pois nesta situação η e $-\eta$ não são soluções para a mesma energia \mathcal{E}_2 e o intervalo de validade para η já não é simétrico em relação à origem. Por outro lado, para que a distribuição de Husimi se mantenha inalterada sob a troca $\eta \rightarrow -\eta$ no caso $S_1 = S_2 = S$, são necessárias também as trocas $\alpha \rightarrow -\alpha$ e $m_k \rightarrow -m_k$ (eq. 7.19). Estas trocas estão em acordo com a argumentação acima sobre o espaço de fase clássico (veja também a eq. 7.10) e não alteram as funções de onda quânticas, já que estas são simétricas em relação a m_k . Notemos, aqui também, que essas trocas não poderiam ser feitas na expressão para a distribuição de Husimi do caso $S_1 \neq S_2$ (veja eq. 7.17), já que neste caso as funções de onda quânticas não são simétricas com respeito a m_k .

Em suma, os argumentos de *i)*, *ii)* e a distribuição de Husimi resultante para o caso de spins iguais requerem uma torção no espaço de fase clássico, através da identificação dos pontos $(0, \eta)$ e $(\pi, -\eta)$, como se pode ver na figura 7.5. O mesmo acontece com os outros estados e pode ser explicado da mesma maneira. Neste ponto uma questão natural e igualmente interessante seria: o que acontece para férmions? Cálculos análogos foram feitos para spins semi-inteiros com funções de onda antissimetrizadas e o resultado é o mesmo, isto é, o espaço de fase clássico é torcido para spins fermiônicos.

Com base nos resultados obtidos, sugere-se que uma consequência clássica da indistinguibilidade quântica de spins interagentes é uma torção no espaço de fase clássico. Alguns comentários, entretanto, se colocam.

Inicialmente devemos enfatizar que esta modificação na topologia do espaço de fase clássico é uma modificação global, como prevista na ref. [69]: localmente os espaços de fase clássicos correspondentes aos casos a) e b) seriam idênticos no limite $S \rightarrow \infty$.

Para além de sistemas de spins, pode-se aventar a hipótese de que esta manifestação esteja presente em todos os sistemas dinâmicos que envolvam objetos idênticos (spins, partículas, etc.), uma vez que ela tem origem na simetria da função de onda e desde que esta simetria deve ser observada sempre que tratamos quanticamente estes sistemas de objetos idênticos.

Como havíamos dito, estendendo o modelo de Heisenberg para N spins, pode-se incluir mais graus de liberdade com o mesmo tipo de interação que estudamos neste capítulo. Isto aumentaria obviamente a complexidade do problema, mas permitiria em compensação que um estudo do mesmo tipo pudesse ser feito com sistemas caóticos. O modelo de Heisenberg de três spins anisotrópico, H_3 , é um exemplo de sistema caótico que pode vir a ser estudado. De fato, os resultados apresentados neste capítulo constituem apenas o primeiro passo para revelar a estrutura topológica do espaço de fase clássico de sistemas de objetos idênticos.

Capítulo 8

Conclusão

Apresentamos nesta dissertação o estudo de alguns aspectos relacionados a quebra de simetria e integrabilidade em sistemas de Heisenberg de poucos spins. Como os métodos utilizados e resultados obtidos foram discutidos de forma específica em cada capítulo, vamos aqui fazer apenas um apanhado geral dos resultados, apontar alguns problemas que ficaram em aberto e, finalmente, esboçar algumas possibilidades para estudos posteriores.

Como preparação para o estudo proposto, mostramos como sistemas de spins clássicos podem ser tratados dentro do formalismo hamiltoniano, o que nos coloca à mão o aparato analítico em uso no tratamento de sistemas dinâmicos clássicos. Em contrapartida, a utilização do princípio variacional dependente do tempo, associada à representação de estados coerentes, possibilitou-nos sistematizar um procedimento que permite a obtenção do limite clássico adequado para sistemas de spins quânticos. Este estudo preparatório foi, então, aplicado aos sistemas de Heisenberg de dois e três spins. Um primeiro resultado a indicar a adequação desta preparação está no comportamento do espectro quântico para valores grandes de spin. Neste regime a curva de energia proporcionada pela hamiltoniana clássica atua corretamente como limite ao espectro quântico.

A análise do sistema de dois spins mostrou que se pode estabelecer uma conexão simples e direta entre o espectro obtido em regime semiclássico e as órbitas clássicas no espaço de fase correspondente. A quebra de simetria, dada pelo parâmetro de anisotropia presente no hamiltoniano dos modelos, dá lugar a um ponto de inflexão no espectro quântico. A presença deste ponto de inflexão no espectro indica a existência de uma órbita separatriz com a mesma energia do ponto, separando dois regimes dinâmicos clássicos distintos. Ressalte-se a importância de estarmos lidando com espaços de Hilbert finitos em oposição aos espaços de Hilbert de sistemas de partículas, infinitos, para os quais uma tal conexão aparentemente não se estabelece. Para este sistema de dois spins, a visualização desta propriedade é facilitada, seja pelo espectro não degenerado, seja pela possibilidade de observação direta das órbitas, uma vez que o espaço de fase é apenas bidimensional.

Para o sistema de três spins, há os fatores complicadores de um espectro bastante degenerado, de um espaço de fase de quatro dimensões e da quebra de integrabilidade do modelo para valores não nulos do parâmetro de anisotropia. Apesar deste aumento de complexidade do próprio sistema, a mesma abordagem relacionada ao ponto de inflexão pôde ser efetuada, selecionando-se um conjunto de níveis de energia do espectro original. A partir deste “espectro selecionado” analisamos os gráficos $\Delta_{n+1} \times \Delta_n$ e $\Delta_n \times n$, que relacionam diferenças Δ_n entre níveis de energia. Fica patente nestes gráficos a semelhança entre os casos de dois spins, onde é nítida a presença do ponto de inflexão, e o caso de três spins, onde um ponto de inflexão é apenas sugerido pela disposição global dos pontos nos gráficos. Como no caso de dois spins, este pseudo-ponto de inflexão também aparece com a quebra de isotropia. Para o caso de três spins, entretanto, os pontos dos gráficos $\Delta_{n+1} \times \Delta_n$ e $\Delta_n \times n$ na região próxima ao pseudo-ponto de inflexão distribuem-se de forma irregular até um valor crítico n_c , a partir do qual se restabelece uma curva bem comportada. Como o ponto de inflexão está associado à idéia de uma órbita separatriz e como ele se situa na região de maior densidade de níveis, sugere-se que ele sinalize a região de energia em que o comportamento caótico se manifesta mais intensamente. Ademais, o comportamento nitidamente correlacionado dos níveis para n maior que n_c mostra que se observará apenas órbitas periódicas para as energias \mathcal{E}_n correspondentes. De fato, as seções de Poincaré para o sistema clássico confirmam estas previsões mesmo para valores apreciáveis do parâmetro de anisotropia.

