

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

QUEBRA DE SIMETRIAS EM SISTEMAS
HAMILTONIANOS:
EFEITOS CLÁSSICOS E QUÂNTICOS

dissertação submetida ao
Instituto de Física "Gleb Wataghin"
sob orientação do Professor
Dr. Marcus A. M. de Aguiar
para a obtenção do título de Mestre em Física

Sandra Denise Prado

15 de julho de 1992

Este exemplar corresponde à
redação final da Tese defendida
pela aluna Sandra Denise Prado e
aprovada pela Comissão Julgadora.

7/11/93



Agradecimentos.

Ao professor Marcus pela orientação, amizade e principalmente pelo respeito, que o fez sempre sugerir em vez de se impor.
a professora Kyoko que acompanhou este trabalho, desde o Exame de Qualificação, pela sua amizade, pelas palavras de incentivo e pelas sugestões,
ao professor Roversi pelas sugestões, que foram prontamente acatadas,
aos meus amigos (do grupo de Caos especialmente) pelas acaloradas discussões existenciais, filosóficas, políticas, etc., etc., etc... que amenizam a angústia de não termos "certezas" em relação à vida.

Obrigada.

Trabalharam muito para que...

*Carinhosamente,
a Jacob e Maria,
meus pais.*

**QUEBRA DE SIMETRIAS EM SISTEMAS
HAMILTONIANOS:
EFEITOS CLÁSSICOS E QUÂNTICOS.**

RESUMO

Apresentamos neste trabalho, um estudo numérico da influência da quebra de simetrias discretas nos comportamentos clássico e quântico de sistemas

Hamiltonianos com dois graus de liberdade. A Hamiltoniana estudada, possui inicialmente as simetrias de reversão temporal e reflexão espacial e representa o movimento de uma partícula carregada num potencial bidimensional, o potencial Nelson. Introduzimos então, um termo cx^3 que quebra a simetria de reflexão espacial e, em seguida, os termos βp_x e βp_y , que representam a adição de um campo magnético perpendicular ao plano xy e quebram a simetria de reversão temporal. Procuramos observar através das seções de Poincaré e das famílias de órbitas periódicas, como se alteram as bifurcações ao fazermos c e β diferentes de zero. Essas famílias são identificadas na transformada de Fourier do espectro suavizado.

Conteúdo

1	Introdução	3
2	Características Gerais dos Sistemas Dinâmicos	7
2.1	Generalidades	8
2.1.1	Sistemas dinâmicos	8
2.1.2	Espaço de Fase	9
2.1.3	Integrais de Movimento	10
2.1.4	Exemplos de comportamento em Sistemas Dinâmicos .	11
2.2	Seção de Superfície e Mapas	13
2.2.1	Propriedades	15
2.2.2	Pontos Fixos	18
2.2.3	Ciclos	21
2.3	Sistemas Hamiltonianos	23
2.3.1	Propriedades	23
2.3.2	Órbitas Periódicas e sua estabilidade	25
2.4	Sistemas integráveis e ergódicos	28
2.4.1	Sistemas integráveis	28
2.4.2	Toros e trajetórias	31
2.4.3	Seção de Superfície	33
2.4.4	Sistemas super-integráveis	35
2.4.5	Sistemas ergódicos	37
3	Caos Clássico	39
3.1	O teorema de KAM	41
3.2	Regiões caóticas	45
3.3	Separação de Órbitas Vizinhas	50

3.4	Ilhas	53
4	Caologia Quântica	59
4.1	Integral de Caminho de Feynman.	61
4.2	Primeira e segunda variação de $\int L dt$	64
4.3	O Propagador Semi-Clássico.	71
4.4	A Função de Green.	73
4.4.1	A Função de Green Semi-Clássica.	74
4.5	Caos versus integrabilidade.	75
4.6	A Fórmula Geral do Traço.	77
4.7	Somando repetições de órbitas estáveis	84
4.7.1	Somando repetições de órbitas instáveis	86
4.7.2	Simetrias discretas.	88
4.8	Aplicabilidade da Fórmula de Gutzwiller	89
5	Quebra de Simetrias nas Seções de Poincaré	92
5.1	O Potencial Nelson e sua generalização	93
5.2	A seção de Poincaré de NELSON	97
5.3	Quebra da simetria de reflexão espacial nas Seções de Poincaré	103
5.4	Quebra da simetria de reversão temporal nas seções de Poincaré	108
6	Quebra de Simetrias nas Famílias de Órbitas Periódicas	119
6.1	Famílias de Órbitas periódicas do potencial Nelson	122
6.2	Quebra da simetria de reflexão espacial na família de órbitas periódicas	133
6.3	Quebra da simetria de reversão temporal na família de órbitas periódicas	139
7	Quebra de simetrias no espectro de NELSON quântico	154
7.1	A densidade de estados suavizada	154
7.2	Quebra das simetrias no espectro de Nelson Quântico	160
8	Conclusões	172
9	Bibliografia	174

Capítulo 1

Introdução

Nos últimos trinta anos aproximadamente, tem se verificado que a teoria da mecânica clássica de Newton está longe de ser um assunto acabado e sem interesse para a Física Moderna. Com os trabalhos teóricos de H. Poincaré do começo do século e mais recentemente com uma série de cálculos computacionais, verificou-se que sistemas aparentemente muito simples (como uma partícula movendo-se numa superfície bidimensional) poderiam apresentar movimentos altamente instáveis, de tal forma que trajetórias inicialmente muito próximas, se afastariam exponencialmente uma das outras decorrido algum tempo. O estudo de sistemas caóticos (onde o movimento é sempre instável) e de sistemas não-integráveis (onde o movimento é parte caótico, parte regular) são de grande importância em Física, pois são característicos de sistemas não-lineares, em geral.

Se por um lado a teoria clássica de “sistemas dinâmicos” é hoje em dia bem estabelecida do ponto de vista matemático, pouco se sabe sobre o comportamento quântico de sistemas cujo análogo clássico apresenta caos. A pergunta que se procura responder é:

Que características especiais possuem os sistemas quânticos com análogos clássicos caóticos, que os sistemas com análogos regulares não possuem?

A melhor forma de se responder essa pergunta é olhar para o limite semiclássico $\hbar \rightarrow 0$ onde os efeitos clássicos são mais pronunciados. Nesse limite existem fórmulas [1], que relacionam o espectro de energia do sistema quântico com as órbitas periódicas de seu análogo clássico. Vários cálculos

numéricos recentes tem confirmado a importância das órbitas periódicas nas auto-energias e auto-funções de sistemas Hamiltonianos. Sendo assim, o estudo das propriedades dessas órbitas (estabilidade, bifurcações, etc.) tem se tornado cada vez mais relevante.

Sistemas físicos invariantes com respeito a certas transformações, por exemplo simetrias, são muito comuns em Física. Essas simetrias, no entanto, são muitas vezes quebradas, quando esses sistemas são acoplados a outros sistemas, ou mesmo a ruídos externos. Um exemplo importante são os sistemas Hamiltonianos invariantes por reversão temporal [2]. Nesse caso, a introdução de campos magnéticos pode alterar esse quadro no caso de partículas carregadas. A quebra de simetria provocada pela ação desses campos tem consequências importantes tanto do ponto de vista clássico quanto quântico. Mostra-se, por exemplo, que existem alterações qualitativas em certas bifurcações de órbitas periódicas [3].

Estudamos neste trabalho, os efeitos clássicos e quânticos da quebra de simetrias discretas em um sistema Hamiltoniano com dois graus de liberdade. Em particular, estudamos o comportamento de famílias de órbitas periódicas para o problema de uma partícula carregada movendo-se em uma superfície bidimensional sujeita a um campo magnético constante na direção perpendicular a essa superfície. Podemos descrever esse sistema por uma Hamiltoniana do tipo:

$$H(x, p_x, y, p_y) = \frac{1}{2} (p_x + \beta y)^2 + \frac{1}{2} (p_y - \beta x)^2 + V(x, y)$$

onde $\beta = eB_0/2c$ sendo c a velocidade da luz.

A presença do campo magnético quebra a simetria de reversão temporal do sistema. Em um trabalho recente [4], mostrou-se que essa quebra de simetria altera qualitativamente o comportamento das órbitas periódicas e, em particular, altera um tipo de bifurcação que essas órbitas podem apresentar.

Nosso objetivo foi assim, fazer um estudo numérico da influência do campo magnético nas bifurcações das órbitas periódicas mais simples do sistema e analisar o efeito destas bifurcações no espectro do correspondente sistema quântico. Para que a análise quântica fosse a mais simples possível.

$V(x, y)$ foi escolhido de maneira conveniente. Em particular ele é limitado, “um vale profundo”, (para garantir o espectro discreto) e a órbita periódica analisada apresenta o tipo de bifurcação que é modificada pela presença do campo magnético. O potencial escolhido, apelidado de *potencial NELSON*, foi inventado por Baranger e é de interesse em Física Nuclear [4], pois sua forma é própria para simular um grau de liberdade coletivo. Esse potencial, assim representado:

$$V(x, y) = \left(y - \frac{x^2}{2}\right)^2 + \mu \frac{x^2}{2} \quad (\mu = 0.1).$$

tem a simetria $V(x, y) = V(-x, y)$ e já foi amplamente estudado [4]. No entanto, para ficar um estudo mais genérico, introduzimos um outro parâmetro c , que quebra a simetria de reflexão $x \rightarrow -x$, de forma que a Hamiltoniana estudada tem a seguinte forma:

$$H(x, p_x, y, p_y) = \frac{1}{2} (p_x + \beta y)^2 + \frac{1}{2} (p_y - \beta x)^2 + \left(y - \frac{x^2}{2} + cx^3\right)^2 + \mu \frac{x^2}{2}.$$

Ressaltamos que a investigação numérica da quebra de simetria no espectro não é trivial e tem grande importância para o estudo de propriedades semiclássicas de sistemas não-integráveis. Sendo assim, a análise dos resultados será sempre feita em função dos parâmetros c e β de quebra de simetria.

Organizamos este trabalho como se segue: No capítulo 2, abordamos as características gerais dos Sistemas Dinâmicos e em particular, dos Sistemas Hamiltonianos de maneira informal, não intencionando provar suas propriedades fundamentais, mas sim melhor entendê-las.

No capítulo 3, mostramos o comportamento de sistemas não-lineares, analisados à luz do Teorema KAM. Enfatizamos que caos não é para ser relacionado simplesmente com desordem, mas sim com um tipo de ordem

sem periodicidade. Defrontamo-nos com a dificuldade de cálculo causada pela separação exponencial de órbitas vizinhas no sistema caótico, o que em princípio induz a conclusão de que experimentos numéricos nada podem dizer acerca das propriedades das regiões caóticas, mas logo vemos que a distribuição de pontos na seção de Poincaré, destes sistemas, tem propriedades estatísticas bem definidas.

No capítulo 4, abordamos o Caos Quântico, fazendo um estudo da Fórmula do Traço de Gutzwiller, vendo assim, como as órbitas periódicas aparecem no cálculo da densidade de estados de sistemas quânticos, cujo análogo clássico é caótico. Apesar de chegarmos a uma expressão fechada, percebemos logo que é difícil manuseá-la, pois requer um conhecimento de todas as órbitas periódicas do sistema classicamente caótico.

Esses primeiros capítulos introduzem de maneira geral, toda a teoria que usamos nos cálculos ou na análise de resultados ¹. Tendo em vista que, essa teoria está amplamente estabelecida, ela foi colocada nesta dissertação por motivo de completeza. Mas também, em respeito ao leitor já familiarizado com o assunto, os nossos resultados foram cuidadosamente separados da introdução teórica, compondo assim os seguintes capítulos, ou seja, no que podemos chamar de segunda parte desta dissertação, a começar pelo capítulo 5, analisamos as seções de Poincaré do potencial NELSON, quebramos as simetrias da Hamiltoniana e discutimos seus efeitos aparentes nas seções.

No capítulo 6, calculamos as famílias de órbitas periódicas do potencial Nelson e observamos como reagem as bifurcações ao quebrarmos as simetrias de reflexão espacial e reversão temporal.

Finalmente no capítulo 7, a quebra de simetrias é observada na transformada de Fourier do espectro quântico suavizado do potencial Nelson quântico e o capítulo 8, fecha esse trabalho com nossas conclusões e perspectivas.

¹Para escrever esses primeiros capítulos, fiz um apanhado de referências básicas como o livro de Ozório de Almeida [5], notas de aula de Marcus A. M. de Aguiar [6], o trabalho de Berry [7] e principalmente Chaotic Behaviour of Deterministic Systems [8]. Tomei também por base, prefácios e introduções de alguns livros e vários trabalhos, entre eles, convém citar: Order with Chaos [9], Quantum Chaos [10], An Introduction to Chaotic Dynamical Systems [11], Chaos [12] e também Caos. A criação de uma nova ciência [13].

Capítulo 2

Características Gerais dos Sistemas Dinâmicos

Por sistema dinâmico, nós entendemos um sistema, cuja natureza (física, química, eletromecânica, biológica, econômica, etc.) pode ser descrita por várias formas matemáticas: equações diferenciais ordinárias (autônomas ou não), equações diferenciais parciais, mapeamentos (invertíveis ou não) da linha ou do plano. Dessa forma, surge um campo de investigação muito amplo, dado que ele abrange a análise de todos os fenômenos, inclusive os dependentes do tempo. Tratando os principais tipos de comportamento ou evolução sem referência direta a matéria real através da qual os fenômenos se manifestam, este corpo de doutrina exibe um alto grau de generalidade e de universalidade que, neste sentido, parece uma teoria física poderosa e estruturada.

Vamos distinguir, claramente, entre sistemas com atrito e aqueles sem atrito, pois os dois não levam à mesma classe de problemas. A presença de atrito interno, no sentido mais geral do termo, tem como um corolário a existência de um **atrator**, isto é, de um limite assintótico (quando $t \rightarrow \infty$) das soluções, um limite no qual a condição inicial — o ponto de partida — não tem influência direta. Em mecânica, o atrito acarreta uma diminuição contínua da energia, portanto, os correspondentes sistemas são chamados **dissipativos**. Os sistemas sem atrito, chamados **conservativos** ou **Ha-**

miltonianos, mais uma vez com referência à mecânica tem seu particular interesse e utilidade. Em particular, certas questões de indisputável importância prática, como a evolução do sistema solar ou o comportamento de um plasma em um acelerador, por exemplo, estão sob seu domínio. Estes assuntos requerem métodos específicos, pois a ausência de um atrator confere uma influência determinante das condições iniciais.

Entre os grandes problemas não resolvidos da mecânica clássica, a turbulência é o mais velho. É interessante notar que há trinta anos, aproximadamente, pouco mais era sabido sobre turbulência que no começo do século dezanove, quando Navier obteve as equações que governam o fluxo de um fluido. Aqui está algo que parece extraordinário, quando consideramos o progresso, desde então, acompanhado no entendimento da estrutura da matéria tão bem como o do universo.

O principal objetivo deste capítulo é dar uma pequena introdução aos sistemas dinâmicos. Segue-se, portanto uma apresentação informal, descritiva e não-rigorosa. Queremos *entender* as propriedades fundamentais dos sistemas dinâmicos mais que *prová-las*. Os resultados matemáticos serão mencionados somente quando tenham um papel essencial nos eventos (ex. o teorema de KAM, ou a teoria dos expoentes de Liapunov, etc.).

2.1 Generalidades

2.1.1 Sistemas dinâmicos

Do ponto de vista dos físicos, um sistema dinâmico pode ser definido como algum sistema físico tal que:

- seu estado em um dado tempo é completamente definido pelos valores de N variáveis $x_1, \dots, x_n$;
- sua evolução é dada por um sistema de N equações diferenciais ordinárias:

$$\begin{aligned} dx_1/dt &= f_1(x_1, \dots, x_N) \\ &\vdots \\ dx_N/dt &= f_N(x_1, \dots, x_N) \end{aligned} \quad (2.1)$$

As N variáveis dependentes podem representar quantidades físicas arbitrárias: posições, velocidades, ângulos, temperaturas, pressões.

Definindo um vetor $\vec{X}$ de componentes $x_1, \dots, x_N$ e um vetor $\vec{F}$ com componentes $f_1, \dots, f_N$, nós podemos escrever o sistema diferencial, mais simplesmente, ou seja:

$$\frac{d\vec{X}}{dt} = \vec{F}(X) \quad (2.2)$$

N é a **ordem** do sistema dinâmico.

O fato de que todas as equações são supostas como sendo de primeira-ordem não é uma restrição como poderia parecer a primeira vista: um sistema diferencial sempre pode ser colocado nesta forma introduzindo-se variáveis adicionais.

O sistema (2.1) é **autônomo**, o que significa que t não aparece no lado direito da equação. Mais uma vez, isto não é realmente uma restrição: um sistema não-autônomo pode ser transformado em um sistema autônomo introduzindo-se variáveis adicionais.

2.1.2 Espaço de Fase

Uma representação muito útil do sistema dinâmico é o **espaço de fase**. Este é simplesmente um espaço de N dimensões com $x_1, \dots, x_N$ como coordenadas. O estado do sistema num dado tempo é representado por um ponto no espaço de fase. Este ponto se move com o tempo e seu vetor velocidade é $\vec{F}$. Esta velocidade é conhecida do sistema (2.1); de fato, dado o sistema (2.1), podemos imediatamente desenhar o vetor velocidade em todo

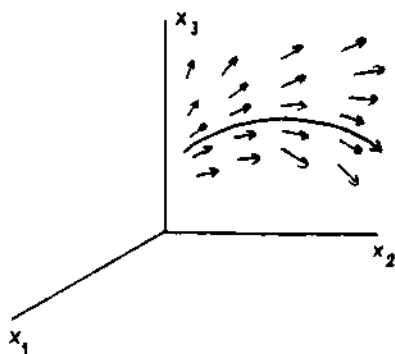


Figura 2.1: campo de velocidades.

o espaço de fase como na fig. (2.1). Os pontos representativos descrevem uma curva, chamada **trajetória** ou **órbita**, que é tangente ao campo vetorial em cada ponto. Assim, simplesmente colocando o campo de velocidades no espaço de fase podemos ter alguma idéia da forma das soluções. Note que isto é possível somente porque todas as equações diferenciais em (2.1) são de primeira-ordem e o sistema é autônomo.

Através de um ponto no espaço de fase passa em geral, uma trajetória e uma só. Fisicamente: se o estado do sistema é conhecido em um dado tempo, então sua evolução futura está determinada. Seu passado também está determinado, porque o sistema (2.1) pode ser integrado para trás no tempo. Como consequência, duas trajetórias partindo em dois pontos diferentes, em um dado instante, nunca irão coincidir em nenhum tempo posterior.

2.1.3 Integrais de Movimento

Uma integral de movimento de um sistema diferencial é uma função $I(x_1, \dots, x_N)$, cujo valor é uma constante. Em outras palavras, ela satisfaz a equação identicamente

$$\frac{\partial I}{\partial x_1} f_1 + \dots + \frac{\partial I}{\partial x_N} f_N = 0. \quad (2.3)$$

Considere no espaço de fase, o subespaço definido por $I(x) = C$, onde C é uma constante. Ele é uma variedade de dimensão $(N - 1)$. Se agora, damos para C todos os valores possíveis, obtemos uma família de tais variedades, as quais ocupam o espaço de fase completamente. Portanto, se conhecermos uma integral I , podemos efetivamente reduzir a ordem do sistema de uma unidade. Para fazer isto, escolhemos um valor definido para C ; resolvemos a equação $I(x) = C$ para x_n , por exemplo; substituímos esta expressão para x_n nas primeiras $(N - 1)$ equações da (2.1), e tiramos a última equação. Resulta, assim, um sistema de ordem $(N - 1)$.

Se estamos interessados em uma trajetória particular, então o valor de C é determinado pelas condições iniciais. Se por outro lado, queremos estudar todas as soluções do sistema, então C deve ser considerado como um parâmetro e a $(N - 1)$ -ésima ordem do sistema pode ser estudada para todos os valores deste parâmetro.

Mais geralmente, se p integrais $I_1, \dots, I_p$ são conhecidas, então cada trajetória é restringida a uma variedade de $(N - p)$ dimensões, definida por:

$$I_1(x) = C_1, \dots, I_p(x) = C_p \quad (2.4)$$

e a ordem do sistema cai para $(N - p)$.

As integrais são frequentemente deduzidas de considerações físicas (leis de conservação).

2.1.4 Exemplos de comportamento em Sistemas Dinâmicos

Dado um sistema dinâmico na forma (2.1), duas situações podem ocorrer:

1. A solução geral pode ser explicitamente escrita, na forma $x(a_1, \dots, a_N, t)$, onde os a_i são as constantes de integração. Um exemplo é o problema gravitacional de dois corpos. O problema pode ser considerado completamente solúvel, dado que as informações desejadas podem ser facilmente obtidas da solução explícita.

2. Nenhuma solução geral explícita é conhecida. Um exemplo é o problema gravitacional de três corpos. Nós podemos distinguir dois casos:

(a) A solução é desejada somente para um intervalo finito de tempo, da mesma ordem da escala de tempo natural do sistema. Exemplo: computação das posições dos planetas para os próximos 100 anos. As integrações numéricas dão a resposta desejada.