Paralelamente ao interesse que possam suscitar por si mesmos, os resultados obtidos podem se revelar bastante úteis na prática de estudos de sistemas de espaço de Hilbert finitos: em primeiro lugar, por permitirem um controle qualitativo da aproximação ao limite clássico; em segundo lugar, atuando como indicadores para a aplicação de técnicas mais sofisticadas no estudo de manifestações de caos. Com respeito a estas indicações, o uso dos gráficos e resultados que propusemos podem ser particularmente interessantes no caso de sistemas em que coexistem comportamentos regular e caótico, uma vez que distinguem bastante bem estes regimes.

Finalmente a concentração da distribuição de Husimi para autoestados quânticos individuais sugere uma torção no espaço de fase clássico como manifestação da identidade de dois spins interagentes.

* * *

Para esclarecer um pouco mais o significado do ponto de inflexão no espectro e o papel dos gráficos $\Delta_{n+1} \times \Delta_n$ e $\Delta_n \times n$, e também para completar consistentemente sua análise, seria interessante atacar alguns problemas que ainda permanecem abertos. Vejamos.

As seções de Poincaré para o sistema de três spins mostram que o aparecimento de regiões caóticas no espaço de fase dá-se de modo contínuo, suave, à medida que ultrapassamos o valor crítico de energia \mathcal{E}_c . Seria de se esperar que os gráficos $\Delta_{n+1} \times \Delta_n$ e $\Delta_n \times n$ acompanhassem esta continuidade¹. Entretanto, é brusca a mudança de comportamento dos pontos destes gráficos na passagem pelo índice correspondente n_c . Há aí alguma manifestação da física do sistema? Ou esta é apenas uma consequência do procedimento que usamos para selecionar os níveis de energia do espectro original?

No caso de dois spins, o espaço de fase clássico com suas órbitas periódicas era visualizado diretamente, dado que possui apenas duas dimensões. Isto permitiu a comparação dos resultados fornecidos pelo espectro com os vários tipos de órbitas existentes. No caso de três spins, estas visualização e comparação não seriam imediatas, pois o espaço de fase é mais complexo. A resolução do problema dinâmico, entretanto, já foi feita quando da confecção das seções de Poincaré. Para tanto, escrevemos as equações de movimento e a evolução temporal foi determinada numericamente. Resta fazer a análise deste espaço de fase com respeito a famílias de órbitas periódicas, toros invariantes, toros que se destroem com a quebra de simetria, etc... Isto permitiria não apenas caracterizar melhor o sistema de três spins, mas também uma comparação mais detalhada com os resultados obtidos dos gráficos $\Delta_{n+1} \times \Delta_n$ e $\Delta_n \times n$. Em particular, interessa observar como se dá a quantização de órbitas periódicas em regiões próximas a separatrizes clássicas.

A caracterização do caos em sistemas quânticos encontra uma rica fonte de resultados e testes na Teoria das Matrizes Aleatórias. Como teoria que melhor tem descrito os sistemas quânticos neste aspecto, tornou-se imperiosa a análise das propriedades estatísticas dos espectros de energia, fazendo-se uso de seus resultados. Com estes sistemas de spins não é diferente a situação. Uma tal análise em nosso caso encontrou dois tipos de obstáculos. Em primeiro lugar, os resultados iniciais a respeito da distribuição estatística de níveis pareciam não obedecer o que se espera para sistemas integráveis ou caóticos. À primeira vista parece-nos haver alguma simetria ainda não levada em conta. A separação completa das simetrias envolvidas num dado sistema pode se revelar um problema de difícil solução e não surpreende que ainda não tenha sido resolvido. De fato, já no trabalho de 1986, Nakamura e Bishop [16] sugerem que o sistema de Heisenberg de três spins deveria apresentar distribuições estatísticas de Poisson ou do Ensemble Gaussiano Ortogonal (GOE), conforme fosse integrável ($\sigma = 0$) ou não-integrável ($\sigma \neq 0$). Entretanto, até onde temos conhecimento ainda não foi apresentada confirmação desta previsão. Acresce que a aplicação da Teoria das Matrizes Aleatórias encontra problemas no caso de sistemas de comportamento misto, com regiões de caos e regularidade coexistindo. Nosso sistema de três spins é justamente um exemplo deste caso. Uma tentativa

¹Agradecemos aos profs. M.A.M. de Aguiar e J.A. Roversi chamarem-nos a atenção para este ponto.

de se contornar esta característica seria utilizar para a análise estatística apenas os níveis de energia próximos ao ponto de inflexão, onde o comportamento caótico é dominante e o sistema se aproxima de um sistema ergódico. Entra em cena, então, o segundo obstáculo. No processo de seleção do espectro reduzimos o número de níveis de aproximadamente 1300 para 150, para $S = 50$ e $\langle T_3^z \rangle = 0$. Tomando apenas uma região em torno do ponto de inflexão, diminuimos ainda mais este número, impossibilitando qualquer análise estatística. Um tratamento que leve em conta apenas uma dada região do espectro selecionado requererá valores para S bem maiores do que 50. Na prática, isto significa grande capacidade computacional e de armazenamento de dados.

Para o resultado advindo da identidade dos spins e do postulado de simetrização das funções de onda, parece-nos necessário ainda formulá-lo rigorosamente, dentro de um arcabouço teórico que leve em conta a identidade dos spins e suas implicações também no contexto clássico. A descrição do problema em termos de grupos quocientes tem aqui um papel fundamental. Além desta formalização, seria relevante tentar estender o resultado para o sistema de três spins, mormente porque se trata de um sistema que apresenta comportamento caótico. O preço imediato, e alto, seria a manipulação de um espaço de fase muito mais complexo.

* * *

Além dos pontos apresentados acima, estes modelos de spins admitem várias outras possibilidades para estudos futuros, seja estendendo e generalizando nossos resultados a outros sistemas, seja verificando nestes sistemas de spins algumas sugestões trabalhadas em outros contextos. Seria temeroso tentar detalhá-las aqui. Assim, vamos apenas relacioná-las abaixo, com algumas indicações onde couber.

EXTENSÃO DOS RESULTADOS PARA OUTROS SISTEMAS DE CURIE-WEISS. É bastante provável que os resultados que temos obtido sejam aplicáveis a outros sistemas de Curie-Weiss, como o modelo de emparelhamento [19, 13] ou o modelo de Lipkin [18]. De fato, como o modelo de Heisenberg, estes também apresentam as propriedades de escala para valores grandes de algum parâmetro N característico do modelo.

CORREÇÕES DE ORDEM $\frac{1}{5}$. Vimos no capítulo 3 que o procedimento de obtenção da hamiltoniana clássica deixa aberta a possibilidade de se levar em conta termos de ordem $\frac{1}{5}$ no tratamento do regime semiclassico. Estas correções permitiriam o estudo de fenômenos de origem essencialmente quântica, como tunelamento entre estados quânticos.

DISTRIBUIÇÕES DE HUSIMI. Resultados preliminares [71] mostram que, para o

sistema de dois spins, as distribuições de Husimi para autoestados quânticos individuais confirmam a propriedade de concentração sobre as órbitas periódicas de mesma energia. Para o sistema de três spins, esta propriedade abre a possibilidade de uma correspondência unívoca entre órbitas periódicas e autoestados quânticos individuais. Obviamente, para um dado autovalor de energia, pode haver inúmeras órbitas que se candidatem. Entretanto, pode-se fazer uma boa escolha para a órbita associada àquele autoestado, tomando-se como condição inicial definidora desta órbita o ponto do espaço de fase dado pela máxima intensidade da distribuição de Husimi [6]. A evolução temporal das variáveis presentes nesta condição inicial, determinada através das equações de movimento dadas por \mathcal{E}_3 , seria comparada com as projeções $P(\alpha, \eta)$ e seções quânticas $S_\gamma(\alpha, \eta)$ da distribuição de Husimi para o autoestado de energia \mathcal{E}_3 (ver eqs. 4.22 e 4.21).

ESTUDO DAS FUNÇÕES DE ONDA. Os resultados apenas esboçados no Apêndice C adiantam uma linha de investigação que pode ser interessante. O alcance da abordagem que fizemos e a dispersão dos coeficientes dos autoestados do sistema não-integrável sobre os autoestados do sistema integrável requerem uma análise mais detalhada das funções de onda.

DINÂMICA QUÂNTICA. Associado ao item anterior está o tratamento da dinâmica do sistema quântico. Lembremos que, neste trabalho, lidamos exclusivamente com autoestados quânticos estacionários.

ANISOTROPIAS LOCAIS. Descritas por termos do tipo $(S_j^\alpha)^2$ para $\alpha = x, y, z$, estas anisotropias podem ser inseridas facilmente nestes modelos, provocando comportamento caótico mesmo para o sistema de dois spins.

CAMPOS EXTERNOS. Uma situação de interesse certo, e que não foi tratada aqui, é aquela em que o sistema de spins evolue sob ação de campos externos.

EFEITOS DE TEMPERATURA. Recentemente têm sido apresentados resultados da influência da temperatura em sistemas como o modelo de Dicke [72] e o modelo de Lipkin [73]. A técnica ali empregada parece-nos poder ser estendida também aos modelos de Heisenberg.

Vê-se, assim, que os modelos de Heisenberg de poucos spins não apenas revelam uma riqueza própria de características e informação, mas também admitem uma variada gama de possibilidades para trabalhos futuros. Espera-se que os aspectos apresentados nesta dissertação contribuam para o entendimento destes sistemas, como sistemas dinâmicos, e sejam úteis para como preparação para aqueles trabalhos.

Apêndice A

Neste apêndice deduzimos expressões analíticas, em termos de integrais de funções elípticas, para a ação clássica $\mathcal{J}(\mathcal{E}_2)$ e também para o período τ . Para isso, usamos as órbitas $\eta(\alpha, \mathcal{E}_2)$, mostradas nas figuras 5.4(a) e 5.6(a), e avaliamos a ação

$$\mathcal{J} = 2S \oint \eta \, d\alpha \quad (\text{A.1})$$

como sendo a área limitada por $\eta(\alpha, \mathcal{E}_2)$. A integração é feita sobre um período da variável α e o integrando é dado pela eq. 5.9

$$\eta(\alpha) = \left[\frac{\cos 2\alpha - \mathcal{E}_2}{\cos 2\alpha + (1 + \sigma)} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (\text{A.2})$$

A partir da órbita de energia mínima, calculamos $\mathcal{J}(\mathcal{E}_2)$ para as várias órbitas de valores de energia crescente, até preenchermos completamente o espaço de fase (α, η) . Este procedimento deve ser seguido de maneiras diferentes segundo o sinal do parâmetro de anisotropia σ , uma vez que as órbitas correspondentes têm naturezas distintas em cada caso.

Para $-2.0 < \sigma < 0.0$ e energia $\mathcal{E}_2 < -(1 + \sigma)$, usamos as curvas da região central da fig. 5.4(a), começando pelo ponto de equilíbrio ($\alpha = \frac{\pi}{2}$, $\eta = 0$), onde temos um mínimo de energia. Para órbitas de energia abaixo da energia da separatriz ($\mathcal{E}_2 < -(1 + \sigma)$), a integral A.1 é dada por

$$\mathcal{J}(\mathcal{E}_2) = 4S \int_{\alpha_{min}}^{\alpha_{max}} \eta(\alpha, \mathcal{E}_2) \, d\alpha, \quad (\text{A.3})$$

onde $\alpha_{min} = \frac{1}{2} \arccos(\mathcal{E}_2)$ e $\alpha_{max} = \pi - \frac{1}{2} \arccos(\mathcal{E}_2)$ são determinados impondo-se a condição $\eta = 0$ (ver fig. 5.4(a)).

Para a separatriz ($\mathcal{E}_2 = -(1 + \sigma)$), temos simplesmente

$$\mathcal{J}(-(1 + \sigma)) = 4S \{ \pi - \arccos[-(1 + \sigma)] \}. \quad (\text{A.4})$$

Para $\mathcal{E}_2 > -(1 + \sigma)$, as órbitas de interesse são aquelas que estão fora da região central acima, ou seja, onde $\alpha < \alpha_{min}$ e $\alpha > \alpha_{max}$ na fig. 5.4(a), e a área a ser determinada é dada pela região entre a curva $\eta(\alpha, \mathcal{E}_2)$ e as fronteiras dadas pelas retas $\alpha = \alpha_{min}$, $\alpha = \alpha_{max}$, $\eta = 1$ e $\eta = -1$. A ação neste caso escreve-se como

$$\mathcal{J}(\mathcal{E}_2) = 4S \left[\pi - 2 \int_0^{\alpha_{min}} \eta(\mathcal{E}_2, \alpha) \, d\alpha \right]. \quad (\text{A.5})$$

Para $\sigma > 0.0$, procedemos da mesma maneira. A única diferença está no fato de que, neste caso, o espaço de fase é preenchido a partir das linhas $\eta = \pm 1$ até $\eta = 0$. Para $\mathcal{E}_2 \leq -1$, temos

$$\mathcal{J}(\mathcal{E}_2) = 4S \left[\pi - \int_0^\pi \eta(\alpha, \mathcal{E}_2) d\alpha \right]. \quad (\text{A.6})$$

A energia $\mathcal{E}_2 = -1$ corresponde à órbita separatriz, de modo que para $\mathcal{E}_2 \geq -1$ a expressão muda para

$$\mathcal{J}(\mathcal{E}_2) = 4S \left[\pi - \int_{-\beta}^\beta \eta(\alpha, \mathcal{E}_2) d\alpha \right], \quad (\text{A.7})$$

onde $\beta = \frac{1}{2} \arccos(\mathcal{E}_2)$.