(b) A única solução de interesse é aquela para um tempo longo comparado a escala de tempo do sistema. Exemplo: construção de um acelerador de partículas, onde as partículas podem efetuar 10^{11} revoluções. Essencialmente, o que queremos saber em tais casos é o comportamento assintótico das soluções para $t \rightarrow \infty$.

Nós podemos distinguir entre dois tipos de trajetórias:

i. As trajetórias **não-recorrentes** que são aquelas, que, grosseiramente falando, não voltam para as regiões onde tenham visitado; o exemplo mais simples é a trajetória que vai para o infinito. Neste caso, nada de muito geral pode ser afirmado, ou seja, visto que, a trajetória está constantemente entrando em novos territórios no espaço de fase, coisa que acontece, dependendo da forma do campo de velocidades que ela tem, então nenhuma teoria geral é possível. Um exemplo é o problema de dois corpos com potencial repulsivo, onde os dois corpos escapam para o infinito.

ii. As trajetórias **recorrentes**, ao contrário, são aquelas que voltam outra vez, indefinidamente, para alguma parte do espaço de fase a qual elas já visitaram. Este é o caso que dá margem ao comportamento mais complexo e interessante. O fato que as mesmas regiões do espaço de fase são visitadas muitas vezes significa que a trajetória não pode ser completamente arbitrária: certas regularidades devem estar presentes.

Isto permite encontrar propriedades que são válidas para uma ampla classe de sistemas dinâmicos. Este último caso, o qual felizmente inclui os mais interessantes sistemas dinâmicos reais é o que será considerado daqui para frente.

Devemos observar que um dado sistema pode exibir ambas trajetórias **recorrentes** e **não-recorrentes**, por exemplo, o problema de dois corpos. Trajetórias não-recorrentes e trajetórias recorrentes são também chamadas respectivamente, **errantes** e **não-errantes**.

Para conseguirmos um bom entendimento do comportamento de um sistema dinâmico devemos rever um número de fatos básicos e definições.

2.2 Seção de Superfície e Mapas

Ao estudarmos os sistemas complexos, é útil introduzir o conceito de espaço de fase. Espantosamente, este conceito, que agora é tão amplamente explorado por especialistas no campo de sistemas dinâmicos pode ser encontrado em **"Mathematical Principles of Natural Philosophy"** de Newton, publicado em 1687.

O espaço de fase proporciona uma maneira de transformar números em imagens, extraindo todas as informações essenciais de um sistema de partes móveis, mecânicas ou fluidas, e traçando um mapa rodoviário flexível de todas as suas possibilidades. No espaço de fase, o conhecimento total sobre um sistema dinâmico num instante único de tempo resume-se a um ponto: Este ponto é o sistema dinâmico-naquele instante. No instante seguinte, porém, o sistema terá se modificado, mesmo que seja levemente, e assim o ponto se move. A história no tempo de um sistema pode ser registrada num gráfico pelo ponto móvel, traçando-se sua órbita pelo espaço de fase com a passagem do tempo.

Como podem todas as informações sobre um sistema complicado estar armazenadas num ponto? Em sistema mecânicos regidos pela equação de Newton, o conhecimento da posição e do momento num dado instante são suficientes para determinar o estado do sistema.

A introdução do espaço de fase foi um passo poderoso do ponto de vista matemático, mas ele representa um retrocesso do ponto de vista da intuição humana, pois o velho espaço euclidiano tridimensional transforma-se num espaço de fase de seis dimensões, três para as coordenadas e três para os momentos. Como visualizar seis dimensões?

A maioria dos sistemas complexos, têm muitos graus de liberdade, ou seja, precisa de muitas variáveis para descrevê-lo de modo que a fotografia do espaço de fase desse sistema complexo num dado instante pode ser um emaranhado confuso, impossível de se visualizar. Como tirar informações deste sistema? De modo geral, as órbitas de um sistema percorrem trilhas cada vez mais complicadas através de três dimensões ou mais, criando um traçado escuro no espaço de fase, com uma estrutura interna que não pode ser vista de fora. Para transformar essas meadas tridimensionais em imagens planas, usou-se primeiro a técnica da projeção, na qual um desenho representava uma sombra que um atrator projetaria na superfície. Com atratores estranhos e complicados, porém, a projeção apenas atenua os contornos, transformando-os numa confusão indecifrável. Uma técnica mais reveladora era fazer um **mapa de retorno** ou um **mapa de Poincaré**, tomando-se uma seção bidimensional da superfície de Poincaré.

Uma vantagem de se ver os estados como pontos nas seções de Poincaré é que isso torna mais fácil a observação da mudança. Um sistema cujas variáveis se modificam continuamente, torna-se um ponto móvel. Se algumas combinações de variáveis nunca ocorrem, então partes do espaço de fase são regiões proibidas. Se o sistema comporta-se periodicamente, voltando ao mesmo estado repetidamente, então o sistema passa pela mesma posição no espaço de fase repetidas vezes. Quando examinamos um retrato do espaço de fase, podemos imaginar que aquele "loop" ou curva fechada corresponde a tal periodicidade. Aquela torção corresponde àquela mudança. Aquele vazio corresponde àquela impossibilidade física.

Foi Poincaré quem revolucionou o estudo de equações diferenciais não-lineares, introduzindo a técnica qualitativa de geometria e topologia para discutir as propriedades *globais* das soluções destes sistemas. Para Poincaré, o entendimento global do comportamento, mesmo que grosseiro, de todas as soluções do sistema foram mais importantes que o comportamento local de soluções particulares, analiticamente precisas. O ponto de vista de Poincaré

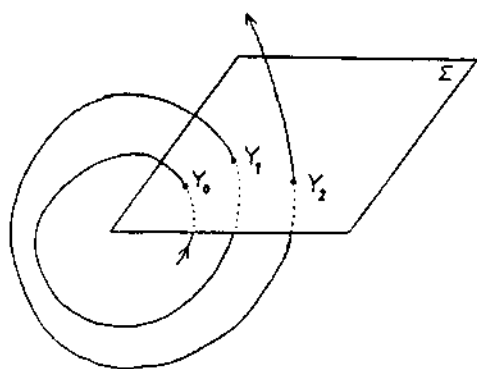


Figura 2.2: seção de superfície

foi entusiasticamente adotado por Birkhoff na primeira parte do século vinte. Birkhoff constatou a importância do estudo dos mapeadores e enfatizou a dinâmica discreta como meio de entender qualquer dinâmica complexa que pode surgir de alguma equação diferencial.

2.2.1 Propriedades

Visto que estamos interessados no comportamento assintótico de uma trajetória, pode ser suficiente mostrá-la de tempos em tempos, em vez de segui-la continuamente. Está é a idéia por trás do método de seção de superfície.

Para ilustrar, consideremos o caso $N = 3$. Escolhemos no correspondente espaço de fase, uma seção de superfície Σ , que pode ser uma superfície bidimensional ordinária; e consideramos as intersecções sucessivas $Y_0, Y_1, \dots$ da trajetória com Σ (fig 2.2). Uma vez que supomos a trajetória recorrente, haverá uma sequência infinita de tais pontos. A sequência pode também ser estendida para trás no tempo: $\dots, Y_{-2}, Y_{-1}, Y_0, \dots$

Esta sequência tem a propriedade fundamental que se um de seus pontos, Y_i é dado, então o próximo ponto Y_{i+1} pode ser deduzido. Tudo o que temos de fazer é seguir a trajetória de Y_i , integrando as equações diferenciais, até que intercepte Σ novamente: esta nova interseção é Y_{i+1} .

Temos, assim, o mapeador G de Σ que é chamado **mapa de Poincaré**.
Então:

$$Y_{i+1} = G(Y_i). \quad (2.5)$$

Em geral, temos:

$$Y_{i+j} = G^j(Y_i). \quad (2.6)$$

Uma vez que a trajetória pode ser integrada em ambas as direções no tempo, o mapeamento é inversível: G^{-1} existe, e

$$Y_{i-1} = G^{-1}(Y_i). \quad (2.7)$$

Podemos concluir que a eq. (2.6) vale para algum j , positivo ou negativo.

Para generalizarmos para uma ordem arbitrária N , escolhemos, no espaço de fase de N dimensões, um subespaço de dimensão $(N-1)$, Σ , o qual deveria ser propriamente chamado de **seção de espaço**, mas é na prática frequentemente referido como uma **seção de superfície** ou **seção de Poincaré**. Então, consideramos as intersecções sucessivas $\dots, Y_{-1}, Y_0, Y_1, \dots$ da trajetória com Σ . Chamaremos de $(M = N-1)$ a dimensão da seção de Poincaré e introduziremos neste espaço, um sistema de coordenadas $y_1, \dots, y_M$, e representaremos as coordenadas dos pontos Y_i por $y_{i,1}, \dots, y_{i,M}$. Então o mapeamento G pode ser escrito como:

$$\begin{aligned} y_{i+1,1} &= g_1(y_{i,1}, \dots, y_{i,M}) \\ &\vdots \\ y_{i+1,M} &= g_M(y_{i,1}, \dots, y_{i,M}) \end{aligned} \quad (2.8)$$

Quando consideramos o mapeamento, propriamente, será frequente adotar uma notação mais simples: dois pontos consecutivos Y_i e Y_{i+1} são representados por Y e Y' , e a eq.(2.8) torna-se

$$\begin{aligned} y'_1 &= g_1(y_1, \dots, y_M) \\ &\vdots \\ y'_M &= g_M(y_1, \dots, y_M). \end{aligned} \quad (2.9)$$

Agora vem o passo fundamental: decidimos considerar somente a sequência de pontos y_i de agora em diante, e esquecer o resto da trajetória, isto é, ignoramos o detalhe do que acontece entre duas intersecções. A sequência é considerada como sendo definida diretamente pelo mapeamento G , e não mais, pelo sistema de equações diferenciais, que também, será esquecido. As justificativas para fazer isto, são as seguintes:

1. A experiência mostra que as propriedades essenciais do sistema diferencial são refletidas em propriedades equivalente do mapeamento. Existe uma correspondência exata entre estes dois objetos. Exemplo: uma órbita periódica simples do sistema diferencial, fechando sobre si mesma após uma evolução, corresponde a um ponto fixo do mapeamento G ; a órbita periódica é estável se e somente se o ponto fixo é estável; e assim por diante.
2. O novo problema é muito mais simples: temos somente as equações ordinárias (2.9) para considerar, ao invés, das equações diferenciais (2.1). Também a dimensão do espaço relevante tem sido reduzido de uma unidade: um sistema dinâmico de ordem N dá um mapeador de $N - 1$ dimensões.
3. As propriedades essenciais do sistema, referentes a períodos longos, são mais claramente vistas, pois os detalhes irrelevantes da evolução em tempos curtos são eliminados.
4. A representação gráfica do resultado é mais fácil. Por exemplo, para $N = 3$, a seção de superfície tem duas dimensões e é mais facilmente representada num espaço tridimensional.

5. O tempo de computação não é melhorado pela introdução de uma seção de superfície. Se nosso problema é originalmente definido por uma série de equações diferenciais, e introduzimos a seção de superfície depois, então, em geral, não é possível obter equações explícitas para o mapeador G ; o único modo para computar a imagem de um ponto Y_i é voltar para as equações diferenciais e integrar a trajetória até que a próxima interseção apareça.

Quando estudamos o mapeamento, nos referimos a uma sequência de pontos Y_i como uma “trajetória”, ou “órbita”, pois esta sequência é equivalente a trajetória original no espaço de fase.

2.2.2 Pontos Fixos

Um ponto fixo é um ponto Y^* que satisfaz

$$Y^* = G(Y^*). \quad (2.10)$$

Temos um sistema de M equações ordinárias para M incógnitas, e assim, encontrar seus pontos fixos não representa um problema complicado, em princípio.

Os pontos fixos tem um importante papel em mapeamentos, pois eles forçam a estrutura definitiva das trajetórias na sua vizinhança. Para estudá-los, escrevemos:

$$Y = Y^* + U \quad (2.11)$$

onde U é tomado pequeno; substituindo na eq.(2.5) e desenvolvendo em séries obtemos:

$$U_{i+1} = (\partial G / \partial Y)_{Y=Y^*} \cdot U_i + \mathcal{O}(U_i^2) \quad (2.12)$$

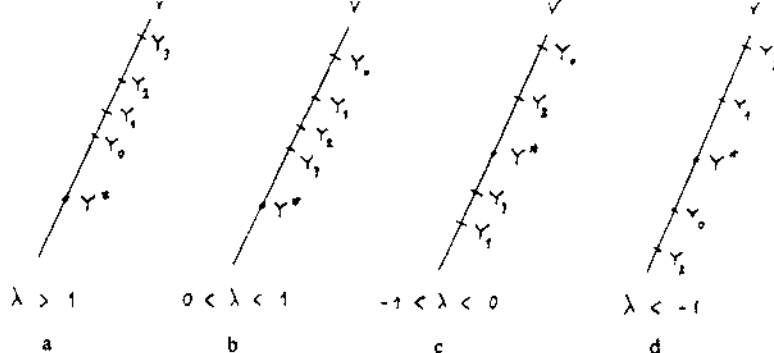


Figura 2.3: distribuição de pontos na proximidade do ponto fixo Y^* em consequência do valor de λ .

$\partial G / \partial Y$ é uma matriz $M \times M$, chamada *Jacobiano* do mapeamento linear para U , que pode ser analisado no modo padrão.

Vamos considerar o caso geral, onde a matriz tem M autovalores distintos. O que acontece quando iteramos o mapeador G , depende da natureza destes autovalores. Vamos considerar primeiro, um autovalor real λ , e um autovetor real associado V . Se escolhermos como deslocamento inicial do ponto fixo $U_0 = V$, então os sucessivos valores de U serão:

$$U_1 = \lambda V, \dots, U_j = \lambda^j V, \dots \quad (2.13)$$

Neste caso, a sequência de pontos permanece na linha reta que passa pelo ponto fixo. O arranjo destes pontos depende do valor λ ; há essencialmente quatro casos distintos, representados na fig2.3 (não considerando os casos particulares $\lambda = 0$, $\lambda = 1$ e $\lambda = -1$).

Pontos sucessivos movem-se para longe do ponto fixo Y^* se $|\lambda| > 1$ (casos a e d), e vão em direção a Y^* se $|\lambda| < 1$ (casos b e c). Eles permanecem no mesmo lado se $\lambda > 0$ (casos a e b), ou saltam regularmente de um lado para outro se $\lambda < 0$ (casos c e d).

Consideramos agora, o caso de um par de autovalores complexos conju-

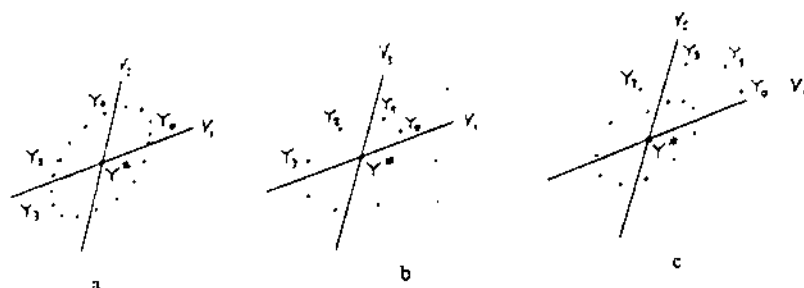


Figura 2.4: distribuição de pontos na proximidade do ponto fixo, Y^* , quando o autovalor λ é complexo.

gados (será conveniente escrevê-los como $\rho e^{\pm i\varphi}$, com ρ e φ reais) associados com um par de autovetores complexos conjugados $V_1 \pm V_2 i$, com V_1 e V_2 reais. Estamos interessados somente em pontos reais Y_j , de modo que consideramos um deslocamento inicial, $U_0 = aV_1 + bV_2$, com a e b reais, obtendo facilmente,

$$U_j = \rho^j [(aV_1 + bV_2) \cos j\varphi + (bV_1 - aV_2) \sin j\varphi]. \quad (2.14)$$

Vamos analisar primeiro, o caso $\rho = 1$, ou seja, os dois autovalores tem módulo um. O primeiro termo dentro dos parênteses da eq. (2.14) representa um movimento oscilatório ao longo da direção real $aV_1 + bV_2$. O segundo termo representa uma oscilação similar, mas 90° fora de fase, ao longo da outra direção real $bV_1 - aV_2$. A soma dos dois termos representa um movimento elíptico: a sequência de pontos Y_j permanece numa elipse no plano (V_1, V_2) , conforme a fig(2.4a).

Em todos estes casos (λ real ou complexo), a sequência de pontos Y_j move-se para longe do ponto fixo Y^* se $|\lambda| > 1$, e tende a Y^* se $|\lambda| < 1$.

Finalmente, uma trajetória que parte com um deslocamento inicial pode ser obtida, decompondo-se U_0 nas componentes ao longo dos autove-

tores, encontrando a evolução de cada componente e somando mais uma vez, visto que, estamos usando uma aproximação linear do mapeador.

2.2.3 Ciclos

Um **ciclo de período n** ou **n -ciclo**, é uma sequência de pontos $Y_0, \dots, Y_{n-1}$, tal que

$$Y_1 = G(Y_0), \dots, Y_{n-1} = G(Y_{n-2}), Y_0 = G(Y_{n-1}). \quad (2.15)$$

Ou seja, um n -ciclo é uma trajetória periódica, que volta ao mesmo ponto, após n iterações do mapeador. Cada ponto Y_j do ciclo satisfaz

$$Y_j = G^n(Y_j) \quad (2.16)$$

e portanto, é um ponto fixo do mapeador G^n .

Um ponto fixo de G é simplesmente um ciclo de período 1. Então, não há diferença fundamental entre pontos fixos e ciclos. Tudo o que foi mostrado na seção anterior é também aplicável a ciclos, simplesmente considerando G_n no lugar de G . Em particular, um ciclo é caracterizado por M autovalores, os quais determinam as propriedades das trajetórias vizinhas (pode ser mostrado que esses autovalores são os mesmos para todos os pontos do ciclo).

Vamos voltar para a vizinhança de um ponto fixo, considerado na aproximação linear. Nós consideramos a série de autovetores correspondentes aos autovalores com módulo menor que 1. Eles definem um **subespaço de contração**, ou **subespaço estável**, V^s . Se o deslocamento inicial, U_0 , de uma trajetória for em V^s , então a sequência de pontos Y_0 tende em direção ao ponto fixo Y^* para $j \rightarrow +\infty$. Similarmente, os autovetores correspondentes aos autovalores com módulo maior que 1 definem um **subespaço de expansão** ou **subespaço instável**, V^u , a sequência de pontos Y_j tende para o ponto fixo Y^* quando $j \rightarrow -\infty$. Se nos afastarmos do ponto fixo.

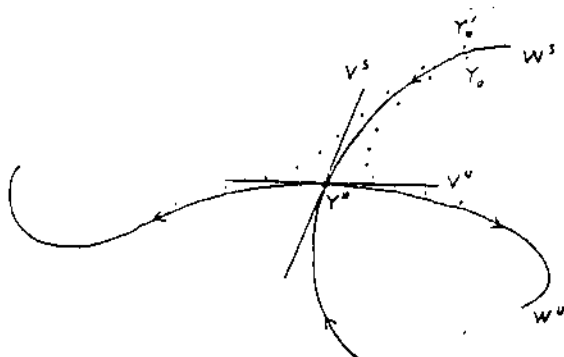


Figura 2.5: retrato de fase

abandonando a aproximação linear e considerando outra vez o mapeamento exato G , podemos estender esses conceitos como se segue:

— definimos uma **variedade invariante estável** W^s de um ponto fixo Y^* como a série de pontos Y_0 , tal que a trajetória passando por Y_0 tenda a Y^* para $j \rightarrow +\infty$; e similarmente, a **variedade invariante instável** W^u como a série de pontos Y_0 , tal que a trajetória passando por Y_0 tenda a Y^* para $j \rightarrow -\infty$. Na vizinhança de Y^* e na aproximação linear, W^s e W^u são usualmente, V^s e V^u , respectivamente.

Estas variedades invariantes também tem um papel importante na determinação das propriedades gerais das trajetórias. Para visualizar melhor, vamos considerar o caso $M = 2$, e um ponto fixo com dois autovalores, um maior que 1 e o outro menor que 1 em módulo. V^s e V^u ambos são linhas retas (2.5); W^s e W^u são curvas tangentes a V^s e V^u em Y^* . Estas curvas podem ser facilmente computadas na prática: por exemplo, W^u é determinado tomando-se os pontos sobre V^u e bem próximos de Y^* , e computando as trajetórias as quais se originam destes pontos. W^s é determinado do mesmo modo tomando-se pontos iniciais sobre V^s e iterando-os para trás, ou seja, usando G^{-1} em vez de G .

Considere agora um ponto Y_0 próximo a W^s . A sequência de pontos emanando de Y_0 move-se primeiro em direção a Y^* e W^s , e então afasta-se de Y^* ao longo do ramo de W^u fig.(2.5). Se deslocamos levemente o ponto

inicial para Y_0' no outro lado da curva W^s , o outro ramo de W^u é seguido. Então, o futuro da trajetória será completamente diferente quando o ponto inicial está num ou no outro lado de W^s . Similarmente, os pontos que estão em um ou outro lado de W^u tem trajetórias com passados completamente diferentes. Por esta razão, estas curvas são chamadas **separatrizes**.