Os resultados para os vários casos, dados em termos de integrais elípticas completas de primeiro tipo F e de terceiro tipo Π [74], estão resumidos como segue.

i) $-2.0 < \sigma < 0.0$:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(\mathcal{E}_2 < -(1 + \sigma)) &= \frac{8S}{\sqrt{|\sigma|(1 - \mathcal{E}_2)}} \left[2\Pi \left(\frac{\pi}{2}, -\frac{1 + \mathcal{E}_2}{1 - \mathcal{E}_2}, r_1 \right) - \right. \\ &\quad \left. -(1 - \mathcal{E}_2)F \left(\frac{\pi}{2}, r_1 \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

$$\mathcal{J}(\mathcal{E}_2 = -(1 + \sigma)) = 4S [\pi - \arccos(-(1 + \sigma))] \quad (\text{A.9})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{J}(\mathcal{E}_2 > -(1 + \sigma)) &= 4S \left\{ \pi - \frac{2(1 + \sigma + \mathcal{E}_2)}{\sqrt{(2 + \sigma)(1 + \mathcal{E}_2)}} \left[\Pi \left(\frac{\pi}{2}, \frac{1 - \mathcal{E}_2}{2 + \sigma}, \frac{1}{r_1} \right) - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - F \left(\frac{\pi}{2}, \frac{1}{r_1} \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

onde

$$r_1 = \sqrt{\frac{(2 + \sigma)(1 + \mathcal{E}_2)}{|\sigma|(1 - \mathcal{E}_2)}}. \quad (\text{A.11})$$

ii) $\sigma > 0.0$:

$$\mathcal{J}(\mathcal{E}_2 \leq -1) = 4S \left[\pi + \frac{2(1 + \mathcal{E}_2)}{\sqrt{\sigma(1 - \mathcal{E}_2)}} \Pi \left(\frac{\pi}{2}, \frac{2}{1 - \mathcal{E}_2}, \frac{1}{r_2} \right) \right] \quad (\text{A.12})$$

Apêndice B

O controle da aproximação ao limite clássico pelo controle do valor de S pode ser estabelecido de maneira mais acurada, observando-se que nestes sistemas de spins aquele limite é atingido fazendo-se $S \rightarrow \infty$ e $\hbar \rightarrow 0$ com a quantidade $\hbar\sqrt{S(S+1)}$ mantida constante [33]. Portanto, escolhendo o valor para S , isto é, a diferença de energia entre níveis vizinhos no espectro quântico escalado por $JS(S+1)$, estamos de fato escolhendo o valor da constante de Planck h . Qualitativo neste ponto, este controle pode ser feito de maneira quantitativa, usando-se os dados graficados nas figuras 6.3(a)–6.3(c) para o modelo de dois spins isotrópico.

A figura 6.3(a) mostra um espectro finito para este caso, o que torna válida a discussão sobre o controle das diferenças de energia com a variação de S , uma vez que os extremos do espectro estão fixos. A curva bem comportada $\Delta_{n+1} \times \Delta_n$ – uma reta – que aparece na figura 6.3(b) mostra claramente que existe uma correlação entre subseqüentes diferenças de energia Δ_n . De fato, uma inspeção dos valores que aparecem no espectro para este caso revela que

$$\Delta_{n+1} = \Delta_n + \Delta = \Delta_0 + n\delta, \quad (\text{B.1})$$

em que Δ é constante ao longo do espectro, Δ_0 é uma diferença de referência, válida a partir de uns poucos níveis iniciais e δ depende apenas de \hbar , como

$$\delta = 4\hbar^2. \quad (\text{B.2})$$

Neste caso a constante δ obtida implica que $\hbar \approx 5 \times 10^{-3}$, confirmando a relação $\hbar\sqrt{S(S+1)} = 1$ para $S = 200$. As relações B.1 e B.2 podem ser facilmente inferidas, observando-se espectros obtidos para diferentes valores de S , com \hbar mantido fixo, e comparando suas diferenças de energia com aquelas obtidas para espectros de diferentes valores de \hbar , com S mantido fixo. Estas relações revelam uma propriedade que pode ser útil em cálculos numéricos, onde se usa simular curvas (semi)clássicas através do que é na prática um conjunto discreto de pontos. Como esperado, a diferença de energia entre níveis vizinhos não é constante para todos os níveis, mas nestes sistemas crescem à medida que são atingidas as partes superiores do espectro (veja eq. B.1). Usando a eq. B.2, através da escolha de um valor para Δ suficientemente pequeno para evitar discrepâncias numéricas com os resultados clássicos, estamos escolhendo de fato o valor da constante de Planck h , o que pode ser feito com um valor apropriado para S . Este procedimento pode ser seguido para a parte superior do espectro, onde Δ_n tem seus maiores valores: controlando esta região, controlamos o espectro como um todo.

Para o modelo de dois spins anisotrópico, entretanto, vê-se na figura 6.4(b) que a correlação entre Δ_{n+1} e Δ_n não é uma relação tão simples como é a expressão B.1

para o caso isotrópico. Ainda que, em princípio, esta relação mais complicada possa ser encontrada também para este caso anisotrópico, ela não é realmente necessária. Para diferenças de energia maiores do que 0.01 – ou seja, para aquela parte do espectro onde a aproximação clássica seria pior – a figura 6.4(b) mostra uma linha reta semelhante àquela dada pela eq. B.1. Assim, podemos seguir para este caso o mesmo procedimento sugerido logo abaixo da eq. B.2, através da escolha de um valor Δ suficientemente pequeno. Neste sentido, o caso isotrópico pode ser usado para calibrar esta verificação do valor da constante de Planck necessária para uma boa aproximação clássica.

Uma análise similar pode ser feita com os dados obtidos para o modelo de três spins, para o qual encontramos

$$\Delta_{n+1} = \Delta_n + \Delta = \Delta_0 + n\delta \quad (\text{B.3})$$

e, com uma pequena alteração na relação B.2,

$$\delta = \hbar^2. \quad (\text{B.4})$$

A constante δ obtida para o caso anisotrópico do sistema de três spins fornece $\hbar \approx 2 \times 10^{-2}$, como se espera da relação $\hbar\sqrt{S(S+1)} = 1$ para $S = 50$.

Apêndice C

Neste apêndice relatamos um pequeno estudo de alguns autoestados do modelo de três spins com $S = 20$, feito para o caso quase-integrável $\sigma = -0.05$. Com o fim de embasar o procedimento de selecionar um pseudo-espectro a partir do espectro original – quase-degenerado –, estudamos as projeções de autoestados anisotrópicos $|\psi_\mu\rangle$ dados por

$$H_3(\sigma \neq 0) |\psi_\mu\rangle = \epsilon_\mu |\psi_\mu\rangle \quad (\text{C.1})$$

sobre os autoestados isotrópicos $|\phi_n\rangle$ dados por

$$H_3(\sigma = 0) |\phi_n\rangle = \epsilon_n |\phi_n\rangle. \quad (\text{C.2})$$

As figuras C.1–C.3 mostram os coeficientes

$$|a_{n\mu}|^2 = |\langle \phi_n | \psi_\mu \rangle|^2 \quad (\text{C.3})$$

dos autoestados $|\psi_\mu\rangle$ versus o índice n correspondente ao autoestado $|\phi_n\rangle$ associado ao nível de energia ϵ_n do espectro isotrópico para $\sigma = 0$ [65]. Nas figuras C.1(a)–C.3(a) temos ampliações de regiões do espectro original e completo para $\sigma = 0.0$ (pontos representados por bolinhas pretas) e para $\sigma = -0.05$ (pontos representados por cruces), das quais os estados $|\psi_\mu\rangle$ foram escolhidos. Nestas figuras, e no restante do conjunto C.1–C.3, pode-se ver que:

i) como havíamos argumentado, a parte superior dos espectros anisotrópicos tende a recuperar a forma de escada do espectro isotrópico para $\sigma = 0.0$;

ii) o autoestado $|\psi_\mu\rangle$ correspondente a cada ponto de um dado degrau deformado do espectro anisotrópico tem uma componente dominante sobre um autoestado $|\phi_n\rangle$ do correspondente degrau do espectro isotrópico;

iii) a despeito de não ser mais constante de movimento, \mathbf{T}_3^2 mostra um comportamento de quase-constância, no sentido de que a projeção de $|\psi_\mu\rangle$ concentra-se sobre estados $|\phi_n\rangle$ do correspondente degrau do espectro isotrópico (que tem um valor definido para $\langle \mathbf{T}_3^2 \rangle$). Isto significa que ainda se pode associar o conjunto de estados $|\psi_\mu\rangle$ de um dado degrau deformado do espectro anisotrópico a um autovalor de \mathbf{T}_3^2 do correspondente degrau no espectro isotrópico. Esta propriedade reflete a natureza perturbativa da transição isotropia \rightarrow anisotropia e permite-nos escolher, de um dado degrau deformado, um único nível representativo dos autovalores de \mathbf{T}_3^2 .

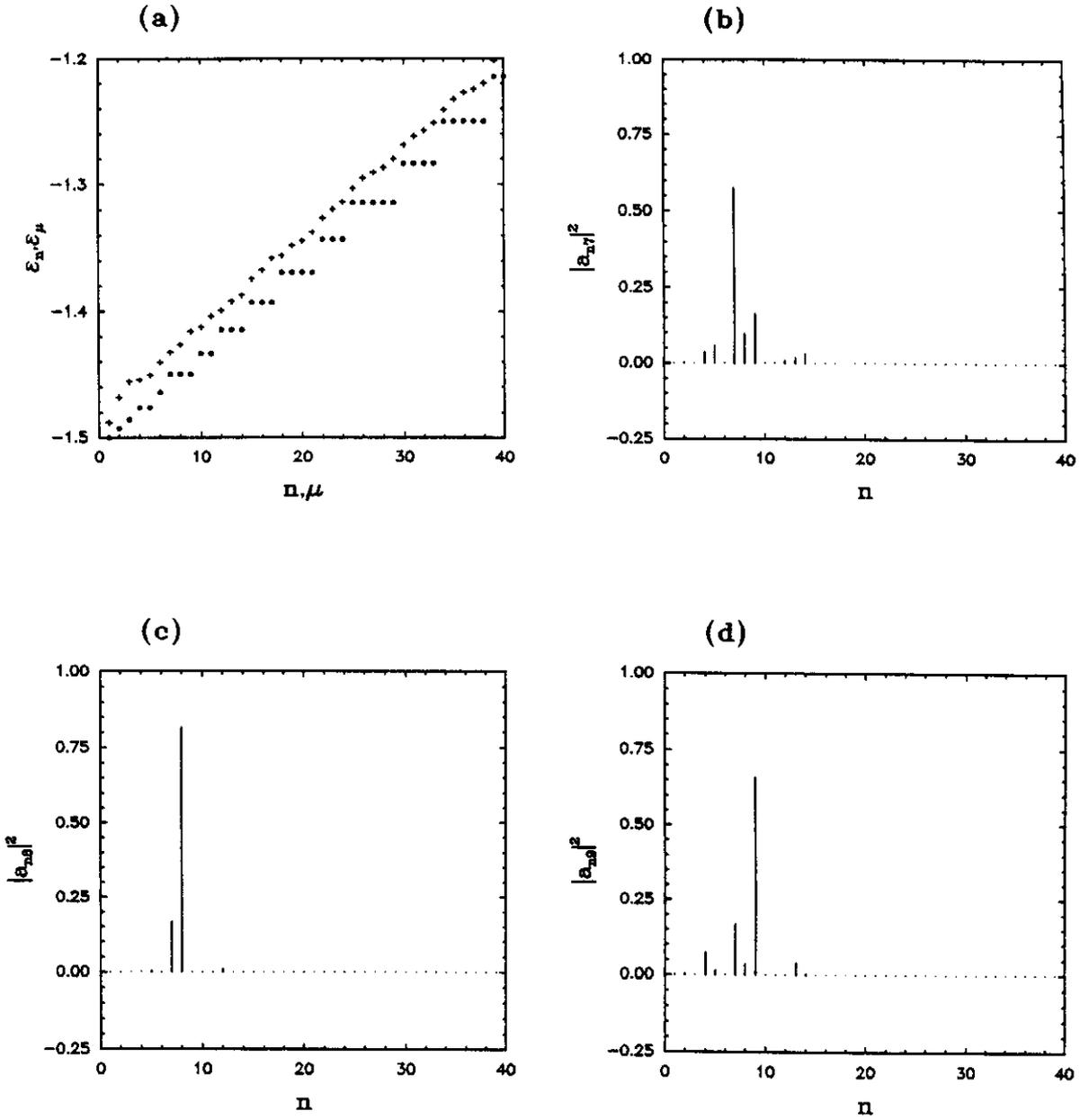


Figura C.1: (a) Ampliação da região dos espectros com $S = 20$ para $\sigma = 0.0$ (bolinhas pretas) e $\sigma = -0.05$ (cruzes) das quais os estados $|\psi_\mu\rangle$ foram escolhidos; o eixo horizontal refere-se simultaneamente a ambos os índices μ e n , e o eixo vertical refere-se aos níveis de energia \mathcal{E}_μ (cruzes) e \mathcal{E}_n (bolinhas pretas); (b) coeficientes de projeção $|a_{n,\mu}|^2$ versus o índice n do nível de energia do espectro isotrópico para $\mu = 7$; (c) o mesmo que em (b) para $\mu = 8$; (d) o mesmo que em (b) para $\mu = 9$.