A figura obtida representando-se os pontos fixos mais importantes, as variedades estáveis e instáveis e os ciclos é chamada *retrato de fase* de um sistema dinâmico.

2.3 Sistemas Hamiltonianos

Sistemas Hamiltonianos são um caso particular de sistemas dinâmicos, porém muito importante, uma vez que faz parte da maioria das aplicações em Física. Também suas propriedades são muito diferentes do caso geral, não-Hamiltoniano.

2.3.1 Propriedades

Um sistema Hamiltoniano é caracterizado por um número par de dimensões:

$$N = 2n \quad (2.17)$$

O número n é tradicionalmente chamado **o número de graus de liberdade**; que não pode ser confundido com N , a dimensão do espaço de fase. As $2n$ variáveis são também tradicionalmente chamadas

$$q_1, \dots, q_n \quad p_1, \dots, p_n. \quad (2.18)$$

O sistema é completamente definido por uma função de $2n$ variáveis (ao invés de N funções no caso geral), chamada **Hamiltoniana**:

$$H(q_1, \dots, p_n) \quad (2.19)$$

e as equações diferenciais básicas para as variáveis são as equações de Hamilton:

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (i = 1, \dots, n). \quad (2.20)$$

q_i e p_i são chamadas **variáveis conjugadas**.

Uma integral é imediatamente calculada: a Hamiltoniana propriamente. Pode-se verificar da eq.(2.20) que H é uma constante sobre a trajetória. Portanto a ordem do sistema pode ser reduzida a $(2n - 1)$. Se agora introduzirmos uma seção de superfície, o problema é reduzido ao estudo de um mapeamento em um espaço com $2n - 2$ dimensões. Um bom método para fazer estas reduções é usar primeiro a integral H para eliminar uma variável, por exemplo p_i , e então definir a seção de superfície, pela equação $q_i = 0$, onde q_i é a variável conjugada a p_i . Neste método, um par de variáveis conjugadas é eliminado, e os $n - 1$ pares deixados servem como coordenadas naturais na seção de superfície. O mapeador G obtido deste modo é **simplético**; isto significa que seu Jacobiano $\partial G / \partial Y$ satisfaz identicamente a relação

$$\left(\frac{\partial \tilde{G}}{\partial Y} \right)^J \left(\frac{\partial G}{\partial Y} \right) = J \quad (2.21)$$

onde o tilde representa a matriz transposta, e J é definido por

$$J = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

onde I é a matriz unitária $(n - 1) \times (n - 1)$. Uma consequência particular da eq.(2.21) é

$$\left| \frac{\partial G}{\partial Y} \right| = 1, \quad (2.23)$$

o que indica que o mapeamento G preserva o volume.

Convém ressaltar que para n graus de liberdade, a seção de superfície tem $2n - 1$ dimensões. Para $n = 2$ esta seção será, portanto, tridimensional. As figuras que frequentemente vemos nos livros e artigos mostram a projeção da seção de superfície ou seção de Poincaré em um ou outro plano, ou seja, xp_x , yp_y ; estas projeções são usualmente chamadas de seção de Poincaré, nome que adotaremos daqui para frente.

2.3.2 Órbitas Periódicas e sua estabilidade

Uma órbita periódica do sistema Hamiltoniano corresponde a um ponto fixo ou um ciclo na seção de Poincaré; consideramos o caso de um ponto fixo Y^* por simplicidade. O ponto fixo é caracterizado por $M = 2n - 2$ autovalores. Pode ser mostrado como outra consequência da propriedade simplética, que estes autovalores não são arbitrários, mas podem ser agrupados em quádruplas λ , λ^{-1} , λ^* , λ^{*-1} .

Vamos explorar as consequências desta propriedade para o importante caso de dois graus de liberdade. Nesse caso, como só há dois graus temos ou λ e λ^{-1} para λ real ou λ e λ^* para λ complexo, ou seja, $\lambda = e^{i\varphi}$. Para $n = 2$, temos $N = 2n = 4$, e $M = 2n - 2 = 2$. A seção de Poincaré é uma superfície bidimensional. Um ponto fixo tem um único par de autovalores, inverso de cada outro; portanto a equação de autovalores

$$\left| \frac{\partial G}{\partial Y} - \lambda I \right| = 0 \quad (2.24)$$

pode ser escrita na forma

$$\lambda^2 - 2a\lambda + 1 = 0. \quad (2.25)$$

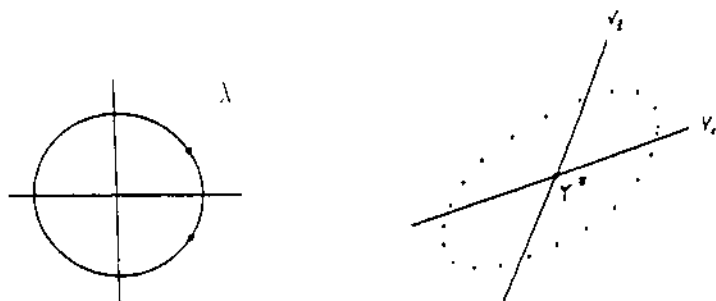


Figura 2.6: À esquerda temos uma representação geométrica para os autovalores da matriz monodromia, quando estes são complexos e permanecem num círculo unitário e à direita a distribuição de pontos na proximidade do ponto fixo Y^* para estes autovalores.

a é um número real, chamado índice de estabilidade. O valor deste número singular caracteriza completamente as propriedades das trajetórias vizinhas. Os dois autovalores são:

$$\lambda = a \pm (a^2 - 1)^{1/2} \quad (2.26)$$

e portanto três casos podem ser distinguidos:

(1) $-1 < a < 1$: os dois autovalores são complexos conjugados, e permanecem no círculo unitário, conforme a figura (2.6). A sequência de pontos de uma trajetória vizinha permanece numa elipse. O ponto fixo é chamado **elíptico** ou **linearmente estável**; isto significa que na aproximação linear, uma trajetória partindo próxima do ponto fixo permanecerá próxima do ponto fixo. É importante notar que estabilidade linear não implica que o ponto fixo é estável quando o mapeador exato é considerado; este é um problema muito mais difícil que trataremos no próximo capítulo.

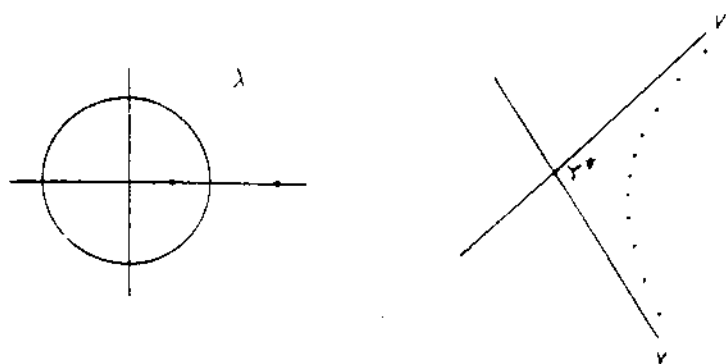


Figura 2.7: À esquerda temos a representação geométrica dos autovalores da matriz monodromia. Nesse caso, os dois são reais, sendo um deles maior que um e o outro, consequentemente menor que um , mas ambos positivos. À direita, temos a distribuição de pontos na proximidade do ponto fixo, Y^* , para os correspondentes autovalores.

(2) $a > 1$: os dois autovalores são reais e positivos, um sendo menor que um e o outro maior que um . Pontos de uma trajetória vizinha permanecem num ramo de hipérbole, conforme ilustra a figura (2.7); V e V' são os autovetores. O ponto fixo é chamado **hiperbólico** ou **linearmente instável**, uma vez que as trajetórias vizinhas tendem para longe dele.

(3) $a < 1$: este caso é muito similar ao anterior. Os dois autovalores são reais e negativos. Pontos de uma trajetória vizinha permanecem em ambos os ramos de uma hipérbole, conforme a figura (2.8). O ponto fixo é chamado **hiperbólico inverso**, ou **linearmente instável inverso**.

Entre os casos elípticos e hiperbólicos há os **pontos fixos parabólicos**, caso não-genérico que forma um conjunto de medida nula, infinitamente improvável, onde $\lambda_1 = \lambda_2 = \pm 1$. Neste caso, as curvas invariantes são linhas retas, conforme a figura (2.9). Na linguagem da mecânica dos fluidos, o caso parabólico corresponde a um fluxo reto (laminar), o caso elíptico a um fluxo com vorticidade, denominado ponto de estagnação (o caso limite sendo um centro de rotação pura), e o caso hiperbólico a uma corrente denominada

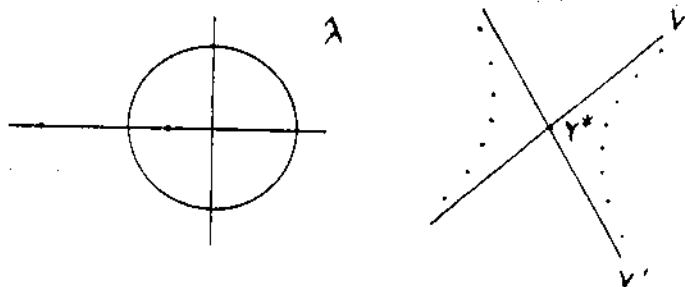


Figura 2.8: À esquerda temos a representação geométrica dos autovalores da matriz monodromia. Nesse caso, os dois são reais, sendo um deles maior que um em módulo, e o outro, consequentemente menor que um em módulo e ambos negativos. À direita, temos a distribuição de pontos na proximidade do ponto fixo, Y^* , para os correspondentes autovalores.

fluxo (o caso limite sendo um fluxo laminar). No caso parabólico, pode haver uma “linha” de pontos fixos, $p = 0$, conforme ilustra a figura (2.9).

Uma análise similar pode ser feita para n -ciclos, simplesmente, considerando G^n no lugar de G , e o n -ciclo também será chamado elíptico ou hiperbólico de acordo com o caso.

2.4 Sistemas integráveis e ergódicos

2.4.1 Sistemas integráveis

Podemos simplificar um sistema Hamiltoniano, por uma mudança apropriada de variáveis. Se as novas variáveis $Q_1, \dots, Q_n, P_1, \dots, P_n$ são tais que as equações de movimento podem novamente ser deduzidas de uma função Hamiltoniana $H(Q_1, \dots, P_n)$, então a mudança de variáveis é chamada **transformação canônica**.

A nova forma será mais simples, em particular, se uma ou mais das

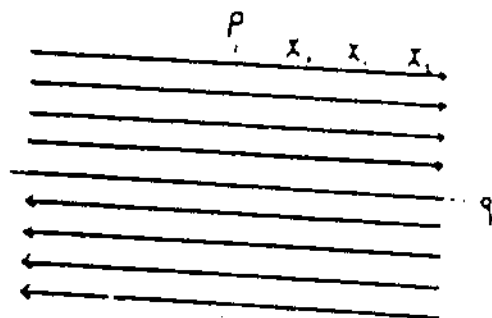


Figura 2.9: Caso degenerado em que ambos os autovalores tem módulo um, chamado caso parabólico.

novas variáveis não aparece na expressão de H . Suponha por exemplo, que H não dependa de Q_n . Então:

$$\frac{dP_n}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial Q_n} = 0 \quad (2.27)$$

e portanto,

$$P_n(t) = P_n(0) = \text{constante}. \quad (2.28)$$

Este valor constante, pode ser considerado como um parâmetro. Para um dado valor deste parâmetro, a nova Hamiltoniana só depende de $(2n - 2)$ variáveis, formando $(n - 1)$ pares de variáveis conjugadas. O número de graus de liberdade foi diminuído de uma unidade, e a ordem do sistema de duas unidades. O caso ideal, acontece quando podemos encontrar uma transformação canônica, tal que a nova Hamiltoniana não dependa de nenhum Q_i , ou seja, tenha a forma $H(P_1, \dots, P_n)$. Temos dessa forma:

$$P_i(t) = \text{constante} = C_i \quad (i = 1, n), \quad (2.29)$$

e

$$dQ_i/dt = \partial H / \partial P_i. \quad (2.30)$$

O elemento do lado direito da equação (2.30) é uma função dos P_i 's, isto é, dos C_i 's. Escreveremos esta função como $\omega(C_1, \dots, C_n)$. Os ω_i 's são chamados de **frequências**. Se escrevermos também $Q_i(0) = D_i$, para os valores iniciais, a equação (2.30) é imediatamente integrada, dando:

$$Q_i(t) = \omega_i t + D_i. \quad (2.31)$$

Se o espaço de fase for limitado, os Q_i 's devem ser variáveis do tipo ângulo e dessa forma o movimento se dá num toro T^n . Uma escolha conveniente é $Q =$ ângulo nas direções dos caminhos C_i do toro e $P = \frac{1}{2\pi} \oint_{C_i} p dq$ ao longo do caminho C_i e assim, (P, Q) são variáveis de ação-ângulo. Temos então, a solução geral de forma explícita, dada pelas equações (2.29) e (2.31); os C_i 's e os D_i 's são as $2n$ constantes de integração. Por esta razão, um sistema Hamiltoniano que pode ser reduzido a sua forma normal é chamado **sistema integrável**. As ações $P_1, \dots, P_n$ são integrais do sistema, dado que seu valor é constante sobre uma trajetória. Consequentemente, se n integrais são conhecidas em um sistema Hamiltoniano é possível, em geral, encontrar uma transformação canônica, de modo que, os novos P_i são iguais a estas integrais. Então a nova Hamiltoniana dependerá somente de $P_1, \dots, P_n$, e a solução geral pode ser escrita explicitamente. Portanto, um sistema Hamiltoniano pode ser resolvido completamente, se e somente se $n = N/2$ integrais são conhecidas; o que representa um contraste ao caso geral, o sistema dinâmico descrito pela equação (2.1), onde é necessário conhecer N integrais, e é mais uma vez decorrente da particular estrutura dos sistemas Hamiltonianos.

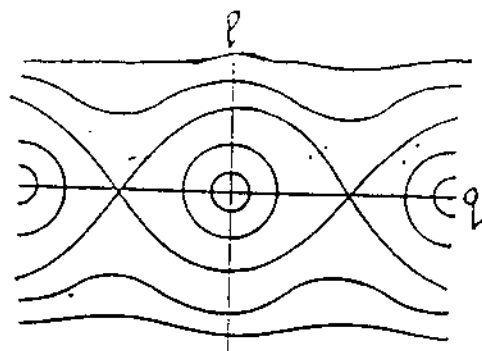


Figura 2.10: espaço de fase do pêndulo, onde podemos ver tres regiões distintas. Na região central, vemos círculos que correspondem à oscilações, vemos em seguida a separatriz, que corresponde a rotação direta, e as curvas abertas que correspondem à rotação retrógrada.

É frequente, o caso onde primeiro devemos dividir o espaço de fase em um número de regiões, e então usar uma transformação canônica diferente, levando às diferentes variáveis de ângulo-ação, em cada região. Por exemplo, para o pêndulo simples, três regiões do espaço de fase devem ser distinguidas, correspondendo respectivamente à oscilação, rotação direta e rotação retrógrada, conforme ilustra a figura (2.10).

2.4.2 Toros e trajetórias

Começamos com uma tabela instrutiva, que certamente será muito útil no decorrer desta seção.

Números de graus de liberdade	1	2	3	n
Dimensionalidade do espaço de fase	2	4	6	$2n$
Dimensionalidade da superfície de energia E	1	3	5	$2n-1$
Dimensionalidade do toro(manifold) M	1	2	3	n

Consideramos primeiro, o caso $n = 1$. Uma trajetória é representada por um segmento de comprimento 2π no eixo Q_1 , conforme a figura (2.11a). Os

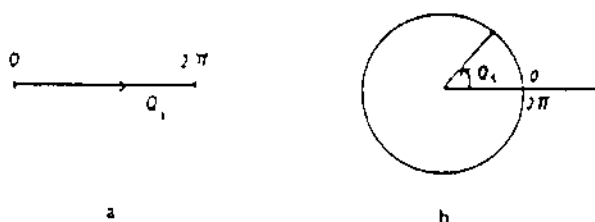


Figura 2.11: representação geométrica para um grau de liberdade: a) trajetória é representada por um segmento de reta de comprimento 2π , no eixo Q_1 , b) trajetória representada no círculo, sendo Q_1 a coordenada angular.

pontos representativos movem-se uniformemente para a direita, com uma velocidade ω_1 (assumida positiva), e quando ele chega ao ponto $Q_1 = 2\pi$, volta para $Q_1 = 0$. Esta descontinuidade, pode ser evitada representando-se a trajetória como um círculo, com Q_1 como coordenada angular do ponto representativo (figura (2.11b)).

Consideremos agora o caso $n = 2$. No plano (Q_1, Q_2) , o movimento toma lugar dentro de um quadrado com lados de comprimento 2π , conforme a figura (2.12a). O ponto se move com uma velocidade constante, cujas componentes são (ω_1, ω_2) ; quando ele “bate” em um dos lados do quadrado, ele reaparece no lado oposto. Aqui mais uma vez, estas descontinuidades podem ser evitadas ao “colar” o lado esquerdo do quadrado ao seu lado direito, e então, o lado inferior ao lado superior. A superfície assim obtida é um **toro** ordinário (figura (2.12b)). As coordenadas Q_1 e Q_2 são as coordenadas angulares que especificam a posição de um ponto no toro, nesse caso.

Mais geralmente, para n graus de liberdade, o movimento pode ser descrito num hipercubo de n dimensões, no espaço $(Q_1, \dots, Q_n)$, com descontinuidades nos lados ou ocupando um toro de dimensão n , n -toro, com os Q_i 's como coordenadas angulares e sem descontinuidades no movimento. Ambas as representações são úteis.

Para $n = 1$, a trajetória simplesmente coincide com o 1-toro que é

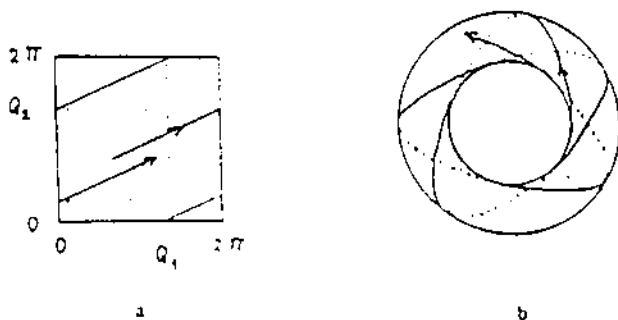


Figura 2.12: representação geométrica para dois graus de liberdade: a) o movimento se dá dentro de um quadrado de lados com comprimento 2π , b) trajetória representada no toro ordinário, sendo Q_1 e Q_2 as coordenadas angulares.

um círculo. Para $n = 2$, as coisas não são tão simples. Se a razão ω_1/ω_2 é racional, então após algum tempo, a trajetória volta sobre si mesma: ela é periódica (este caso é chamado **ressonante**). Se ω_1/ω_2 é irracional (o caso geral), a trajetória nunca se fecha; e pode se mostrar que ela ocupa densamente o quadrado, figura (2.12a), ou o 2-toro, figura (2.12b). Está é a chamada **trajetória quase-periódica**. Mais geralmente para n graus de liberdade, se os ω_i 's são mutuamente incomensuráveis, ou seja, não existe a relação de comensurabilidade

$$K_1\omega_1 + \cdots + K_n\omega_n = 0 \quad (2.32)$$

com os K_i 's inteiros e não todos nulos, a trajetória é densa no n -toro; este é o caso geral. Se existir p relações de comensurabilidade independentes, então a trajetória ocupa somente um subspaço de $(n - p)$ dimensões no n -toro.

2.4.3 Seção de Superfície

Como fazer estas propriedades aparecerem ao fazermos uma seção de superfície? Será conveniente definir a seção de superfície simplesmente por:

$Q_n = 0 \pmod{2\pi}$. Dessa forma, a interseção do n -toro, que abriga uma trajetória, com a seção de superfície é simplesmente um $(n-1)$ -toro, descrito pelas coordenadas $Q_1, \dots, Q_{n-1}$, portanto, a sequência de pontos que representa uma trajetória na seção, permanece num $(n-1)$ -toro. A variação uniforme de Q_n com o tempo é dada pela equação (2.31). Chamamos Y_0 o ponto de uma sequência correspondente a $Q_n = 2\pi$ (assumimos $\omega_n > 0$). Mais geralmente, o ponto Y_k corresponde a $Q_n = 2k\pi$, e para um tempo

$$t = \frac{2k\pi}{\omega_n} - \frac{D_n}{\omega_n}. \quad (2.33)$$

Usando ainda a equação (2.31), encontramos que as outras coordenadas de Y_k são dadas por

$$Q_{k,i} = \left(D_i - \frac{\omega_i}{\omega_n} D_n \right) + 2\pi \frac{\omega_i}{\omega_n} k. \quad (2.34)$$

O primeiro termo é uma constante. O segundo termo mostra que, os sucessivos valores $Q_{k,i}$ das coordenadas Q_i são igualmente espaçados. Se representarmos Q_i num círculo, conforme a figura (2.13), os sucessivos pontos são separados por ângulos iguais. Então, para Q_i considerado isolado, o mapeador consiste em uma rotação simples de ângulo $2\pi\omega_i/\omega_n$ (em radianos).