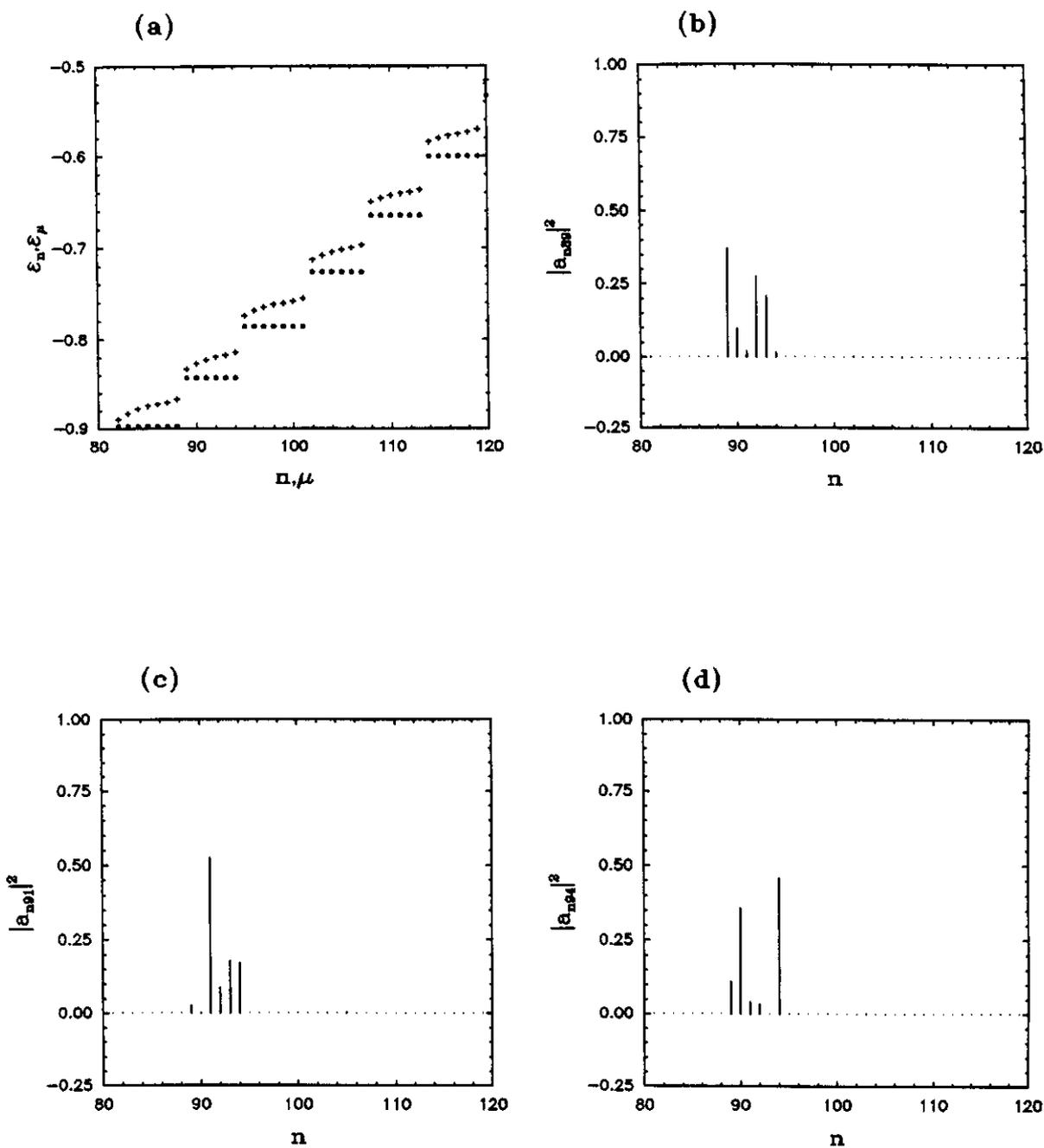


Figura C.2: (a) Como na figura C.1(a); (b) o mesmo que na figura C.1(b) para $\mu = 89$; (c) o mesmo que em (b) para $\mu = 91$; (d) o mesmo que em (b) para $\mu = 94$.

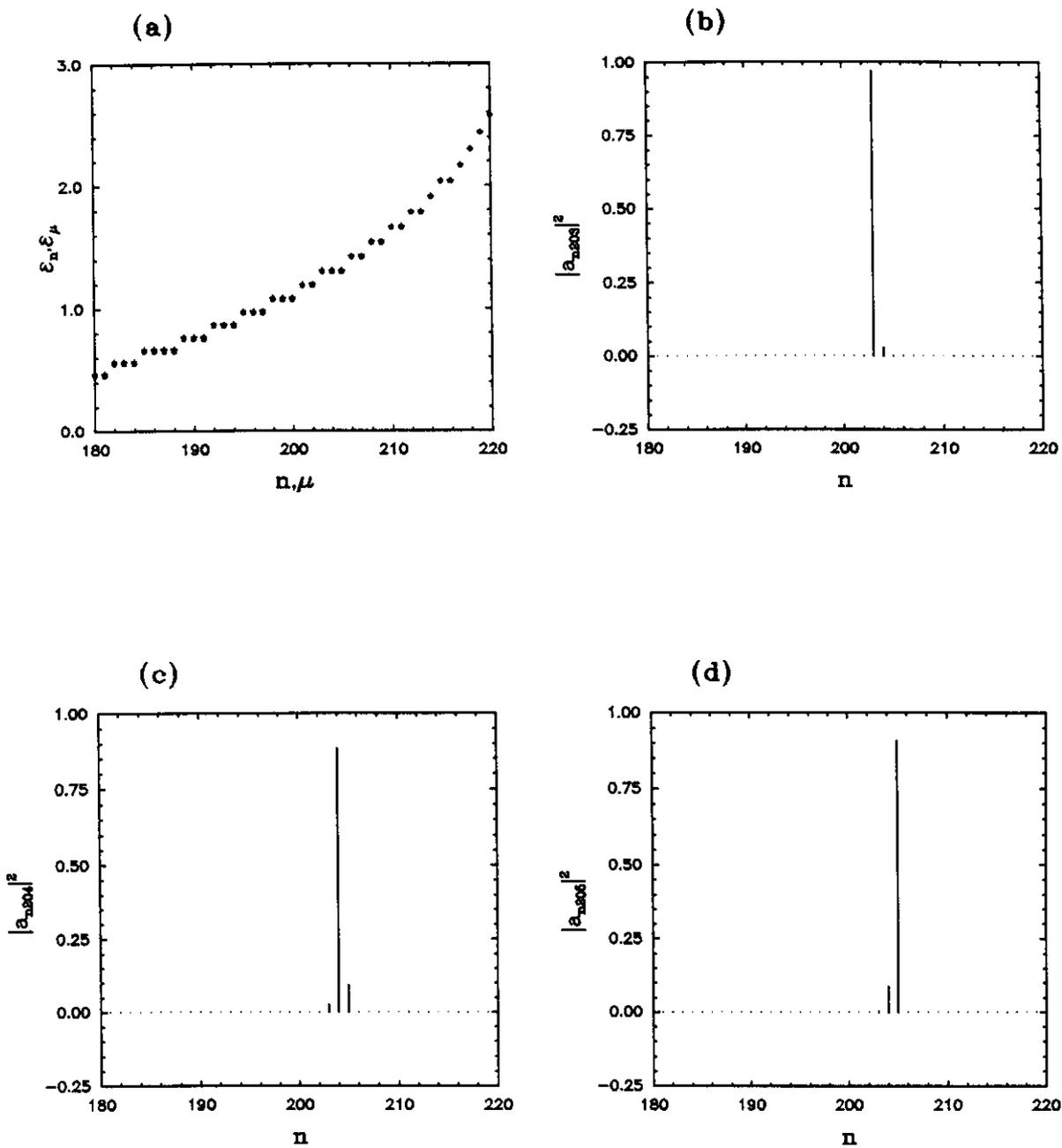


Figura C.3: (a) Como na figura C.1(a); (b) o mesmo que na figura C.1(b) para $\mu = 203$; (c) o mesmo que em (b) para $\mu = 204$; (d) o mesmo que em (b) para $\mu = 205$.

Observe-se, porém que, enquanto o comportamento descrito no item *i*) mantém-se mesmo para grandes valores de $|\sigma|$, as afirmativas encontradas nos itens *ii*) e *iii*) são válidas apenas para pequenos desvios do valor $\sigma = 0.0$. À medida que nos afastamos do caso $\sigma = 0.0$, as projeções mostradas nas figuras passam a exibir distribuições mais e mais esparsas sobre os estados isotrópicos $|\phi_n\rangle$ pertencentes a diferentes degraus, impedindo ao final que se fale de um valor dominante de $\langle \mathbf{T}_3^2 \rangle$.

Bibliografia

- [1] O. Bohigas, M.J. Giannoni e C. Schmit; *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1 (1984);
O. Bohigas, M.J. Giannoni e C. Schmit; *J. Physique Lett.* **45**, L1045 (1984);
O. Bohigas; em *Chaos and Quantum Physics*, Les Houches-Session LII, ed. por M.-J. Giannoni, A. Voros e J. Zinn-Justin (North Holland, Amsterdam, 1991), p. 87.
- [2] E.J. Heller; em *Quantum Chaos and Statistical Nuclear Physics*, ed. por T.H. Seligman e H. Nishioka (Springer-Verlag, New York, 1986), p. 162;
E.J. Heller; *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1015 (1984).
- [3] E.B. Bogomolny; *Physica D* **31**, 169 (1988).
- [4] M.C. Gutzwiller; *Chaos in Classical and Quantum Mechanics* (Springer-Verlag, New York, 1990).
- [5] A.M. Ozório de Almeida; *Sistemas Hamiltonianos. Caos e Quantização* (Editora da Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 1990).
- [6] P. Leboeuf e M. Saraceno; *J. Phys. A* **23**, 1745 (1990).
- [7] P. Leboeuf e M. Saraceno; *Phys. Rev. A* **41**, 4614 (1990).
- [8] Ver, por exemplo: N.W. Ashcroft e N.D. Mermin; *Solid State Physics* (Saunders College/HRW, Philadelphia, 1976), cap.32.
- [9] M.A.M. de Aguiar, K. Furuya, C.H. Lewenkopf e M.C. Nemes; *Europhys. Lett.* **15**, 125 (1991).
- [10] M.A.M. de Aguiar, K. Furuya, C.H. Lewenkopf e M.C. Nemes; *Ann. Phys.* **216**, 291 (1992).
- [11] K. Furuya, M.A.M. de Aguiar, C.H. Lewenkopf e M.C. Nemes; *Ann. Phys.* **216**, 313 (1992).
- [12] M.L. Cescato, M. Kyotoku e M.C. Nemes; *Large N Scaling Behavior in the Pairing Model*, preprint.

- [13] M.T. dos Santos; *Cicatrizes de Órbitas Periódicas na Interação de Emparelhamento*, tese de mestrado (Universidade de São Paulo, São Paulo, 1992).
- [14] E. Magyari, H. Thomas, R. Weber, C. Kaufman e G. Müller; *Z. Phys. B* **65**, 363 (1987).
- [15] N. Srivastava, C. Kaufman, G. Müller, R. Weber e H. Thomas; *Z. Phys. B* **70**, 251 (1988).
- [16] K. Nakamura and A.R. Bishop; *Phys. Rev. B* **33**, 1963 (1986).
- [17] H. Frahm e H.J. Mikeska; *Z. Phys. B* **60**, 117 (1985).
- [18] H.J. Lipkin, N. Meshkov e A.J. Glick; *Nucl. Phys.* **62**, 188 (1965);
N. Meshkov, A.J. Glick e H.J. Lipkin; *Nucl. Phys.* **62**, 199 (1965);
A.J. Glick, H.J. Lipkin e N. Meshkov; *Nucl. Phys.* **62**, 211 (1965).
- [19] M.C. Cambiaggio, G.G. Dussel e M. Saraceno; *Nucl. Phys. A* **415**, 70 (1984).
- [20] R.B. Stinchcombe; em *Electron-Phonon Interactions and Phase Transitions*, NATO Advanced Study Institute Series, Series B: Physics, vol.29, ed. por T. Riste (Plenum Press, New York, 1977), p. 209.
- [21] S.D. Prado e M.A.M. de Aguiar; *Ann. Phys.* **231**, 290 (1994);
S.D. Prado; *Quebra de Simetrias em Sistemas Hamiltonianos: Efeitos Clássicos e Quânticos*, tese de mestrado (Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 1992).
- [22] G. Müller; *Phys. Rev. B* **34**, 3345 (1986).
- [23] C. Kittel e H. Shore; *Phys. Rev.* **138** (4A), 1165 (1965).
- [24] J.F. Cooke; *Phys. Rev.* **141**, 390 (1966).
- [25] Ver, por exemplo: C. Domb e M.S. Green (editores); *Phase Transitions and Critical Phenomena* (Academic Press, Londres, 1972), Vol. I, Cap. 5; Vol. II, Cap. 5.
- [26] T.A. Kent, B.H. Huynh e E. Münch; *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **77**, 6574 (1980).
- [27] J.-J. Girerd, G.C. Papaefthymiou, A.D. Watson, E. Gamp, K.S. Hagen, N. Edelstein, R.B. Frankel e R.H. Holm; *J. Am. Chem. Soc.* **106**, 5941 (1984).
- [28] S.J. Krieger; *Nucl. Phys. A* **276**, 12 (1977).
- [29] M. Feingold e A. Peres; *Physica D* **9**, 433 (1983).