Introduzimos agora a quantidade:

$$\nu_i = \omega_i/\omega_n. \quad (2.35)$$

denominada **número de rotação** para a coordenada Q_i . ν_i tem um papel muito importante, pois pode ser interpretado como o ângulo entre pontos sucessivos na figura (2.13), medido em rotação em vez de radianos.

Se ω_i e ω_n não são comensuráveis, o número de rotação é irracional e a sequência de pontos cobre o círculo da figura (2.13), densamente. Mais geralmente, se não há relação de comensurabilidade entre os ω_i 's, então a

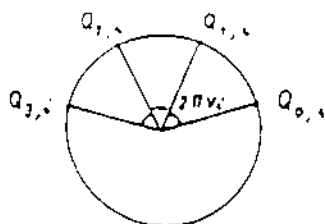


Figura 2.13: distribuição dos pontos Q_i num círculo, mostrando que pontos sucessivos estão separados por ângulos iguais.

sequência de pontos é densa no $(n-1)$ -toro. Se há p relações de comensurabilidade, o ponto ocupa somente um subespaço de $(n-p-1)$ dimensões.

A fim de ilustrar, claramente, o que significa o número de rotação, consideremos mais uma vez o caso $n=2$ e a representação da trajetória no plano (Q_1, Q_2) , conforme a figura (2.14). A seção é definida por $Q_2=0$, e corresponde portanto, ao lado inferior do quadrado. O número de rotação ν_1 é essencialmente a distância entre dois pontos consecutivos (a menos do fator 2π) de interseção da trajetória com o lado inferior.

2.4.4 Sistemas super-integráveis

Uma trajetória de um sistema integrável permanece no n -toro. Esse toro é caracterizado por n valores constantes $C_1, \dots, C_n$ das coordenadas P_i 's (conforme a equação (2.29)). As n frequências $\omega_1, \dots, \omega_n$ são, em geral, funções dos C_i 's; elas mudam suavemente e independentemente, quando uma ou mais das C_i 's são variadas. Portanto, os n -toro, para os quais existe uma relação de comensurabilidade, entre os ω_i 's, formam uma série de medida nula. (Para $n=2$, por exemplo, eles correspondem aos valores racionais de ω_1/ω_2). Assim em geral, as trajetórias ocupam o n -toro densamente. Uma consequência disso, é que nenhuma outra integral existe além dos C_i 's. Apesar disso, existem os sistemas super-integráveis, para os quais uma ou

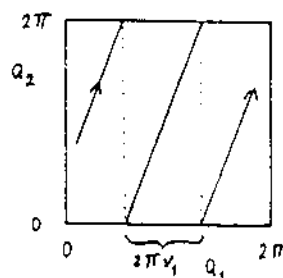


Figura 2.14: representação da trajetória no plano (Q_1, Q_2) , mostrando que o número de rotação ν_1 é essencialmente a distancia entre pontos dois pontos consecutivos.

mais relações de comensurabilidade são identicamente satisfeitas, ou seja, mantêm-se válidas quaisquer os valores dos C_i 's. Temos dessa forma, integrais adicionais (que são as relações de comensurabilidade propriamente) e então, cada trajetória fica restrita a um subspaço de dimensão menor que n .

Para ilustrar, consideremos o movimento de uma partícula no plano (x, y) , sob o efeito de um campo central. Este sistema Hamiltoniano com dois graus de liberdade é integrável, pois conhecemos duas integrais, a energia total e o momento angular. As duas frequências ω_1 e ω_2 podem ser interpretadas como a frequência de oscilação radial e a velocidade angular média em torno da origem. Se consideramos uma força arbitrária, não teremos a integral além da energia total; as frequências ω_1 e ω_2 não serão relacionadas. As trajetórias serão quase-periódicas e conseqüentemente, irão ocupar toda a superfície do 2-toro, no espaço de fase de quatro dimensões. A projeção de uma trajetória no plano (x, y) , pode ser representada conforme a figura (2.15a). Mas no caso particular da força proporcional ao inverso do quadrado da distância, o sistema torna-se super-integrável. Há uma integral adicional (a direção do pericentro). As frequências ω_1 e ω_2 são sempre iguais. Portanto, cada trajetória é simplesmente uma curva fechada, conforme a figura (2.15b), [14].

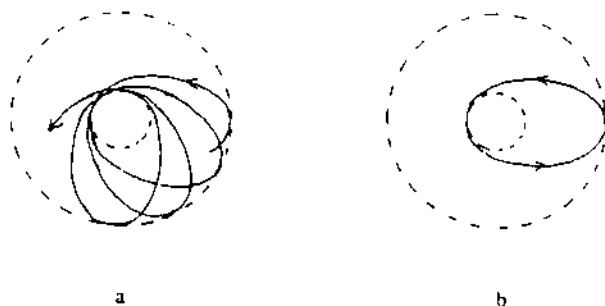


Figura 2.15: representação da trajetória no 2-toro. Em a) a caso onde a relação entre as frequências ω_1/ω_2 não é comensurável e b) caso onde a relação ω_1/ω_2 é comensurável.

Dado um sistema, geralmente não é possível escrever sua Hamiltoniana apenas em termos das variáveis P . Os sistemas Hamiltonianos são, em geral, não-integráveis. Apesar disso, o estudo de sistemas integráveis é de grande interesse, pois o bom conhecimento do caso integrável ajudará o entendimento do caso mais geral, não-integrável.

2.4.5 Sistemas ergódicos

Em um sistema Hamiltoniano, uma dada trajetória é restrita no espaço de fase a um subspaço $H = \text{constante}$, pois H é uma integral. (Este subspaço é frequentemente chamado de **superfície de energia**, pois em muitos casos, H pode ser fisicamente interpretado como a energia total do sistema). Grosseiramente falando, um sistema será **ergódico** se quase todas trajetórias (exceto uma série de medida nula) ocupa densamente sua superfície de energia. Correspondentemente, cada sequência de pontos na seção de Poincaré (exceto para uma série de medida nula) ocupa densamente a seção de Poincaré. Sistemas ergódicos constituem um caso especial entre os sistemas Hamiltonianos [15] e precisamente por causa disto, é possível avançar na teoria, isto é, o conhecimento das propriedades do caso ergódico ajuda o entendimento do caso geral. A hipótese ergódica pode ser expressa da seguinte maneira: *No decorrer do tempo, o sistema explora toda a região*

do espaço de fase que é energeticamente disponível para ele (a superfície de energia), e eventualmente cobre esta região uniformemente. Médias temporais podem, dessa forma, ser representados por médias sobre a superfície de energia no espaço de fase, hipótese essa que fundamenta a Física Estatística. Nem todos os sistemas exploram toda a superfície de energia permitida. No caso padrão integrável, (o problema de Kepler, osciladores harmônicos de n dimensões, etc.), exploram frações infinitesimais da superfície de energia. Tem se mostrado que sistemas consistindo de duas ou mais esferas sólidas interagindo é ergódico. Apesar destes resultados parecerem insuficientes para justificar a hipótese ergódica, da Mecânica Estatística, descobriu-se um vasto domínio de comportamento “estocástico” entre os extremos da integrabilidade e da ergodicidade, o que permitiu obter algum entendimento de como sistemas determinísticos podem exibir movimento que em algum aspecto é tão randômico quanto o lançamento de uma moeda. A este aspecto aleatório deu-se o nome de “chaos”, e caos será o assunto do nosso próximo capítulo.

Capítulo 3

Caos Clássico

Em 1963, E. N. Lorenz publicou suas observações numéricas de um modelo simples de convecção térmica, um modelo que agora tem o seu nome. Ele descobriu que em seu sistema completamente determinístico de três equações diferenciais ordinárias, todas as soluções eram limitadas, mas instáveis, ou seja, elas sofrem flutuações irregulares sem nenhum elemento de aleatoriedade introduzido de fora. Em 1971, D. Ruelle e F. Takens criaram o termo “atrator estranho” para sistemas dinâmicos dissipativos, apesar de não estarem cientes do modelo de Lorenz como o primeiro exemplo tendo atratores estranhos. Depois, eles sugeriram um novo mecanismo para o “ataque” da turbulência. Li e Yorke parecem ser os primeiros a introduzir a palavra *chaos* na literatura matemática, para denotar a aparente aleatoriedade de alguns mapeadores. Em um “review” publicado em 1976, R. May chamou a atenção para a dinâmica muito complicada, incluindo duplicação de período e caos, em alguns modelos simples de crescimento de população. Depois, vem a descoberta de Feigenbaum das propriedades de escala e constantes universais em mapeadores unidimensionais e consequentemente, a introdução da teoria de grupo de renormalização neste campo, por ele. Contudo, teria sido outro, o curso de eventos que levou ao domínio do caos, a saber, o estudo de sistemas Hamiltonianos não-integráveis em mecânica clássica. No final do último século, o desenvolvimento da mecânica celeste e o advento da mecânica estatística colocou sérios problemas para a dinâmica clássica. Dado o sucesso da relatividade e da teoria quântica e

também o rápido progresso da tecnologia moderna que absorveu a atenção da maioria dos físicos, estes problemas difíceis foram deixados para os matemáticos estudarem, calmamente, por mais de meio século. Seus esforços cristalizaram-se na formulação do assim chamado **teorema de KAM**. Estudos numéricos do que acontece a um sistema integrável quando perturbado, interpretado a luz do teorema de KAM revelaram uma abundância de movimento randômico em sistemas não-integráveis.

O fenômeno relacionado a ocorrência de aleatoriedade e imprevisibilidade em sistemas completamente determinísticos tem sido chamado de “estocasticidade intrínseca”, “caos determinístico”, etc. De fato, há dois tipos de classes distintas de equações determinísticas, e pelo menos dois níveis diferentes de estocasticidade em física. No nível “microscópico” fundamental, temos as leis da dinâmica representadas pelas equações de Newton na mecânica clássica. Na ausência de forças externas dependentes do tempo, elas descrevem transferências reversíveis de sistemas conservativos. A estocasticidade e a necessidade de uma descrição estatística ocorrem, espontaneamente, quando o sistema se torna suficientemente complicado? Este é o velho problema da relação entre mecânica clássica e mecânica estatística. Nas mãos dos matemáticos, a teoria de sistemas dinâmicos, como parte da teoria ergódica, e a teoria qualitativa das equações diferenciais, tiveram progresso significativo no entendimento deste problema. Por outro lado, há muitas equações macroscópicas em física. O primeiro exemplo, são as equações de Navier-Stokes que descrevem o campo de velocidades $\vec{V}$ de um fluido:

$$\frac{\partial \vec{V}}{\partial t} + (\vec{V} \nabla) \vec{V} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \vec{V},$$

onde p , ρ e ν denotam respectivamente pressão, viscosidade e densidade. Para um outro exemplo, podemos tomar as equações de reação-difusão, que descrevem reações químicas em um meio homogêneo:

$$\frac{\partial x_i}{\partial t} = f_i(x_1, \dots, x_n) + D_i \nabla^2 x_i \quad i = 1, \dots, n$$

onde a reação cinética é representada por funções f_i e a difusão, causada pela não-homogeneidade espacial é descrita pelo segundo termo, D_i sendo, a constante de difusão na i -ésima componente x_i . Estas equações de evolução não-lineares (devido ao termo $(\vec{V} \cdot \nabla) \vec{V}$ ou as funções f_i 's) e dissipativas (devido ao ν ou os termos D_i 's) são irreversíveis na natureza. Apesar de podermos deduzí-las, em princípio, da dinâmica microscópica, fazendo-se hipóteses estatísticas em certas passagens, as equações propriamente, com apropriadas condições de contorno, são determinísticas. É um fato experimental básico que, sob certas condições, um fluido ou um sistema interagindo, pode sofrer transições para estados onde o movimento é cada vez mais errático, e assim sendo, necessita de uma descrição estatística.

Para concluir esta introdução, enfatizamos que caos não é para ser relacionado simplesmente com desordem. É mais apropriado considerar caos como um tipo de ordem sem periodicidade. Geralmente, dentro de regimes caóticos, podemos descobrir padrões de movimento ordenado entrelaçado com caos em escalas muito menores. Em vez da usual periodicidade espacial ou temporal, aparece algum tipo de escala invariante, que abre a possibilidade para considerações da teoria de grupo de renormalização, nos estudos de transições caóticas.

3.1 O teorema de KAM

Este teorema tem um papel central na teoria de sistemas Hamiltonianos e explica muitos dos fatos que observaremos no capítulo 5. Seu nome deriva de Kolmogorov-Arnold-Moser; o método de prova foi sugerido por Kolmogorov (1954) e a prova foi feita por Arnold (1963) e Moser (1962). Estas duas provas diferem em alguns detalhes.

—A formulação de Moser.

Vamos considerar um mapeador plano, correspondente a um sistema integrável, dado nas coordenadas P, Q :

$$P' = P \quad (3.1)$$

$$Q' = Q + 2\pi\nu(P). \quad (3.2)$$

Por razões técnicas, supomos que o mapeador seja definido somente num anel: $a \leq P \leq b$, com a e b constantes positivas. Neste intervalo, o número de rotação ν é assumido uma função, monotonicamente crescente de P . Temos assim, um simples mapeador de rotação. Agora, o perturbamos adicionando dois pequenos termos:

$$P' = P + f_1(P, Q) \quad (3.3)$$

$$Q' = Q + 2\pi\nu(P) + f_2(P, Q). \quad (3.4)$$

f_1 e f_2 devem ser funções periódicas de Q , com período 2π . Elas são assumidas pequenas e também, diferenciáveis um número suficiente de vezes. Ainda mais, a equação (3.4) deve ter a propriedade de preservar área. A questão interessante é: a curva invariante da equação (3.2), ainda existe na equação (3.4), de forma levemente perturbada? Essa questão, assim formulada, é muito vaga e não pode ser respondida com sim ou não; temos que ser mais específicos. Vamos lembrar que a propriedade essencial que caracteriza uma curva invariante é o número de rotação, e dessa forma, o modo correto de se fazer esta pergunta é: dada uma particular curva invariante da equação (3.2), com número de rotação ν , existe na equação (3.4), uma curva invariante, com uma forma levemente diferente, e em quais pontos sucessivos ela se ajusta de acordo com o número de rotação ν ?

O teorema de Moser responde parcialmente esta questão, dando uma condição suficiente para a existência da curva invariante perturbada. A condição é que ν deve estar "suficientemente longe de todos os valores racionais". Isto significa que ν deve satisfazer a desigualdade

$$\left| \nu - \frac{r}{s} \right| > \varepsilon s^{-5/2} \quad (3.5)$$

para todos os r/s racionais. ε é um valor constante pequeno, que depende da amplitude dos termos de perturbação f_1 e f_2 .

A condição (3.5) exclui um intervalo finito nas proximidades de cada racional, e intuitivamente poderíamos pensar que ela exclui, dessa forma, quase todos os números. Surpreendentemente, este não é o caso: ao contrário, a maioria dos valores de ν não são excluídos! Para mostrar isto, notamos, primeiramente, que ν é definido com módulo um , de modo que, é suficiente considerar o intervalo $[0, 1]$. Para um dado s , os possíveis valores de r vão de 0 a $(s - 1)$, e a soma de todos os intervalos excluídos pela equação (3.5) é $\varepsilon s^{-3/2}$. Resta então, somente a soma sobre os s . Ao fazê-la, superestimamos a medida L dos valores excluídos, pois muitos intervalos serão contados mais de uma vez. Portanto, temos:

$$L < \sum_{j=1}^{\infty} 2\varepsilon j^{-3/2} \cong 5.224\varepsilon. \quad (3.6)$$

Assim, para uma pequena perturbação ou equivalentemente, um pequeno ε , a maioria dos valores de ν satisfazem a equação (3.5); ou seja, o teorema de Moser estabelece que a maioria das curvas invariantes serão preservadas sob uma pequena perturbação.

—A formulação de Arnold.

O teorema de Arnold apresenta algumas diferenças:

- ele se refere a um sistema dinâmico definido por uma Hamiltoniana;
- ele se aplica a qualquer número de graus de liberdade, enquanto que o teorema de Moser corresponde somente ao caso de dois graus de liberdade;
- em contrapartida, ele supõe que a Hamiltoniana é analítica, enquanto que o teorema de Moser assume que o mapeador é diferenciável um número finito de vezes.

Na essência, porém, o teorema de Arnold é inteiramente similar ao de Moser. Consideramos inicialmente, um sistema Hamiltoniano integrável e neste sistema, um particular n -toro, caracterizado por n frequências $\omega_1, \dots, \omega_n$. Adicionamos uma pequena perturbação na Hamiltoniana e perguntamos se o n -toro invariante ainda existe com essas frequências. Mais uma vez, a resposta é sim, se as ω_i 's estão suficientemente longe de todas as relações de comensurabilidade. Isto significa que elas devem satisfazer, precisamente, a relação:

$$\left| \sum_{i=1}^n k_i \omega_i \right| > c \left| \sum_{i=1}^n |k_i| \right|^{-\gamma}, \quad (3.7)$$

onde c e γ são constantes, para toda série de inteiros k_i (não todos nulos). γ é fixo, mas c depende da amplitude da perturbação.

Devemos ter em mente que o teorema de KAM, somente dá condições suficientes para a existência de curvas invariantes ou toros invariantes. Ele nada diz, acerca do que acontece nas regiões excluídas pelas equações (3.5) ou (3.7), ou seja, ao contrário do que algumas vezes acreditamos, o teorema não declara que as curvas invariantes e toros são destruídos na vizinhança de ressonâncias se a perturbação tornar-se grande. Embora, ele acabe sugerindo que alguma coisa assim aconteça.

Uma das consequências mais interessantes do teorema de KAM é a prova rigorosa da estabilidade do ponto fixo elíptico, no caso de um mapeador bidimensional correspondendo a um sistema dinâmico com dois graus de liberdade. Antes deste teorema ser provado, estes pontos eram chamados de linearmente estável, isto é, estável na aproximação linear; mas nada poderia ser afirmado acerca do que acontece quando a não linearidade era considerada. Depois do teorema de KAM, pôde ser deduzido que curvas invariantes fechadas existem em alguma vizinhança, pequena, de um ponto fixo elíptico. Por outro lado, uma trajetória que parte dentro de tal curva invariante fechada deve permanecer dentro dela o tempo todo, pois a região interna é mapeada no interior dela mesma. Isto é suficiente para provar a estabilidade. (Os casos excluídos são aqueles onde os autovalores são $e^{\pm i\alpha}$,

com $\alpha = 2\pi p/q$, p e q inteiros, e $q \leq 4$; [16], [17]).

Mais geralmente, cada região anelar limitada por duas curvas invariantes concêntricas é propriamente, uma região invariante, que mapeia sobre si mesma, e de onde as trajetórias não podem escapar. Para mais de dois graus de liberdade, a situação é bem diferente e não será retratada aqui.

3.2 Regiões caóticas

Vamos voltar nossa atenção para as regiões caóticas. Visto que as trajetórias quase-periódicas e as curvas invariantes estão associadas com pontos fixos elípticos, podemos suspeitar que as regiões caóticas estão associadas com pontos fixos hiperbólicos, portanto, consideraremos estes pontos agora. Mais uma vez, partimos do caso integrável. Não podemos usar neste caso, as variáveis de ângulo-ação, pois os pontos fixos hiperbólicos, geralmente permanecem nas vizinhanças entre as regiões onde séries diferentes de variáveis de ângulo-ação devem ser usadas (conforme vimos na seção 2.4.1). Assim, reverteremos para as variáveis usuais (q_1, q_2, p_1, p_2) , que são válidas para todo o espaço de fase. Há duas integrais: a Hamiltoniana H , e uma outra integral que chamamos I_2 . Para uma dada trajetória, temos:

$$H(q_1, q_2, p_1, p_2) = C_1 \quad (3.8)$$

$$I_2(q_1, q_2, p_1, p_2) = C_2 \quad (3.9)$$

com C_1 e C_2 constantes. A introdução de uma seção de superfície corresponde a uma terceira relação

$$\Sigma(q_1, q_2, p_1, p_2) = 0 \quad (3.10)$$

Tomamos q_1 e p_1 como coordenadas na seção de superfície, e escolhemos um

valor definido para C_1 . Então podemos resolver as equações (3.9) e (3.10) para q_2 e p_2 e substituímos na equação (3.9), obtendo a seguinte relação:

$$I_2(q_1, p_1) = C_2. \quad (3.11)$$

Esta relação descreve uma família de curvas a um parâmetro, na seção de superfície, que são as familiares curvas invariantes. Será conveniente imaginar um espaço tridimensional, onde q_1 e p_1 são as coordenadas horizontais, enquanto C_2 é a coordenada vertical. Então a equação (3.11) é a equação de uma superfície tridimensional, e a família de curvas a um parâmetro representa as linhas de nível desta superfície. Um ponto fixo elíptico é circundado por curvas invariantes fechadas (conforme descrito na seção 2.3.2), portanto, ele corresponde a um pico ou um buraco (fig. 3.2a). Na vizinhança de um ponto fixo hiperbólico, o quadro é bem diferente: as curvas invariantes tem uma forma hiperbólica (fig. 3.2b). Em particular, as variedades estáveis e instáveis invariantes formam uma particular linha de nível, passando pelo ponto fixo. Isto corresponde a um "caminho" da superfície. Este caminho é cercado por dois "vales" e duas "montanhas". Agora suponhamos que andamos sobre o caminho, mantendo a altitude constante: seguimos então um dos ramos da variedade invariante, por exemplo, um ramo instável. Na situação típica, o que acontece então, é que andamos em torno das "montanhas" e voltamos para o caminho (fig. 3.2c); voltamos exatamente para ele, pois mantemos a altitude fixa. Ainda mais, voltamos ao longo de um ramo da variedade estável. Então, ramos das variedades estável e instável tipicamente se cruzam para formar uma única curva, começando e terminando no ponto fixo hiperbólico. O mesmo acontece, certamente, no lado esquerdo do quadro.