- [30] H. Goldstein; *Classical Mechanics* (Addison-Wesley Publishing Company, Massachusetts, 1980), segunda edição.
- [31] H.C. Ohanian; *Am. J. Phys.* **54**, 500 (1986).
- [32] J. Hietarinta; *Phys. Lett. A* **93**, 55 (1982);
J. Hietarinta; *J. Math. Phys.* **25**, 1833 (1984).
- [33] L.E. Reichl; *The Transition to Chaos in Conservative Classical Systems: Quantum Manifestations* (Springer-Verlag, New York, 1992).
- [34] M.E. Fisher; *Am. J. Phys.* **32**, 343 (1964).
- [35] K. Millard e H. Leff; *J. Math. Phys.* **12**, 1000 (1971).
- [36] M. Månson; *Phys. Rev. B* **12**, 400 (1975).
- [37] V. Marvulle; *Sobre os Limites Clássico e Semiclássico do Modelo Spin-Boson*, tese de doutorado (Universidade de São Paulo, São Paulo, 1991).
- [38] M.B. Cibils, Y. Cuche, W.F. Wreszinski, J.-P. Amiet e H. Beck; *J. Phys. A* **23**, 545 (1990).
- [39] J.M. Radcliffe; *J. Phys. A* **4**, 313 (1971).
- [40] J. R. Klauder e B.-S. Skagerstam; *Coherent States: Applications in Physics and Mathematical Physics* (World Scientific, Singapura, 1985); e referências ali contidas.
- [41] E.H. Lieb; *Commun. Math. Phys.* **31**, 327 (1973).
- [42] P. Kramer e M. Saraceno; *Geometry of the Time-Dependent Variational Principle in Quantum Mechanics*, Lecture Notes in Physics **140** (Springer-Verlag, New York, 1981).
- [43] L.G. Yaffe; *Rev. Mod. Phys.* **54**, 407 (1982).
- [44] J.R. Klauder e E.C.G. Sudarshan; *Fundamentals of Quantum Optics* (Benjamin, New York, 1968).
- [45] A. Perelomov; *Generalized Coherent States and Their Applications* (Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg, 1986).
- [46] M. O. Terra; comunicação pessoal.
- [47] M.A.M. de Aguiar e A.M. Ozório de Almeida; *J. Phys. A* **23**, L1325 (1990).
- [48] K. Takahashi; *J. Phys. Soc. Jpn.* **55**, 762 (1986).

- [49] M.A.M. de Aguiar; *Caos na Mecânica Quântica*, notas de aula (Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 1993).
- [50] M.L. Mehta; *Random Matrices and the Statistical Theory of Energy Levels* (Academic Press, New York, 1967).
- [51] M. Feingold; em *Chaos, Noise and Fractals*, ed. por E.R. Pike e L.A. Lugiato (Adam Hilger, Bristol, 1987).
- [52] G.Q. Pellegrino, K. Furuya e M.C. Nemes; *Chaos, Solitons and Fractals* **3**, 327 (1993).
- [53] A. Einstein; *Verh. Dtsch. Phys. Ges.* **19**, 82 (1917);
M.L. Brillouin; *J. Phys.* (Paris) **7**, 353 (1926);
J.B. Keller; *Ann. Phys.* **4**, 180 (1958);
V.P. Maslov e M.V. Fedoriuk; *Semi-Classical Approximations in Quantum Mechanics* (Reidl, Dordrecht, 1981).
- [54] H. Kleinert e H. Reinhardt; *Nucl. Phys. A* **332**, 331 (1979).
- [55] K.-K. Kan, J.J. Griffin, P.C. Lichtner e M. Dworzecka; *Nucl. Phys. A* **332**, 109 (1979);
S. Levit, J.W. Negele and Z. Patiel; *Phys. Rev. C* **21**, 1603 (1980).
- [56] H. Kuratsuji e Y. Mizobuchi; *J. Math. Phys.* **22**, 757 (1981).
- [57] Ver, por exemplo: C. Cohen-Tannoudji, B. Diu e Franck Laloë; *Quantum Mechanics* (John Wiley & Sons e Hermann, Paris, 1977).
- [58] G.Q. Pellegrino, K. Furuya e M.C. Nemes; *On the Interplay Between Symmetry Breaking, Integrability and Chaos in the Semiclassical Limit of the Heisenberg System*, aceito para publicação em *Chaos*.
- [59] H. Hirooka, Y. Yotsuya, Y. Kobayashi e N. Saito; *Phys. Lett. A* **101**, 115 (1984).
- [60] D. Farrelly; *Phys. Lett. A* **104**, 63 (1984).
- [61] M.V. Berry; *Phys. Lett. A* **104**, 306 (1984).
- [62] H. Hirooka, M. Kurokawa e N. Saito; *J. Phys. Soc. Japan* **54**, 3209 (1985).
- [63] J. Kurchan, P. Leboeuf e M. Saraceno; *Phys. Rev. A* **40**, 6800 (1989).
- [64] D.C. Meredith, S.E. Koonin e M.R. Zirnbauer; *Phys. Rev. A* **37**, 3499 (1988).
- [65] L. Benet, T.H. Seligman e H.A. Weidenmüller; *Phys. Rev. Lett.* **71**, 529 (1993).

- [66] Y. Alhassid e R.D. Levine; *Phys. Rev. A* **40**, 5277 (1989);
M. V. Berry e M. Robnik; *J. Phys. A* **17**, 2413 (1984).
- [67] G.Q. Pellegrino, K. Furuya, M.C. Nemes e S. Pinto de Carvalho; *Europhys. Lett.* **27**, 7 (1994).
- [68] H.M. Sommermann e H.A. Weidenmüller; *Europhys. Lett.* **23**, 79 (1993).
- [69] H.A. Weidenmüller; *Phys. Rev. A* **48**, 1819 (1993).
- [70] J.M. Leinaas e J. Myrheim; *Il Nuovo Cimento B* **37**, 1 (1977).
- [71] G.Q. Pellegrino, K. Furuya e M.C. Nemes; não publicado.
- [72] A.H. Blin, B. Hiller, M.C. Nemes e J. da Providência; *J. Phys. A* **26**, 581 (1993).
- [73] M.O. Terra, A.H. Blin, B. Hiller, M.C. Nemes, C. Providência e J. da Providência; *J. Phys. A* **27**, 697 (1994).
- [74] J.S. Gradshteyn e I.M. Ryzhik; *Table of Integrals, Series and Products* (Academic Press, San Diego, 1980).