Temos raciocinado, em termos de movimento contínuo por conveniência. Na realidade, uma trajetória na seção de superfície é feita de uma sequência discreta de pontos. O que acontece, então, é que uma trajetória que permanece na variedade instável, permanece também na variedade estável; e portanto, os pontos Y_j da trajetória tendem ao ponto fixo ambos para $j \rightarrow -\infty$ e para $j \rightarrow +\infty$. Mais geralmente, um n -ciclo hiperbólico, corresponde a n passos que estão todos na mesma altitude. A situação típica é então

representada pela fig. (3.2d); caminhando para longe do caminho em altitude constante, seguindo uma variedade instável, chegamos exatamente ao próximo passo, ou seja, o próximo ponto do ciclo, ao longo de um ramo de variedade invariante estável correspondente àquele ponto.

Vamos considerar agora o caso não-integrável. Não existe mais que uma constante de movimento, a quantidade C_2 . Portanto, partimos de uma trajetória na variedade instável, não há razão para voltarmos exatamente ao próximo ponto fixo hiperbólico (ou chegarmos exatamente ao ponto do ciclo hiperbólico); e em geral, isto não acontece. Se o sistema é integrável, a trajetória sempre volta exatamente ao ponto fixo, a discrepância pode ser muito pequena para ser vista; isto é o que acontece, por exemplo, na figura (3.1), onde as variedades emanam de um ponto hiperbólico parecem terminar exatamente em outro. Se traçarmos, simultaneamente, as variedades estável e instável, W^s e W^u , vemos que elas não se juntam suavemente, mas interceptam-se com um ângulo fig. (3.3a). O ponto de interseção P_0 é chamado **ponto homoclínico**. A existência deste ponto terá consequências de longo-alcance. Considere as imagens sucessivas $P_1, P_2, \dots$, de P_0 . Todas elas pertencem a variedade estável W^s , e vão em direção ao ponto fixo. Mas eles também pertencem a variedade instável W^u . Portanto, W^u deve passar por todos esses pontos. Isto ele faz, oscilando em torno de W^s (fig. 3.3b). A direção do cruzamento de W^s por W^u é preservada por esse mapeador, e portanto deve existir uma segunda sequência de pontos Q_j alternando com P_j . (Em casos particulares, pode haver mais que duas sequências.) Agora o mapeador preserva área; portanto os loops sucessivos, formados por W^u num lado de W^s , devem ter áreas iguais. Mas a base destes loops, tendem a zero quando j tende a infinito; portanto, seu comprimento deve aumentar constantemente. Eles se tornam mais e mais finos e alongados; este alongamento se dá ao longo da direção instável do ponto fixo (fig 3.3b), numa razão exponencial. E assim, partem enrolando-se ao longo de W^u , seguindo-o num curso quase-paralelo, tornando-se longos o suficiente para ir pela figura inteira, e então cruzam-se em suas próprias oscilações. Cada loop de primeira-ordem produz um de segunda-ordem. Estes loops ficam cada vez maiores, atingem seu limite e partem produzindo loops de terceira-ordem, e assim por diante. Logo, torna-se impossível fazer um esquema de W^u . Encontramos, assim, uma situação de complexidade indescritível, com

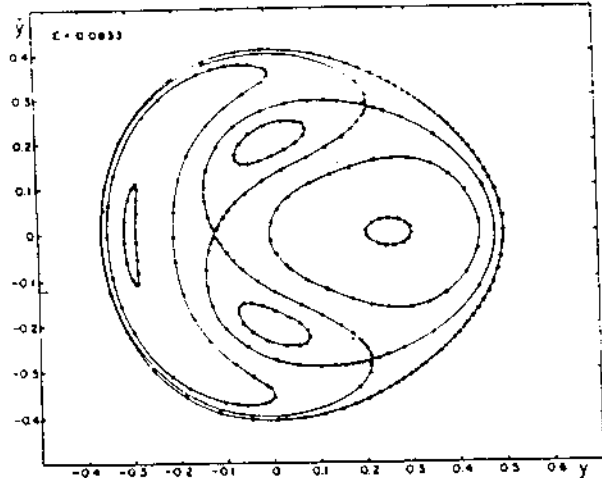


Figura 3.1: seção de Poincaré de Henon-Heiles. As variedades que emanam de um ponto hiperbólico, parecem terminar exatamente em outro.

uma hierarquia infinita de estruturas de tamanho cada vez menor. O mais interessante é que apesar de todos esses loops, W^u nunca se cruza. Partindo de P_0 , podemos também voltar e considerar a sequência $P_{-1}, P_{-2}, \dots$. Acontece exatamente, o mesmo fenômeno, mas nesse caso, envolvemos a continuação da variedade estável. A figura (3.4) mostra um esquema dos loops de primeira-ordem de ambos W^u e W^s , tornando-se mais denso nas proximidades do ponto fixo; todos esses pontos são pontos homoclínicos.

A figura (3.4) sugere que as variedades invariantes, com sua "multidão de loops", ocupam densamente uma região de extensão finita em torno do ponto fixo hiperbólico. Uma trajetória que parte de um ponto sobre uma variedade invariante, consistirá de pontos espalhados ao longo dos loops, e portanto, ela parece igual àqueles pontos, que também ocuparão uma região bidimensional. Outra conjuntura plausível é que alguma trajetória que parte de dentro desta região, mesmo que ela não permaneça na variedade invariante, terá propriedades similares. Ainda mais, por causa da elongação exponencial destes loops, os pontos sucessivos da sequência apresentarão uma aparente aleatoriedade. Essa descrição qualitativa, mostra como uma região caótica bidimensional pode ser gerada; e isto definitivamente, parece estar associado com os pontos hiperbólicos e suas variedades invariantes.

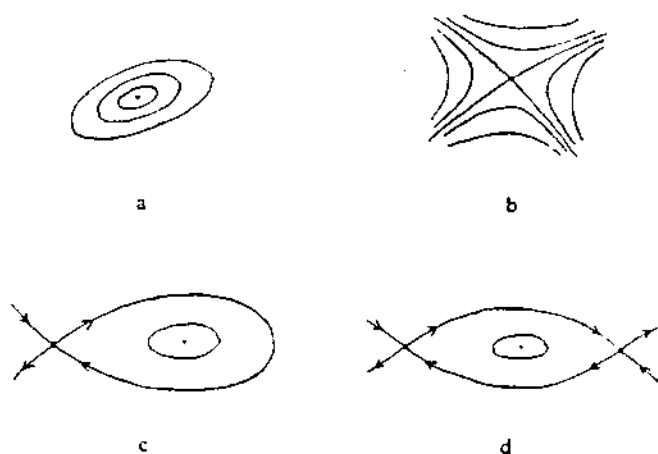


Figura 3.2: curvas invariantes na seção de Poincaré, para o caso integrável. Em a) ponto fixo elíptico, b) ponto fixo hiperbólico, c) caso típico onde temos o ponto fixo elíptico e o ponto fixo hiperbólico e d) caso típico para um n -ciclo hiperbólico

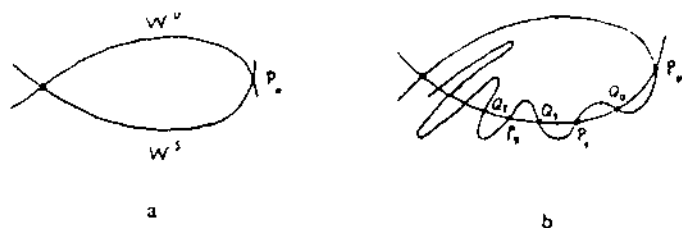


Figura 3.3: curvas invariantes para o caso não-integrável. Em a) o cruzamento das variedades estável e instável não é suave e em b) loops formado pelo cruzamento das imagens de um ponto P_0 com a variedade estável.

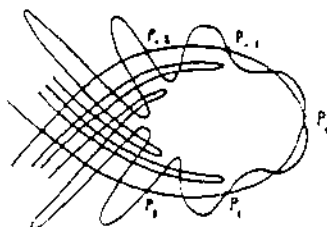


Figura 3.4: cruzamentos das variedades invariantes formando uma “multidão de loops”

3.3 Separação de Órbitas Vizinhas

Consideramos duas trajetórias inicialmente muito próximas e perguntamos: como sua distância evolui com o tempo? Elas permanecem juntas ou elas divergem? E se for assim, quanto elas se distanciam? Essa questão poderia ser inicialmente motivada por uma indagação da propagação de erros dos computadores, ou dos efeitos de uma má definição das condições iniciais; mas verificaremos que a questão tem de fato um significado muito profundo e está intimamente ligada às propriedades fundamentais das trajetórias.

Para um sistema integrável, a resposta é fácil. A solução geral é dada pelas equações (2.29) e (2.31) em variáveis de ângulo-ação. Consideremos duas trajetórias, caracterizadas respectivamente pelas condições iniciais C_i , D_i e C'_i , D'_i . No tempo t temos:

$$P'_i - P_i = C'_i - C_i, \quad Q'_i - Q_i = D'_i - D_i + (\omega'_i - \omega_i)t. \quad (3.12)$$

Para grandes valores de tempo, o termo em t domina e a distância entre os dois pontos no espaço de fase cresce, linearmente com o tempo. Assim, trajetórias vizinhas divergem linearmente em geral.

Consideremos agora um sistema não-integrável. Numa região “regular”, consistindo principalmente de trajetórias quase-periódicas, os experimentos numéricos mostram que a divergência ainda é aproximadamente linear com o tempo [18]. Em uma região caótica, as coisas são muito diferentes. Há um aumento *exponencial* da distância com o tempo. Muitos experimentos tem mostrado que este comportamento é típico de regiões caóticas [19].

Podemos também, considerar a separação da correspondente sequência de pontos na seção de superfície, ou em um mapeador. A distância entre os pontos de duas trajetórias, neste caso, é considerada como uma função do número de iterações j , em vez de função do tempo. Essencialmente, os mesmos resultados são obtidos: a separação cresce linearmente em regiões populadas por curvas invariantes e exponencialmente em regiões caóticas. Assim, em regiões caóticas, a distância entre duas órbitas vizinhas cresce aproximadamente com $e^{\lambda t}$ no espaço de fase, ou $e^{\lambda j}$ para um mapeador. λ é uma constante, que até aqui caracteriza somente o particular par de órbitas escolhido. Como ela se altera se alterarmos essas órbitas?

Primeiro fixamos uma órbita, que será descrita por $X^*(t)$, e consideramos a segunda órbita com uma perturbação, escrevendo-a como $X^*(t)+U(t)$, com U pequeno. Esta segunda órbita fica determinada pelo deslocamento inicial $U(0)$. Os resultados numéricos mostram que, dentro das flutuações estatísticas, λ é independente da escolha de $U(0)$. Em outras palavras, o número λ parece caracterizar a órbita $X^*(t)$: todas as órbitas vizinhas separam-se dela com $e^{\lambda t}$.

Em seguida, alteramos a órbita $X^*(t)$ propriamente, alterando seu ponto inicial, $X^*(0)$. Os experimentos numéricos então revelam outro resultado notável: numa região caótica, λ parece ser sempre constante! Portanto, λ caracteriza não somente uma órbita, mas uma região caótica inteira. Isto pode ser intuitivamente entendido do fato que qualquer órbita começando na região caótica tende a ir por quase todo lugar desta região; λ pode assim, ser interpretado como uma “razão média de separação”, a média sendo tomada sobre toda a região caótica. Por outro lado, para regiões caóticas diferentes (não-comunicantes), geralmente encontramos diferentes valores de λ . Todos esses resultados podem ser explicados por uma teoria que se aplica também a todos os sistemas dinâmicos, e não somente aos sistemas Hamil-

tonianos, a **teoria de Lyapunov**. Não entraremos em detalhes da teoria, mas indicamos [20] para um "review" detalhado.

A separação exponencial das órbitas, em regiões caóticas, tem consequências dramáticas. Em princípio, um sistema dinâmico é determinístico, ou seja, das condições iniciais, podemos deduzir a evolução futura por todo o tempo, mas na prática, se estamos em uma região caótica, o mais insignificante desvio será ampliado exponencialmente; após algum tempo, a saturação é atingida, significando que as órbitas computadas não já não tem nenhuma semelhança com a órbita "exata" que queremos seguir! Muitos desvios são produzidos por erros numéricos, contudo mesmo se tivéssemos à nossa disposição um computador ideal, livre de erros de integração ou truncamentos, a situação poderia não ser melhorada, por causa de dois outros fatores. Primeiro, é impossível medir o estado inicial de um sistema físico com precisão infinita; e segundo, as equações usadas para representar um sistema não são em geral, estritamente exatas, muitas aproximações são feitas se vários efeitos pequenos são negligenciados. Do ponto de vista dos físicos; portanto, o sistema é não-determinístico. Sua evolução não pode ser determinada para mais que um período de tempo. Se λ é grande, o sistema exibirá, de fato, um comportamento quase-randômico; não haverá relação aparente entre seus estados em dois tempos diferentes, mesmo se o intervalo entre esses tempos não for muito grande.

A separação exponencial também acontece se voltarmos no tempo. Como uma consequência, trajetórias em uma região caótica "esquecem" progressivamente seu estado inicial; nada pode ser deduzido, além de certo ponto, acerca do passado de um sistema, através de um exame de seu estado presente. Poderíamos então concluir que não há órbitas periódicas na região caótica, e que experimentos numéricos nada podem dizer acerca das propriedades destas regiões. Felizmente, a situação não é tão ruim. É verdade que a localização de pontos individuais da trajetória não tem muito significado, dado que alterações insignificantes no estado inicial produzirão pontos inteiramente diferentes. Se, contudo, não consideramos pontos individuais, mas uma *série* de pontos que constituem uma órbita, encontramos que esta série tem propriedades estatísticas definidas. Mais precisamente, os pontos parecem obedecer uma estatística bem definida, ao contrário da deterioração rápida da precisão de pontos individuais, esta distribuição torna-se

bem definida quantos mais pontos são computados, conforme ilustra a figura (3.5).

A figura (3.5a) mostra o resultado de cem iterações, partindo de $x_0 = 0$, $y_0 = 0.08$ e $E = 0.08$; a figura (3.5d) é a mesma computação com $x_0 = 0$ e $y_0 = 0.08 + 10^{-10}$. As duas séries de pontos são notavelmente diferentes, o que é melhor ilustrado pelas figuras (3.5b) e (3.5e), que tem respectivamente as mesmas condições iniciais de (a) e (d), exceto pelo números de pontos igual a 300. Agora computamos 1000 pontos ao invés de 300 para as duas trajetórias, e vemos que as duas figuras são bastantes similares e diferem somente em alguns detalhes. Elas mostram uma grande região caótica, que dentro das flutuações estatísticas parecem ser uniformemente ocupadas com pontos. (Esta uniformidade é uma consequência da propriedade de preservação de área). As regiões brancas que não são penetradas por pontos são regiões de curvas invariantes ou "ilhas". A figura (g) corresponde às condições iniciais $x = 0.0$, $y = 0.08$, $p = 0.01$, para a mesma energia, e indica que essencialmente a mesma distribuição é obtida para qualquer trajetória dentro da região caótica.

A maioria das seções de Poincaré que vemos, tem o mesmo quadro geral: parte do plano é ocupado com curvas invariantes, e o resto ocupado por regiões caóticas. A proporção destas duas regiões variam quando os parâmetros são variados. Parece que podemos descrever a situação geral como se segue: cada ponto fixo elíptico é cercado por um "continente", de tamanho variável, ocupado por curvas invariantes, e estes "continentes" são imersos em um "mar caótico".

3.4 Ilhas

Um olhar mais cuidadoso, revela que a situação real é mais complexa que isso. Em um sistema integrável, cada sequência de pontos permanece num círculo (fig. 2.13). Temos então, uma família de curvas invariantes a um parâmetro, formada por círculos concêntricos em torno da origem. Em um dado círculo, pontos sucessivos são separados por um ângulo constante, igual ao número de rotação ν_1 . Este número é dado por $\nu_1 = \omega_1/\omega_2$ (eq. 2.35). O número de rotação não é o mesmo nos diferentes círculos e o mapeador

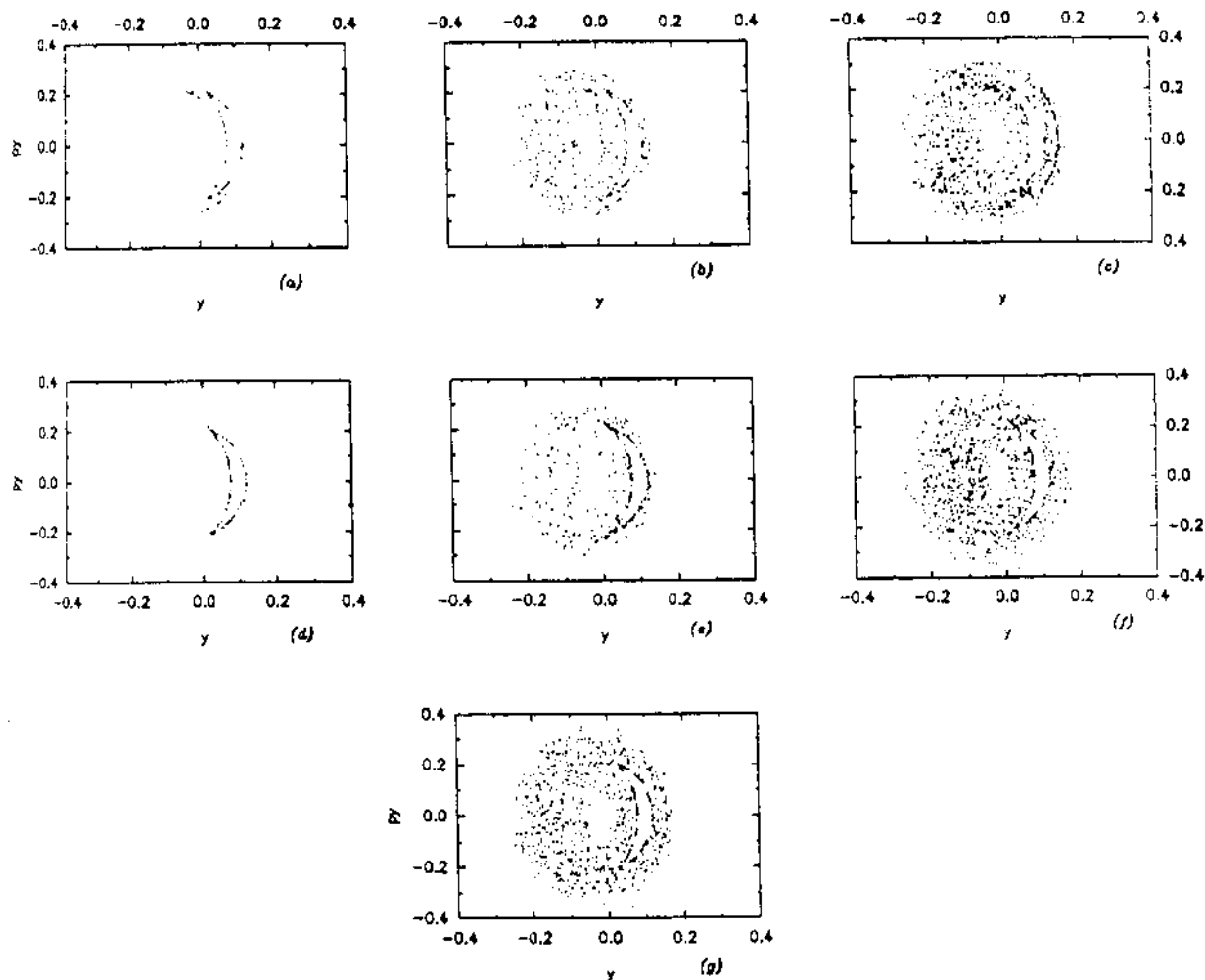


Figura 3.5: seção de Poincaré no plano yp_y do potencial Nelson, para a energia 0.08, com as respectivas condições iniciais: (a), (b) e (c) com $x = 0.0$, $y = 0.08$, $p = 0$ e N igual a 100, 300 e 1000 pontos; (d), (e) e (f) com $x = 0.0$, $y = 0.08 + 10^{-10}$, $p = 0$ e N igual a 100, 300 e 1000 pontos; (g) com $x = 0.0$, $y = 0.08$, $p = 0.01$ e N igual a 1000 pontos.

pode ser descrito como um mapeador curvo.

Os círculos que tem ν_1 irracional, são densamente cobertos por pontos de uma sequência; nenhum ponto do círculo é visitado duas vezes. Nos círculos com ν_1 racional, $\nu_1 = r/s$, (r e s sendo primos inteiros relativamente), a situação é bem diferente: cada sequência volta ao ponto inicial após s iterações, e então se repete periodicamente. Cada ponto deste círculo pertence a um s -ciclo.

Vamos assumir que o sistema integrável seja levemente perturbado, de forma que não seja mais integrável. Assim, quase todos os s -ciclos serão destruídos. Tipicamente, encontramos que dois ciclos sobrevivem; um do tipo elíptico e o outro do tipo hiperbólico, e os pontos de ambos ciclos são alternados. Considere agora, um ponto do ciclo elíptico. Ele é um ponto fixo elíptico de G^s . Portanto, tudo o que foi afirmado até aqui, para a vizinhança do ponto fixo elíptico se aplica também a esse ponto, visto que, estamos considerando G^s e não G , ou seja, temos somente o s -ésimo ponto da sequência. Em particular, este ponto será cercado por uma série de curvas invariantes; esta estrutura é chamada ilha. Se aplicarmos G mais uma vez, esta ilha é mapeada numa estrutura similar cercando o próximo ponto do ciclo elíptico. Obtemos então, uma "cadeia de ilhas".

Pontos sucessivos de uma sequência tem nesse caso, um movimento composto. Em cada aplicação do mapeador G , os pontos pulam de uma ilha para outra; especificamente, para a r -ésima ilha próxima. Após s iterações, ele volta à mesma ilha, mas não ao mesmo ponto. Se considerarmos somente o s -ésimo ponto da sequência, obtemos uma subsequência de pontos que pertencem a mesma ilha, e que rodam regularmente sobre uma de suas curvas.

Em um sistema integrável, o número de rotação ν_1 geralmente é uma função do raio, significando que no sistema perturbado, pode existir uma infinidade de cadeias concêntricas de ilhas. Mas o quadro é ainda mais complexo que isso. A largura radial de cada ilha, diminui rapidamente quando o número s de ilhas aumenta; portanto, em uma exploração numérica, onde as condições iniciais são escolhidas mais ou menos ao acaso, somente as cadeias que correspondem a s pequenos são (ou tem chance de ser) detectadas. Contudo, se procurarmos sistematicamente o lugar onde ν_1 tem valor racional numa cadeia de ilhas, encontraremos muitas delas, até que eventualmente,

o limite da resolução do computador seja atingido, conforme ilustra a fig. (3.6). Mas este, ainda não é o fim da história. Em particular, cada “pequena” curva em uma ilha é caracterizada por um *número de rotação de segunda-ordem*. Quando este número passa por um valor racional, a “pequena” curva se quebra em uma cadeia de ilhas ainda menores, chamadas *ilhas de segunda-ordem*. Este processo continua, portanto deve existir ilhas de terceira-ordem; e assim por diante. As ilhas são organizadas em um número infinito de ilhas do próximo nível.

Vimos assim, um relance da complexidade de um sistema dinâmico, mesmo no caso mais simples com dois graus de liberdade, quando ele deixa de pertencer à classe dos sistemas integráveis. Esta hierarquia de ilhas sugere que os sistemas dinâmicos são inexauríveis, no sentido que novos detalhes surgem, continuamente, quando examinamos numa escala cada vez mais fina. Ela sugere, também, que não será possível obter uma “solução geral” do problema, ou seja, uma fórmula explícita que dê a posição no espaço de fase como função da posição inicial e do tempo (ou a posição na superfície de Poincaré como função da posição inicial e do número de iterações).

Através dos primeiros capítulos desta dissertação, ou melhor ainda, logo pelas primeiras páginas do Arnold, Guckenheimer, Goldstein, etc., percebemos que, ao contrário da idéia errônea que adquirimos, ou solidificamos, nos cursos da graduação, a Mecânica Clássica está longe de ser fechada, ou seja, seus maiores problemas, ainda precisam ser resolvidos. Tendo agora, alguma compreensão de como um sistema, “regido” por equações de movimento não-lineares se comporta, somos induzidos a perguntar: Que relação existe, ou deve existir, entre o sistema clássico caótico e seu análogo quântico?

Não podemos definir o caos quântico nos referindo a separação de variáveis entre “órbitas vizinhas”, pois não há separação exponencial como não há separação alguma entre dois vetores $|f\rangle$ e $|g\rangle$ que rodam no espaço de Hilbert. Eles rodam mantendo sempre a mesma distância entre eles [6].

Apesar de não haver uma definição precisa em relação ao caos quântico, no sentido que não temos como na mecânica clássica, algo que evidencie o caos, ou seja, separação exponencial de órbitas vizinhas, o fato da Ha-

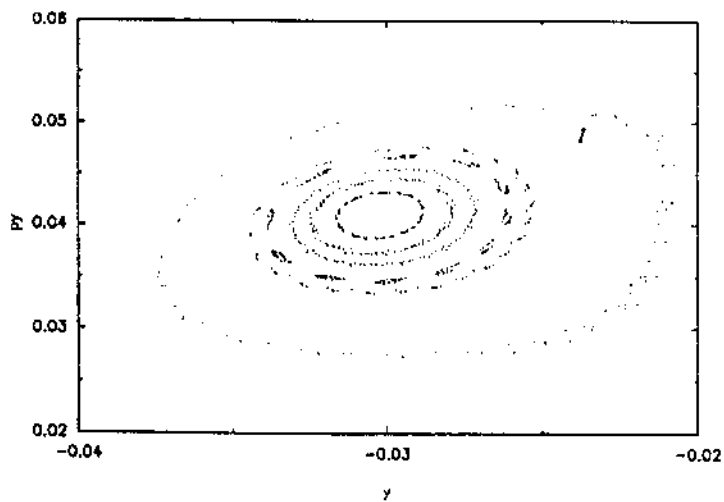
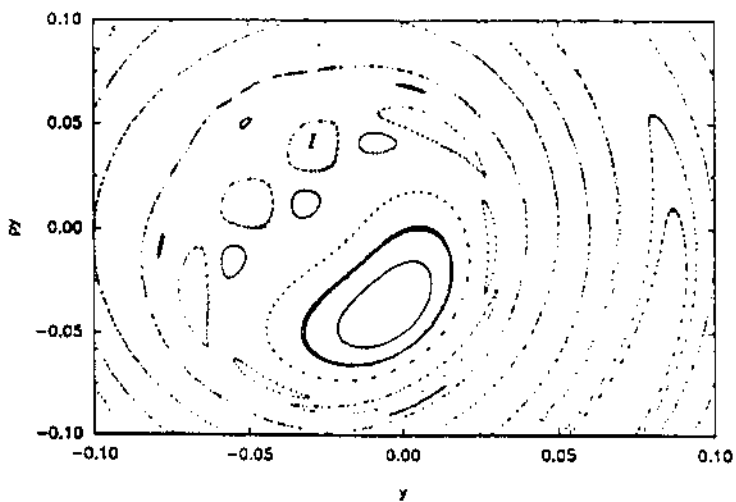


Figura 3.6: parte da seção de Poincaré do potencial NELSON assimetrizado (ou seja $c = 0.1$) para a energia $E = 0.03$. (a) cadeia de 5 ilhas de primeira-ordem (b) cadeia de 11 ilhas de segunda-ordem.

miltoniana H ser ou não-integrável deve afetar o comportamento quântico de alguma forma. Esse efeito deve se manifestar principalmente no limite semiclássico, onde as ações típicas são muito maiores que a constante de Planck (ou $\hbar \rightarrow 0$). Nesse limite, as propriedades clássicas são ressaltadas e as diferenças entre movimento regular e caótico devem ficar mais claras.

Veremos em seguida, as consequências quânticas do caos em sistemas classicamente não-integráveis e estudaremos um método muito geral de extrair informações acerca do espectro quântico de uma completa enumeração das órbitas periódicas clássicas, a Fórmula do Traço de Gutzwiller, ou seja, veremos que as órbitas periódicas desempenham um papel fundamental, o que sobremaneira motiva o nosso trabalho.

Capítulo 4

Caologia Quântica

A aproximação semi-clássica para a mecânica quântica tem sido crucial para desenvolvimento de certas áreas, em particular, física de altas energias. Mesmo assim, a aproximação clássica, durante muito tempo, perdeu lugar para a mecânica quântica, uma vez que a maioria dos sistemas mecânicos clássicos são mal comportados, isto é, eles apresentam um comportamento estocástico difícil de se compreender.

Einstein foi o primeiro cientista a estar ciente dos efeitos da estocasticidade com relação à mecânica quântica. Em 1917, oito anos antes do formalismo de Heisenberg e da equação diferencial parcial de Schroedinger, ele fez duas importantes declarações, as quais, na terminologia moderna podem ser parafraseadas como se segue: As condições de quantização de Sommerfeld podem ser aplicadas somente quando as trajetórias permanecem sobre toros no espaço de fase de dimensionalidade não excedente ao número de graus de liberdade. Se contudo, uma trajetória típica ocupa um volume no espaço de fase de dimensão maior, nenhuma condição de quantização pode ser formulada.

A fim de preencher a lacuna que ficou entre a mecânica clássica e a formulação da mecânica quântica, vários métodos úteis e instrutivos foram desenvolvidos, porém nenhum deles para sistemas Hamiltonianos caóticos.

— Os livros de mecânica quântica creditam a Wentzel, Kramer e Brillouin o desenvolvimento de um método semi-clássico para obter níveis de energia, o WKB, mas este método é estritamente limitado a sistemas conservativos

onde não há caos, ou seja, integrável.

— A fórmula de Van Vleck de 1928 [21] generaliza o WKB para muitos graus de liberdade, mas precisa ser ampliada ainda mais antes de ser aplicada em sistemas caóticos.

— A formulação de Feynman da mecânica quântica foi aplicada em trabalhos no campo de integrais de caminho: Cécile (de Witt) Morette em 1951 [22] obteve a fórmula de Van Vleck da integral de caminho e Choquard em 1955 [23] foi o primeiro a investigar sistematicamente as correções de ordem mais alta; ambas as aproximações divergem na primeira cáustica e seus resultados são válidos somente para tempos curtos.

— A publicação de Einstein de 1917 [24] foi redescoberta por Keller em 1958 [25] que a interpretou sob a luz da mecânica de ondas. Em 1960, Keller e Rubinov [26] abordaram a estocasticidade em alguns exemplos.

— Maslov em 1972 [27] aplicou um aparato matemático para expandir o trabalho de Choquard, mas ainda livre da natureza ergódica da mecânica clássica.

— Balian e Bloch em 1970 [28] e em 1971 [29] [30], deram uma elegante generalização da distribuição assintótica dos níveis de energia; também eles em 1972 [31] e em 1974 [32] reconheceram a importância das órbitas periódicas na distribuição dos níveis, mesmo assim não introduziram a correção do caos em mecânica clássica.

Ficou então o desafio de se encontrar um método para ir da mecânica clássica para a mecânica quântica nos casos onde as equações de movimento não podem ser integradas, ou seja, se não há constantes de movimento além da energia. Desafio esse aceito por Gutzwiller, que encontrou uma aproximação semi-clássica para a densidade de estados que pode ser aplicada tanto em sistemas integráveis como classicamente caóticos. Esta aproximação será o objeto de nosso estudo agora.

Mostraremos neste capítulo, que a função de Green de um sistema quântico pode ser aproximada com a ajuda de quantidades que aparecem do correspondente sistema mecânico clássico. Os argumentos envolvem somente noções de mecânica clássica os quais eram bem conhecidos dos astrônomos do século XIX, em particular Hill e Poincaré. Faremos uma aproximação semi-clássica para a função de Green e sua redução à densi-

dade de estados. Então, mostraremos que somente as órbitas periódicas contribuem para a densidade de estados, pois esta aparece como uma soma sobre todas as órbitas periódicas para uma dada energia. Cada termo nesta soma é uma integral sobre a órbita periódica a qual deve ser calculada. As hipóteses especiais acerca do sistema mecânico são feitas cuidadosamente. Consideramos por motivo de facilidade, uma Hamiltoniana independente do tempo.

A expressão original da função de Green envolve somente a integral de ação entre dois pontos ao longo da trajetória clássica. Mas após alguns cálculos elementares, ela pode ser expressa como função da energia, do número de pontos conjugados e do expoente de estabilidade, isto é, o resultado é convenientemente expresso como uma função resposta para o sistema em um plano de energia complexa tal que a descontinuidade ao longo do eixo real de energia seja igual à densidade de estados.

4.1 Integral de Caminho de Feynman.

A integral de caminho de Feynman é um bom método para irmos da mecânica quântica para seu caso limite, a mecânica clássica, uma vez que ela foi, por muitos anos, capaz de dar uma interpretação sensível ao princípio variacional da mecânica clássica.¹ Em contrapartida, a dificuldade de manuseá-la com ferramentas matemáticas convencionais nos levará a começar pela equação de Schroedinger.

Usaremos a função de onda $\Psi(\vec{x}, t)$ onde Ψ é complexo. $\vec{x}$ é a coordenada cartesiana $(x_1, x_2, \dots, x_f)$ em $\mathcal{R}^f$ e t , o tempo, sendo que $-\infty < t < +\infty$.

Considere uma partícula de massa m , não relativística, sem spin, sob a ação do potencial $V(\vec{x})$. A função de onda é uma solução da equação diferencial parcial:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \frac{1}{2m} \left\{ \sum_{j=1}^f \left(\hbar \frac{\partial}{\partial x_j} \right)^2 + V(\vec{x}) \right\} \Psi, \quad (4.1)$$

¹ Esta possibilidade foi claramente vista por Dirac e Feynman.

onde $\hbar$ é a constante de Planck dividida por 2π .

Do propagador $\mathcal{K}(\vec{x}'', t''; \vec{x}', t')$ obtemos $\Psi(\vec{x}'', t'')$ como uma soma sobre os valores da função de onda para $t' < t''$,

$$\Psi(\vec{x}'', t'') = \int d^f \vec{x}' \mathcal{K}(\vec{x}'', t''; \vec{x}', t') \Psi(\vec{x}', t'). \quad (4.2)$$

O propagador pode ser considerado como uma solução especial da equação de Schroedinger que vai a zero para $t'' < t'$ e tem valor inicial,

$$\lim_{t'' \rightarrow t'} \mathcal{K}(\vec{x}'', \vec{x}'; t'', t') = \delta(\vec{x}'' - \vec{x}'), \quad (4.3)$$

onde t'' tende a t' pela direita.

A fórmula explícita de Feynman para $\mathcal{K}$ é obtida como se segue:

O intervalo de tempo $t'' - t'$ é dividido em N passos de comprimento $\epsilon = (t'' - t')/N$, isto é, são definidos tempos intermediários e podemos escrever $t' = t_0, t_1, \dots, t_{N-1}, t_N = t''$. As coordenadas cartesianas, $\vec{x}' = \vec{x}_0, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_{N-1}, \vec{x}_N = \vec{x}''$ variam livremente exceto nos pontos fixos $\vec{x}' = \vec{x}_0$ e $\vec{x}'' = \vec{x}_N$.

Seja

$|\vec{x}_0\rangle$: autoestado no instante t_0

$|\vec{x}_i\rangle$: autoestado no instante t_i .

podemos escrever:

$$\begin{aligned} \langle \vec{x}_0 / \vec{x}_N \rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int d\vec{x}_0 \int d\vec{x}_1 \dots \\ &\int d\vec{x}_{N-1} \langle \vec{x}_0 / \vec{x}_1 \rangle \dots \langle \vec{x}_{N-1} / \vec{x}_N \rangle. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Feynman propôs que

$$\langle \tilde{x}_0/\tilde{x}_N \rangle \sim \exp \left(\frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^{t_N} L dt \right). \quad (4.5)$$

Então no limite quando $N \rightarrow \infty$ ou quando $\epsilon \rightarrow 0$, podemos escrever:

$$\langle \tilde{x}_0/\tilde{x}_1 \rangle = A \exp \left(\frac{-i}{\hbar} L(\tilde{x}_0, \tilde{x}_1, \epsilon) \right). \quad (4.6)$$

Assim, aplicando(4.6) em (4.4), obtemos:

$$\begin{aligned} \langle \tilde{x}_0/\tilde{x}_N \rangle &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int d\tilde{x}_0 d\tilde{x}_1 \dots d\tilde{x}_{N-1} \\ &A^N \left\{ \exp \left[\frac{-i}{\hbar} (L(\tilde{x}_0, \tilde{x}_1, t) + L(\tilde{x}_1, \tilde{x}_2, t) + \dots + L(\tilde{x}_{N-1}, \tilde{x}_N, t)) \right] \epsilon \right\}. \end{aligned} \quad (4.7)$$

A equação (4.7) pode ser escrita na forma:

$$\langle \tilde{x}_0/\tilde{x}_N \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \int d\tilde{x}_0 d\tilde{x}_1 \dots d\tilde{x}_{N-1} A^N \exp \left[\frac{-i}{\hbar} \int_{t_0}^t L(\tilde{x}, t) dt \right]. \quad (4.8)$$

Denominando $A^N \prod_{i=1}^{N-1} d\tilde{x}_i = \lim_{N \rightarrow \infty} \mathcal{D}[\tilde{x}(t)]$, obtemos:

$$\langle \tilde{x}_0/\tilde{x}_N \rangle = \int \mathcal{D}[\tilde{x}(t)] \exp \left[\frac{-i}{\hbar} \int L(\tilde{x}, t) dt \right]. \quad (4.9)$$

portanto,

$$\int d\tilde{x}_0/\tilde{x}_0 \langle \tilde{x}_0/\tilde{x}_N \rangle = \int d\tilde{x}_0 \mathcal{D}[\tilde{x}(t)] \exp \left[\frac{-i}{\hbar} \int L(\tilde{x}, t) dt \right]. \quad (4.10)$$

Uma vez que podemos obter o autoestado $|\Psi(\vec{x}'', t'')\rangle$ através de um propagador atuando no autoestado inicial, isto é:

$$|\Psi(\vec{x}'', t'')\rangle = \int d\vec{x} \mathcal{K}(\vec{x}'', t'') \rangle,$$

comparando (4.10) com a equação acima, podemos concluir que,

$$\mathcal{K} = \int d\vec{x} \mathcal{D}[\vec{x}(t)] \exp\left(\frac{-i}{\hbar} \int L dt\right), \quad (4.11)$$

sendo $\mathcal{K}$ o propagador.

A integral de caminho de Feynman é uma expressão explícita para $\mathcal{K}$ em termos de uma somatória sobre todos os caminhos possíveis no espaço de posição que vão de $(\vec{x}')$ em t' para $(\vec{x})$ no tempo t .

Para o sistema mencionado, ou seja, a partícula de massa m sujeita a um potencial $V(\vec{x})$ temos

$$\mathcal{K}(\vec{x}'', t''; \vec{x}', t') = \lim_{N \rightarrow \infty} \int d^f \vec{x}_1 \dots \int d^f \vec{x}_{N-1} \left(\frac{m}{2\pi\epsilon\hbar} \right)^{\frac{fN}{2}} \exp \left\{ \frac{i\epsilon}{\hbar} \sum_{n=1}^N \left[\frac{m}{2} \left(\frac{\vec{x}_n - \vec{x}_{n-1}}{\epsilon} \right)^2 - V \left(\frac{\vec{x}_n + \vec{x}_{n-1}}{2} \right) \right] \right\}. \quad (4.12)$$

Observando o integrando de (4.12) vemos que cada escolha de coordenadas consecutivas $\vec{x} = \vec{x}_0, \vec{x}_1, \dots, \vec{x}_{N-1}, \vec{x}_N = \vec{x}'$ define um “caminho” de $\vec{x}$ a $\vec{x}'$ e que grandes saltos não contribuem para o resultado final, pois eles levam a grandes variações no expoente cancelando-se assim, uns aos outros. As principais contribuições vem de caminhos os quais tornam-se contínuos no limite de $N \rightarrow \infty$, embora eles não sejam necessariamente diferenciáveis.

4.2 Primeira e segunda variação de $\int L dt$.

Uma vez obtida a expressão (4.11), via integrais de caminho, poderíamos pensar no limite do propagador quando $\hbar \rightarrow 0$; mas tal aproximação formal é muito simplista, pois apesar de ser útil para a intuição física e dar algumas respostas a muitos problemas, sua consistência matemática é duvidosa.

Olhando para o integrando de (4.11) podemos dizer que os caminhos que contribuem são aqueles que estão na vizinhança de um caminho estacionário, pois o integrando tem o valor absoluto 1, mas sua fase varia rapidamente se $\hbar$ é pequeno comparado a $\int L dt$. Vamos examinar agora a variação da integral $\int L dt$; usando q ao invés de $\vec{x}$ para as coordenadas de posição, evidenciando assim que não estamos limitados a um sistema de coordenadas cartesianas.

Considere um caminho fixo $\bar{q}$, um caminho fixo que vai de q' no tempo t' a q'' no tempo t'' , isto é, $\bar{q}(t') = q'$ e $\bar{q}(t'') = q''$. Vamos escrever um caminho arbitrário $q(t)$, fig.(4.1), sendo $q(t) = \bar{q}(t) + \delta q(t)$ e expandir a integral $\int L(q, \dot{q}, t)$ em potências de $\delta q(t)$; os termos incluindo a segunda-ordem não serão calculados agora.

A Lagrangeana desse caminho arbitrário pode ser representada da seguinte forma:

$$L = L(\bar{q} + \delta q, \dot{\bar{q}} + \delta \dot{q}, t), \quad (4.13)$$

expandindo até a primeira ordem obtemos:

$$L \cong L(\bar{q}, \dot{\bar{q}}, t) + \left(\frac{\partial L}{\partial q} \right)_q \delta q + \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right)_{\dot{q}} \delta \dot{q}. \quad (4.14)$$

Teremos assim, a forma para a ação:

$$S = \int_{t'}^{t''} dt L(q, \dot{q}, t) \cong \int_{t'}^{t''} dt L(\bar{q}, \dot{\bar{q}}, t) + \int_{t'}^{t''} dt \left[\left(\frac{\partial L}{\partial q} \right)_q \delta q + \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right)_{\dot{q}} \delta \dot{q} \right]. \quad (4.15)$$

A ordem mais baixa da expansão é simplesmente $\int_{t'}^{t''} L(\bar{q}, \dot{\bar{q}}, t) dt$ e é nada mais que a ação sobre o caminho fixo.

Depois de manipulada convenientemente, usando a seguinte igualdade,

$$\int_{t'}^{t''} dt \left[\frac{\partial L}{\partial q} \delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta \dot{q} \right] = \int_{t'}^{t''} dt \left\{ \left[-\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) + \frac{\partial L}{\partial q} \right] \delta q + \frac{d}{dt} \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \right] \right\} \quad (4.16)$$

a primeira ordem dá:

$$\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right)_{t'} \delta q - \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right)_{t''} \delta q - \int_{t'}^{t''} dt \left[\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} \right] \delta q. \quad (4.17)$$

Os dois primeiros termos de (4.17) vão a zero pois, δq em t' e em t'' é zero como mostra a figura (4.1). Por um argumento bem conhecido, o outro termo da primeira ordem também vai a zero na vizinhança de $\bar{q}(t)$ se a *Equação de Euler-Lagrange* é satisfeita; i.é., se $\bar{q}(t)$ é solução da equação diferencial ordinária:

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) + \frac{\partial L}{\partial q} = 0 \quad (4.18)$$

A equação (4.18) pode ser escrita como equações de primeira-ordem acopladas:

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p} \qquad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q} \quad (4.19)$$

As soluções da equação (4.19) são denominadas **trajetórias clássicas**. Há muitas destas trajetórias conectando os pontos fixos q' e q'' no intervalo de

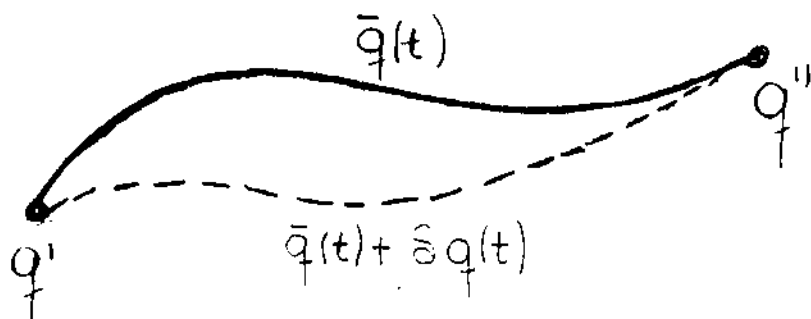


Figura 4.1: caminho arbitrário

tempo (t', t'') , cada uma tem sua em função principal de Hamilton $R(q'', t''; q', t')$ dada por:

$$R(q'', t''; q', t') = \int_{t'}^{t''} dt L(\dot{q}, q, t), \quad (4.20)$$

onde vemos que R depende unicamente dos pontos fixos q' e q'' . Estes pontos fixos, podem ser variados continuamente para dar as soluções vizinhas de (4.18).

Para uma partícula livre de massa m no espaço euclídeano, o Lagrangeano reduz-se a energia cinética $L = m\dot{q}^2/2$. As trajetórias são retas ligando q' e q'' , e a velocidade é $\dot{q} = |q'' - q'| / (t'' - t')$. Portanto, encontramos que:

$$R(q'', t''; q', t') = \frac{m}{2} \frac{(q'' - q')^2}{(t'' - t')}. \quad (4.21)$$

Observe a dependência quadrática da distância.

A variação de segunda-ordem embora raramente discutida, dá resposta a uma questão legítima: *A trajetória $\bar{q}$ é um mínimo, um máximo, ou algum outro extremo desta integral?* Este problema foi primeiro investigado por

Marston Morse entre 1920 e 1930, e agora tem o nome de "teorema de Morse"[33].

Considere uma trajetória na vizinhança de $\bar{q}$ que parte do mesmo ponto $q(t') = \bar{q}' = \bar{q}(t')$, mas com um momento levemente diferente $p' = \bar{p}' + \delta p'$. Se fizermos $q(t) = \bar{q}(t) + \delta q(t)$, podemos obter uma equação diferencial linear para $\delta q(t)$ expandindo a equação de Euler-Lagrange (4.18), até a primeira ordem em $\delta q(t)$.

$$L \cong L(\bar{q}, \dot{\bar{q}}, t) + \sum_i \left[\left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \right)_{\bar{q}_i} \delta q_i + \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right)_{\dot{\bar{q}}_i} \delta \dot{q}_i \right]. \quad (4.22)$$

Com a Lagrangeana expandida, a equação (4.18) fica:

$$\frac{d}{dt} \left\{ \frac{\partial}{\partial \dot{q}_j} \left[\sum_i \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta \dot{q}_i \right) \right] \right\} - \frac{\partial}{\partial q_j} \left[\sum_i \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \delta q_i + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta \dot{q}_i \right) \right] = 0. \quad (4.23)$$

Vamos aplicar a eq.(4.23) ao caso padrão, isto é, uma partícula de massa m sujeita a um potencial $V(q)$, cuja Lagrangeana é:

$$L = \sum_{j=1}^f \frac{m \dot{q}_j^2}{2} - \sum_{j \neq k} V(q_j, q_k). \quad (4.24)$$

obtemos então:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left\{ \frac{\partial}{\partial \dot{q}_j} \left[\sum_{i=1}^N \left(-\frac{\partial V}{\partial q_i} \delta q_i + m \dot{q}_i \delta \dot{q}_i \right) \right] \right\} - \frac{\partial}{\partial q_j} \left[\sum_{i=1}^N \left(-\frac{\partial V}{\partial q_i} \delta q_i + m \dot{q}_i \delta \dot{q}_i \right) \right] &= 0, \\ \frac{d}{dt} \left\{ \sum_i m \delta \dot{q}_i \right\} + \sum_{j \neq i} \frac{\partial^2 V}{\partial q_i \partial q_j} &= 0, \end{aligned}$$

$$m \frac{d}{dt} \left(d \frac{\delta q_i}{dt} \right) + \sum_{j=1}^f \frac{\partial^2 V}{\partial q_j \partial q_i} = 0,$$

$$m \frac{d^2}{dt^2} \delta q_i = - \sum_{j=1}^f \frac{\partial^2 V}{\partial q_j \partial q_i} \bigg|_{\bar{q}(t)} \quad (4.25)$$

Há f soluções independentes as quais são mais facilmente caracterizadas por suas condições iniciais $\delta p_i' = \delta_{ik}$, onde $k = 1, \dots, f$. A solução de (4.25) torna-se portanto, uma matriz (δq_k^i) onde a k -ésima coluna é a solução de (4.25) com $\delta q^l(t') = 0$ e $\delta \dot{q}^l(t') = 0$ para $l \neq k$, considerando que $\delta \dot{q}^k(t') = 1/m$; i. é., a k -ésima trajetória parte com um deslocamento igual a 1 no momento na k -ésima direção.

Se a integral de ação $R(q'', t''; q', t')$ é conhecida na vizinhança da trajetória $\bar{q}(t)$, a matriz δq_k^i pode ser calculada como segue: o momento inicial p' é dado por $p' = -\partial R / \partial q'$; se o ponto final q'' varia e t'' é mantido fixo, obtemos:

$$\delta p_i' = - \sum_l \frac{\partial^2 R}{\partial q_i' \partial q_l''} = \sum_l M_{il} \delta q_l''$$

abreviamos $\delta p' = M \delta q''$ de modo que $\delta q'' = M^{-1} \delta p'$, para podermos escrever $\delta q_k^i = M^{-1}$, lembrando que tomamos $\delta p_i' = 1$.

A matriz δq_k^i mostra que quando o intervalo (t', t'') é curto, e o potencial é suave próximo a q' , a partícula move como se fosse livre e podemos aplicar (4.21). Portanto, $M_{il} = \delta_{il} m / (t'' - t')$, e $M^{-1} = \delta_{ik} (t'' - t') / m$ claramente, partem de zero como esperamos, visto que $\delta q(t') = 0$. No entanto, quando t aumenta há uma série de tempos distintos $t' = t_0 < t_1 < \dots$ onde δq_k^i torna-se singular. Esses termos são chamados *conjugados a t'* , e correspondentemente, os pontos $\bar{q}(t_1)$, $\bar{q}(t_2)$, ... são chamados *conjugados a $\bar{q}(t') = q'$* .

Uma figura da trajetória $\bar{q}(t)$ e sua vizinhança mostra que o leque original de trajetórias parte em q' , podendo cortar-se umas às outras de q' a q'' , não somente uma mas ν vezes conforme a fig.(4.2). Cada vez que

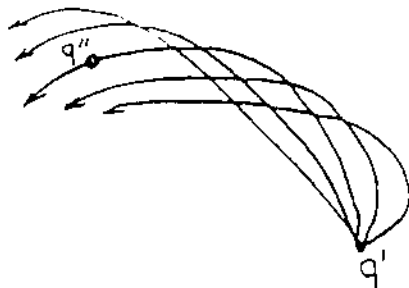


Figura 4.2: leque de trajetórias que parte de q' em t' .

isto acontece para a particular trajetória $\bar{q}$, chamamos este ponto de *ponto conjugado* de q' .

O principal resultado da teoria de Morse pode agora ser formulado: A segunda variação em torno de $\bar{q}(t)$ é uma forma quadrática no espaço dos deslocamentos $\delta q(t)$; se certas condições da continuidade do Lagrangeano $L(\dot{q}, q, t)$ são satisfeitas. A forma quadrática na eq.(4.25) pode ser diagonalizada, e pode se mostrar que ela tem um espectro regular o qual depende, certamente, do tempo t'' , assumido t' fixo.

O Teorema de Morse:

A segunda variação é positivo-definida para $t'' - t'$ suficientemente pequeno; quando $t'' - t'$ aumenta, a segunda variação adquire um autovalor negativo cada vez que t'' passa por um ponto conjugado.

Podemos agora responder a questão original. A variação da integral $\int L dt$ dá um mínimo se t'' é muito menor que o primeiro tempo t_1 conjugado a t' . Para $t'' > t_1$, a segunda variação não é mais positivo-definida; a trajetória $\bar{q}(t)$ permanece num ponto de sela do espaço de todos os caminhos possíveis; a ordem da instabilidade é dada pelo número de pontos conjugados entre t' e t'' .

4.3 O Propagador Semi-Clássico.

Podemos agora calcular o limite da integral de caminho (4.12) quando $\hbar \rightarrow 0$. N é tomado suficientemente grande de modo que cada passo temporal ϵ seja bem pequeno comparado aos tempos característicos das trajetórias clássicas.

Façamos então, $\bar{q}(t)$ ser uma solução da versão discretizada das equações (4.18) com as condições iniciais $\bar{q}(t') = q'$ e $\bar{q}(t'') = q''$. Vamos considerar um pequeno deslocamento $\delta q(t)$, mais uma vez somente nos tempos discretos. A soma finita no expoente de (4.12), é expandida em potências δq até a segunda ordem,

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^N \left[\frac{m}{2} \left(\frac{q_n - q_{n-1}}{\epsilon} \right)^2 - V \left(\frac{q_n + q_{n-1}}{2} \right) \right] = \\ \sum_{n=1}^N \left\{ \frac{m}{2} \left(\frac{q_n - q_{n-1}}{\epsilon} \right)^2_{\bar{q}} - V \left(\frac{q_n + q_{n-1}}{2} \right)_{\bar{q}} + m \left[\left(\frac{q_n - q_{n-1}}{\epsilon} \right)_{\bar{q}} - \frac{\partial V}{\partial q_n} \right] \delta q_n + \right. \\ \left. \frac{1}{2!} \left[\frac{m}{\epsilon^2} - \frac{\partial^2 V}{\partial q_n \partial q_j} \right] \delta q_n \delta q_j \right\}. \quad (4.26) \end{aligned}$$

O termo de ordem mais baixa dá a integral (4.19) na forma discreta. A primeira ordem pode ser manipulada e dá a versão discreta de (4.17). O expoente em (4.12) contém agora somente a função quadrática nos deslocamentos δq_j , junto com os termos de ordem mais baixa que representam a integral de ação ao longo da trajetória $\bar{q}(t)$. Todos os termos de ordem mais alta são ignorados; *a transição da mecânica quântica para a clássica toma lugar neste ponto ao negligenciarmos termos, exceto as funções quadráticas.* A integração em (4.12) é feita sobre os deslocamentos δq_j , cada um podendo variar de $-\infty$ a $+\infty$. Uma transformação linear ortogonal é usada para transformar a forma quadrática numa forma diagonal. A integral torna-se um produto de $f(N-1)$ integrais de Fresnel, cada uma na forma

$$\left(\frac{m}{2\pi\epsilon\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi \exp \left\{ \frac{im}{2\epsilon\hbar} \lambda \xi^2 \right\} = \frac{e^{i\pi \text{sign}(\lambda)/4}}{\sqrt{|\lambda|}}. \quad (4.27)$$

O cálculo de todas as integrais de acordo com (4.27) dá diretamente o produto de todos os autovalores para a matriz da forma quadrática em δq . Portanto, temos que computar o determinante desta matriz.

A integração sobre as flutuações quadráticas em torno da trajetória $\bar{q}(t)$ na integral de caminho de Feynman (4.12) dá, portanto, a seguinte aproximação para o propagador $K(q'', t''; q', t')$,

$$(2\pi i\hbar)^{-J/2} \left[\det \left(-\frac{\partial^2 R}{\partial q'' \partial q'} \right) \right]^{1/2} \exp \left[\frac{i}{\hbar} R(q'', t''; q', t') \right], \quad (4.28)$$

dado primeiro por Van Vleck em 1928.

Até aqui, não usamos nenhuma informação referente aos sinais dos autovalores para a segunda variação de $\int L dt$. A condição da fórmula (4.27) junto com o teorema de Morse mostra que podemos tomar o valor absoluto do determinante em (4.28); e que temos que diminuir de $\pi/2$ a fase para cada ponto conjugado entre q' e q'' ao longo da trajetória $\bar{q}(t)$.

A perda de fase pode ser interpretada como se a onda quântica de q' a q'' fosse refletida em uma parede perto de um ponto conjugado, esse fator $\pi/2$ é bem conhecido de problemas unidimensionais próximos ao ponto de retorno.

O propagador $\mathcal{K}$ para as extremidades fixas (q', t') e (q'', t'') pode levar a uma série de trajetórias clássicas. Cada trajetória contribui com um termo igual a (4.28). Portanto, conseguimos o resultado final

$$\mathcal{K} \cong \sum_{\text{traj. clas}} (2\pi i\hbar)^{-J/2} \left[\det \left(-\frac{\partial^2 R}{\partial q'' \partial q'} \right) \right]^{1/2} \exp \left[\frac{i}{\hbar} R(q'', t''; q', t') - \frac{\kappa\pi}{2} \right], \quad (4.29)$$

onde κ é o número de pontos conjugados.

Olhando para (4.29) vemos que cada trajetória gera uma onda com a fase $R(q'', t''; q', t')/\hbar$ corrigida pela ocorrência de cáusticas; a amplitude mede essencialmente a densidade das trajetórias vizinhas em torno de q'' comparada a sua densidade no ponto de partida q' .

4.4 A Função de Green.

A presente seção é devotada ao passo preliminar de transformar a fórmula de Van Vleck (4.28) do domínio do tempo para o domínio das frequências. Os termos "frequências" e "energia" serão usados permutavelmente, visto que estão relacionados pela equação de Planck, $E = h\omega$.

Olhando para (4.29) vemos que as informações acerca dos níveis de energia não estão explicitamente contidas em $\mathcal{K}$. Nós obtemos essas informações quando efetuamos a transformada de Fourier de $\mathcal{K}$ com relação ao tempo, obtendo dessa forma, a *função de Green* do propagador. A função de Green é útil no estabelecimento de relações entre a mecânica clássica e a mecânica quântica, sendo o sistema ergódico ou não. Temos então,

$$\mathcal{G}(q', q'', E) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^\infty dt e^{iEt/\hbar} \mathcal{K}(q', t'; q'', t''). \quad (4.30)$$

Devemos observar que a integração vai de 0 a t , pois o propagador depende de t' e t'' somente através da combinação $(t'' - t')$, porque a Hamiltoniana independe do tempo, além disso, temos que $\mathcal{K}$ tende a zero quando $t'' < t'$. Note que, a integração em (4.30) sempre converge se a energia E no expoente do integrando adquirir uma pequena parte imaginária positiva. Dada uma parte imaginária positiva, $\epsilon > 0$, de modo que $E \rightarrow E + i\epsilon$, a função de Green torna-se analítica para o lado direito de alguma abscissa no plano complexo $E + i\epsilon$. Esta analiticidade, nada tem a ver com a suavização dos campos externos na equação de Schroedinger. Dessa forma, as propriedades analíticas de $\mathcal{G}(q'', q', E)$ são garantidas com relação a E , mas nada igual pode ser assumido para a dependência em q'' e q' , neste estágio.

A função de Green é uma solução da equação de Schroedinger não-homogênea e estacionária:

$$\{E - \hat{H}(p'', q'')\} \mathcal{G}(q'', q', E) = \delta(q'' - q'). \quad (4.31)$$

Se o espectro E_j e as autofunções $\Psi_j(q)$ são conhecidos, podemos escrever uma solução explícita de (4.31),

$$\hat{H}(p, q)\Psi_j(q) = E_j\Psi_j(q); \quad (4.32)$$

por definição, o índice j é escolhido tal que $E_j \leq E_{j'}$, quando $j < j'$ e as funções com índices diferentes são ortonormais, i.e., $\int dq \Psi_j^*(q)\Psi_{j'}(q) = 0$ para $j \neq j'$. Finalmente, as autofunções são assumidas normalizadas; no caso de um espectro discreto, isto significa $\int dq |\Psi(q)|^2 = 1$. A completeza do espectro implica que

$$\mathcal{G}(q'', q', E) = \sum_j \frac{\Psi_j(q'')\Psi_j^*(q')}{E - E_j}; \quad (4.33)$$

O lado direito da eq.(4.33) contém uma soma sobre todos os níveis de energia que são numerados pelo índice j . A energia do j -ésimo nível é E_j e sua função de onda é dada por $\Psi_j(q')$. Se conhecermos a função de Green $\mathcal{G}$, podemos encontrar os níveis de energia determinando os pólos de $\mathcal{G}$ com relação a variável E . As correspondentes funções de onda são essencialmente os resíduos desses pólos.

É importante estar ciente do fato crucial que não há integral de caminho para a função de Green como a de Feynman dada em (4.12). O propagador satisfaz uma regra simples de composição: faça t ser algum tempo no intervalo (t', t'') , i.e., $t' < t < t''$, então:

$$\mathcal{K}(q'', t''; q', t') = \int dq \mathcal{K}(q'', t''; q, t) \mathcal{K}(q, t; q', t'). \quad (4.34)$$

É a existência dessa relação que é responsável pela integral de caminho de Feynman.

4.4.1 A Função de Green Semi-Clássica.

A aproximação semi-clássica para $\mathcal{G}(q'', q', t)$ é encontrada quando a fórmula de Van Vleck (4.29) é inserida em (4.30). O problema é então,

calcular a integral sobre o tempo t de 0 a ∞ e a energia de $-\infty$ a $+\infty$, e neste caso sempre há alguma dúvida acerca da interpretação desta integral, visto que uma pequena parte imaginária é adicionada a energia. Com algum trabalho obtemos que esta integral dá uma soma sobre todas as órbitas clássicas que vão de q' a q'' com energia total E .

A fórmula análoga a (4.29) para a função de Green ² é:

$$\bar{G} \cong \sum_{\text{traj. clas.}} \frac{2\pi}{(2\pi i \hbar)^{(J+1)/2}} \left[\det \left(-\frac{\partial^2 S}{\partial q'' \partial q'} \right) \right]^{1/2} \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(q'', q', E) - i\mu \frac{\pi}{2} \right], \quad (4.35)$$

onde μ é o número de pontos conjugados numa energia fixa E entre q' e q'' . Convém ressaltar aqui que a eq(4.29) só é válida para tempos curtos e que essa aproximação é estendida até $t \rightarrow \infty$ sem maiores justificativas. Assim, a própria validade de (4.35) é duvidosa!

4.5 Caos versus integrabilidade.

A progressão da integral de caminho de Feynman (4.12), através da aproximação de Van Vleck (4.21) para a função de Green (4.35) é fácil de delinear, mas temos que caminhar com cautela. Há muitos pontos onde surgem dúvidas e os possíveis erros não são bem controlados. Mesmo a aplicação para um problema típico integrável requer aproximações adicionais (p. ex. partícula num poço de potencial $V(x)$). Contudo, há um consenso geral que todos estes passos incertos produzem uma aproximação consistente até a ordem $\hbar^2$, ou seja, esses passos são corretos para os termos de ordem $\hbar^0$ e $\hbar^1$. Por outro lado, tem se aperfeiçoado pouco na tentativa de calcular os termos em $\hbar^2$ e ordens mais altas.

²Observe que na expressão do propagador $\mathcal{K}$, tínhamos a integral de ação R como função da posição e tempo final e posição e tempo inicial. No caso da função de Green, é interessante expressá-la em termos da ação $S(q'', q', E)$. Com alguma manipulação matemática podemos verificar que existe a relação $S(q'', q', E) = R(q'' t'' q' t') + E(t'' - t')$.

Para se efetuar a soma (4.35) é necessário um bom entendimento das trajetórias clássicas. Tal boa compreensão é possível somente para sistemas integráveis até o presente momento; nesse caso, a função de Green dá nada mais que a *aproximação WKB*, uma vez que possamos fazer uma separação de variáveis. Se o problema é integrável, mas não separável, o procedimento torna-se mais complicado. Em todos esses casos, uma solução direta da equação de Schroedinger parece mais apropriada, pois é difícil calcular a soma sobre todas as trajetórias clássicas.

Se o sistema não é integrável, a situação muda completamente. Nenhum método WKB é disponível para ir ao limite clássico; a fórmula (4.29) para o propagador ou (4.35) para a função de Green é nossa aproximação geral, com a condição de que temos que obter todas as trajetórias clássicas de q' a q'' , ou num dado tempo t , ou numa dada energia fixa E .

O comprimento de uma trajetória é medido, mais naturalmente, em termos da integral de ação

$$S = \int_{q'}^{q''} (J_1 d\varphi_1 + \cdots + J_f d\varphi_f) = \sum_{j=1}^f (2n_j\pi + \varphi_j) J_j,$$

onde as direções de movimento em torno do toro tem sido escolhida tal que $n_j \geq 0$. O número total $N(\sigma)$ de trajetórias de q' a q'' com $S \geq \sigma$ cresce com a potência $(\sigma/2\pi J)^f$ onde J é algum valor característico das integrais de ação J_j . Quando vamos para o extremo de "*hard chaos*", $N(\sigma)$ aumenta exponencialmente com σ ; a taxa exponencial de aumento é chamada *entropia topológica do sistema Hamiltoniano*. Em tais sistemas, todas as trajetórias são instáveis, ou seja, as soluções não-triviais das equações linearizadas (4.25) aumenta (ou diminui) exponencialmente com o tempo; sua razão de aumento é chamada de expoente de Lyapunov. Apesar do *hard chaos* não ser uma condição genérica em sistemas Hamiltonianos, ele é estruturalmente estável mesmo sob pequenas perturbações. Os sistemas integráveis são instáveis neste aspecto, ou seja, sua estrutura se altera quando é perturbado. Essas alterações são descritas pelo *teorema de KAM* [7]. Os sistemas Hamiltonianos genéricos parecem ser uma mistura de *hard chaos* e integrabilidade [34], como discutido no capítulo 3.

Na próxima seção olhamos para o problema de fazer a transição da mecânica clássica para a mecânica quântica numa porção caótica do espaço de fase. A mesma aproximação geral, contudo, pode também ser usada na porção integrável, embora não dê nenhum resultado novo.

4.6 A Fórmula Geral do Traço.

Até agora, obtemos a fórmula (4.29) que dá a aproximação clássica para $\mathcal{K}$, e a fórmula (4.35) dá a aproximação clássica para $\mathcal{G}$, mas em geral, elas são muito complicadas para uso prático em sistemas caóticos, pois nosso conhecimento das trajetórias clássicas nesses sistemas ainda é muito escasso.

Para muitas aplicações, $\mathcal{K}$ ou $\mathcal{G}$ dá mais do que precisamos saber; por exemplo, queremos encontrar os níveis de energia sem nos preocuparmos com os autoestados. Nesse caso temos que calcular uma integral sobre $\mathcal{K}$ ou $\mathcal{G}$ onde a coordenada $q = q' = q''$ cobre todo o espaço, isto é, tomamos o traço de $\mathcal{G}$. Usando (4.33) temos que o traço de $\mathcal{G}$ será:

$$g(E) = \int d^f q \mathcal{G}(q, q, E) = \sum_j \frac{1}{E - E_j}. \quad (4.36)$$

Uma vez que obtemos uma função de Green Clássica (4.35), então os níveis de energia (mas não os autoestados) podem ser obtidos olhando-se os pólos no traço aproximado $\tilde{g}(E)$. O passo fundamental no cálculo do traço de (4.35) é a integração sobre o termo $[\det(-\partial^2 S / \partial q'' \partial q')]^{1/2}$, na soma sobre todas as trajetórias. Se o ponto de partida q' e o ponto final q'' coincidem em q , e q é variado sobre todo o espaço, é interessante estarmos na mesma família de trajetórias,³ ou seja, trajetórias com $p' = p''$, conforme será mostrado. O argumento de fase estacionária é usado aqui, com relação a variação de q : as regiões onde a primeira variação de $S(q, q, E)$ com relação a q vai a zero são as que mais contribuem para a integral sobre q , ou seja:

³Embora $q = q' = q''$, encontramos que $p' \neq p''$, em geral.

$$\left(\frac{\partial S(q'', q', E)}{\partial q''} + \frac{\partial S(q'', q', E)}{\partial q'} \right)_{q''=q'=q} = p'' - p' = 0. \quad (4.37)$$

Portanto as trajetórias as quais não somente fecham em $q = q' = q''$, mas também suavemente com $p' = p''$, são as que mais contribuem. Essas trajetórias são as chamadas **órbitas periódicas**.

A integral sobre (4.35) é agora trabalhada, expandindo-se a fase $S(q, q, E)$ na vizinhança de uma órbita periódica, para termos quadráticos no deslocamento δq , enquanto calculamos a amplitude na órbita periódica ($\mathcal{OP}$). Supomos um sistema com f graus de liberdade, nesse caso, a integração sobre $q' = q'' = q$ é mais convenientemente feita, introduzindo-se um sistema de coordenadas, onde q_1 varia ao longo da órbita periódica e os restantes q_2 e q_3 são perpendiculares à órbita periódica.

Expandimos, então a fase para um ponto $\bar{q}$ na órbita periódica:

$$S(q, q, E) = S(\bar{q}, \bar{q}, E) + \left(\frac{\partial S}{\partial q'} + \frac{\partial S}{\partial q''} \right)_{q'=q''=\bar{q}} \delta q + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 S}{\partial^2 q'} + 2 \frac{\partial^2 S}{\partial q' \partial q''} + \frac{\partial^2 S}{\partial^2 q''} \right)_{q'=q''=\bar{q}} \delta q \delta q, \quad (4.38)$$

onde δq tem duas componentes $q_2 - \bar{q}_2$ e $q_3 - \bar{q}_3$. De acordo com (4.37) os termos lineares vão a zero ao longo da órbita periódica e assumimos que o termo quadrático é singular somente para valores de $\bar{q}$ isolados.

A fórmula de Fresnel (4.27) é usada mais uma vez para dar a $\tilde{g}(E)$ uma soma sobre as $\mathcal{OP}$ com a contribuição individual,

$$\frac{-\frac{1}{\hbar} \oint d\bar{q} \left[\det \left(-\frac{\partial^2 S}{\partial q' \partial q''} \right) \right]^{\frac{1}{2}} \exp \left[\frac{i}{\hbar} S(E) - i\mu \frac{\pi}{2} \pm i\frac{\pi}{4} \pm i\frac{\pi}{4} \right]}{\left(\det \left| \frac{\partial^2 S}{\partial q' \partial q''} + 2 \frac{\partial^2 S}{\partial q' \partial q''} + \frac{\partial^2 S}{\partial q'' \partial q''} \right|_{2,3} \right)^{\frac{1}{2}}} \quad (4.39)$$

Onde os sinais duplos referem-se aos sinais dos autovalores para o termo quadrático em (4.38) e os índices 2,3 no último determinante referem-se as variáveis perpendiculares à órbita periódica em algum ponto $\bar{q}$.

Vamos mostrar que os dois determinantes podem ser reduzidos a uma expressão para a amplitude e que as várias fases somam-se para dar algo mais compreensível.

Para reduzirmos a amplitude vamos imaginar uma seção de Poincaré, $(\mathcal{SP})$ através do ponto $(\bar{q}, \bar{p})$, ou seja, uma variedade de $2(f-1)$ dimensões na superfície de energia constante do espaço de fase, cortando a órbita periódica transversalmente em $(\bar{q}, \bar{p})$. O mapa da $\mathcal{SP}$ tem um ponto fixo em $(\bar{q}, \bar{p})$ e queremos calcular este mapa até a primeira ordem no deslocamento $(\delta q, \delta p)$,

$$\begin{aligned}\delta q'' &= A\delta q' + B\delta p' \\ \delta p'' &= C\delta q' + D\delta p',\end{aligned}\tag{4.40}$$

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

Partindo das fórmulas gerais:

$$p' = -\frac{\partial S(q', q'', E)}{\partial q'} \quad \text{e} \quad p'' = \frac{\partial S(q', q'', E)}{\partial q''},\tag{4.41}$$

a transformação de preservação de área Θ pode ser escrita como:

$$\begin{aligned}\delta p'_i &= -\sum_{j=2}^3 \frac{\partial^2 S}{\partial q'_i \partial q''_j} \delta q'_j - \sum_{j=2}^3 \frac{\partial^2 S}{\partial q'_i \partial q''_j} \delta q''_j, \\ \delta p''_i &= \sum_{j=2}^3 \frac{\partial^2 S}{\partial q''_i \partial q'_j} \delta q'_j + \sum_{j=2}^3 \frac{\partial^2 S}{\partial q''_i \partial q'_j} \delta q''_j,\end{aligned}\tag{4.42}$$

onde o índice i assume os valores 2 e 3. Em termos das correspondentes matrizes 2×2

$$a = \frac{\partial^2 S}{\partial^2 q'}, \quad b = \frac{\partial^2 S}{\partial q' \partial q''}, \quad c = \frac{\partial^2 S}{\partial^2 q''}; \quad (4.43)$$

as equações (4.42) podem ser escritas mais simplesmente como:

$$\begin{aligned} \delta p' &= -a \delta q' - b \delta q'' \\ \delta p'' &= b^\dagger \delta q' + c \delta q''. \end{aligned} \quad (4.44)$$

onde $b^\dagger$ é a transposta de b . Comparando (4.44) e (4.40) teremos:

$$\begin{aligned} A &= -b^{-1}a, & B &= -b^{-1}, \\ C &= b^\dagger - cb^{-1}a, & D &= -cb^{-1}. \end{aligned} \quad (4.45)$$

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

Os autovalores de Θ são dados pelas raízes do determinante característico,

$$F(\lambda) = \det \begin{vmatrix} A - \lambda I & B \\ C & D - \lambda I \end{vmatrix} \quad (4.46)$$

Após inserirmos as expressões (4.45) em (4.46), adicionamos $-c$ vezes a primeira linha na segunda linha. Deste modo obtemos:

$$F(\lambda) = \det \begin{vmatrix} -b^{-1} - \lambda I & -b^{-1} \\ b^\dagger + \lambda c & -\lambda I \end{vmatrix}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{|b|} \begin{vmatrix} -a - \lambda b & -I \\ b^\dagger + \lambda c & -\lambda I \end{vmatrix} \\
&= \frac{1}{|b|} \begin{vmatrix} -a - \lambda b & -I \\ b^\dagger + \lambda a + \lambda c + \lambda^2 b & 0 \end{vmatrix} \\
F(\lambda) &= \frac{\det |b^\dagger + \lambda a + \lambda c + \lambda^2 b|}{\det |b|} \tag{4.47}
\end{aligned}$$

Ao compararmos esta última expressão com a amplitude em (4.39), vemos que a razão dos dois determinantes em (4.39) é exatamente igual a $F(1)$. Os autovalores λ da matriz monodromia dependem do caráter local da SP na vizinhança da órbita periódica; mas as características mais importantes podem ser vistas diretamente da expressão (4.47). Dado que o polinômio $F(\lambda)$ é real, seus zeros aparecem em pares de conjugados complexos. Ainda mais, se λ é uma solução de $F(\lambda) = 0$, então $F(1/\lambda) = 0$, pois as matrizes a e c são simétricas, enquanto $b^\dagger$ é a transposta de b , e um determinante é invariante sob transposição. Assim, podemos distinguir os três casos mais importantes para as aplicações com 2 graus de liberdade:

1. $F(\lambda)$ tem duas raízes reais e positivas, $\lambda = e^u$ e $\lambda = e^{-u}$; a órbita periódica é instável (hiperbólica) fig(2.6b), e encontramos que:

$$F(1) = -4 \sinh^2 \frac{u}{2} \tag{4.48}$$

2. $F(\lambda)$ tem duas raízes no círculo unitário, $\lambda = e^{iv}$ e $\lambda = e^{-iv}$; a órbita periódica é estável fig(2.6a), e encontramos que:

$$F(1) = 4 \sin^2 \frac{v}{2} \tag{4.49}$$

3. $F(\lambda)$ tem duas raízes reais e negativas, $\lambda = e^{-u}$ e $\lambda = -e^{-u}$; a órbita periódica é instável (hiperbólica inversa) fig(2.6c), e encontramos que:

$$F(1) = 4 \cosh^2 \frac{u}{2} \quad (4.50)$$

Os dois casos limite $\lambda = 1 = 1/\lambda$, correspondem aos mapas parabólicos da $\mathcal{SP}$ na vizinhança da $\mathcal{OP}$, eles indicam que o sistema é pelo menos localmente integrável.

As expressões (4.48) a (4.50) mostram explicitamente que a amplitude $F(1)$ é a mesma para todos os pontos ao longo da $\mathcal{OP}$. Uma vez que isso é verdadeiro também para a fase, a integração sobre $\bar{q}$ pode ser feita para dar o período primitivo da $\mathcal{OP}$. Pode ser que a órbita periódica consiste em repetir n vezes uma órbita periódica mais curta; a integração em (4.35) contudo, surge da integração (4.36) sobre todas as coordenadas de posição de modo que T_0 é o período total T dividido por n . A integral de ação $S(E)$ na fase é obtida da repetição n vezes a $\mathcal{OP}$ primitiva.

Antes de escrevermos a expressão final para $\bar{g}$ será necessário discutir os sinais duplos em (4.39) juntamente com as condições de estabilidade da órbita periódica. Vamos considerar, novamente o caso de dois graus de liberdade, e assim vamos ter $\exp(\pm i\pi/4 + i\pi/4)$ no lugar de $\exp(\pm i\pi/4 \pm i\pi/4)$ e o determinante no denominador de (4.39) só terá as segundas derivadas com relação a q_2 , [1].

Se a órbita periódica é estável, temos de (4.49) que $F(1) > 0$. O número de pontos conjugados ao longo da órbita é par ou ímpar de acordo com

$$\frac{\partial^2 S}{\partial q_2' \partial q_2''} < 0 \quad \text{ou} \quad > 0,$$

e portanto,

$$\frac{\partial^2 S}{\partial q_2' \partial q_2''} + \frac{\partial^2 S}{\partial q_2' \partial q_2''} + \frac{\partial^2 S}{\partial q_2' \partial q_2''} < 0 \quad \text{ou} \quad > 0.$$

A última condição é responsável por um fator $\exp(1/4i\pi \mp 1/4i\pi)$. A perda de fase devida ao ponto conjugado é $+1, -i, -1$ e $+i$ de acordo com o número de pontos conjugados igual a 0, 1, 2 ou 3 e portanto, teremos $\mu \rightarrow \nu$ para $\mu=0$ e 2 e $\mu \rightarrow \nu + 1$ para $\mu=1$ e 3, a fim de escrevermos 4.39 de uma forma mais compacta.

Para uma órbita periódica instável em um sistema com dois graus de liberdade. De acordo com (4.48), temos $F(1) < 0$. O número de pontos conjugados ao longo da órbita é par ou ímpar de acordo com

$$\frac{\partial^2 S}{\partial q_2' \partial q_2''} < 0 \quad \text{ou} \quad > 0$$

e portanto,

$$\frac{\partial^2 S}{\partial q_2' \partial q_2'} + 2 \frac{\partial^2 S}{\partial q_2' \partial q_2''} + \frac{\partial^2 S}{\partial q_2'' \partial q_2''} < 0 \quad \text{ou} \quad > 0.$$

A última condição é responsável por um fator $\exp(i\pi/4 \pm i\pi/4)$ de acordo com (4.39), considerando que a perda de fase devido aos pontos conjugados é igual a $\pi/2$ vezes o número de pontos conjugados. Então, em todos os casos o fator de amplitude para uma órbita periódica instável é puramente imaginário. De forma que analogamente ao caso anterior, tomamos $\nu \rightarrow -\mu + 1$ para $\mu = 0$ e 2 e $\nu \rightarrow \mu$ para $\mu = 1$ e 3.

Resumindo então, nossa convenção, teremos que: $\nu \rightarrow \mu$ para $\mu = 1$ e 3, para a órbita periódica estável e $\mu=2$ e 4 para a órbita periódica instável; e $\nu \rightarrow \mu - 1$ para $\mu = 2$ e 4 para a órbita estável e $\mu = 1$ e 3 para a instável.

Finalmente o traço completo para $\tilde{g}(E)$ torna-se então,

$$\tilde{g}(E) = \tilde{g}_0(E) + \frac{1}{i\hbar} \sum_{\mathcal{OP}} \frac{T}{2 \left| \sin \frac{\nu}{2}, \sinh \frac{\nu}{2}, \cosh \frac{\nu}{2} \right|} e^{\frac{i}{\hbar} S(E) - i\nu \frac{\pi}{2}}. \quad (4.51)$$

onde o denominador é $\sin v/2$, $\sinh u/2$ ou $\cosh u/2$ quando a órbita periódica é estável, hiperbólica ou hiperbólica inversa, respectivamente.

O primeiro termo à direita $\tilde{g}_0(E)$, vem daquelas trajetórias de comprimento zero (definida na seção 7.1) e corresponde a distribuição de Thomas-Fermi de estados em um átomo, ou mais geralmente, a fórmula de Weyl para a densidade de estados assintótica com relação a sua energia. A fórmula geral do traço (4.51) é bastante simples na aparência, uma vez que ela envolve somente quantidades clássicas bem entendidas, como o expoente de estabilidade u ou v , dependendo se a órbita é estável ou instável, o período da órbita primitiva T , a integral de ação ao longo da órbita periódica $S(E)$ e o número de pontos conjugados ν .

A soma sobre todas as órbitas periódicas de um sistema caótico, não é trivial, como já foi discutido na seção 4.4.5. Vamos contornar esta situação e supor que conhecemos uma particular órbita periódica de um dado sistema. Conhecida esta órbita, poderemos indagar qual a sua contribuição para $\tilde{g}(E)$.

4.7 Somando repetições de órbitas estáveis

A $\sum_{\mathcal{OP}}$ pode ser dividida em $\sum_{opp} \sum_{n=1}^{\infty}$, onde a primeira soma é feita sobre “órbitas primitivas”, ou seja, órbitas distintas, e a segunda sobre repetições de cada órbita (n voltas sobre a mesma órbita primitiva). Vamos ver como fica a soma parcial sobre as repetições de uma órbita periódica primitiva.

$$\frac{T_0}{i\hbar} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2|\sin(nv/2)|} \exp\left(\frac{inS}{\hbar} - \frac{inv}{2}\right) \quad (4.52)$$

Lembrando que ν , o número de pontos conjugados é igual a parte

inteira de v/π , então o termo $inv/2$ cancela o módulo no $\sin(nv/2)$ no denominador de (4.52), que fica então:

$$\frac{T_0}{i\hbar} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2 \sin(nv/2)} \exp \left(\frac{inS}{\hbar} - \frac{inv}{2} \right) \quad (4.53)$$

Usamos a igualdade:

$$\frac{1}{2i \sin(nv/2)} = \exp(-inu/2) \sum_{k=0}^{\infty} \exp(-inku) \quad (4.54)$$

e a equação (4.53), fica então:

$$\frac{T_0}{i\hbar} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \exp \left[in \left(\frac{S}{\hbar} \right) - \left(k + \frac{1}{2} \right) u \right]. \quad (4.55)$$

A eq.(4.55) pode ser considerada uma progressão geométrica de forma que:

$$\frac{T_0}{i\hbar} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\exp \left\{ i \left[\frac{S}{\hbar} - \left(k + \frac{1}{2} \right) u \right] \right\}}{1 - \exp \left\{ i \left[\frac{S}{\hbar} - \left(k + \frac{1}{2} \right) u \right] \right\}}. \quad (4.56)$$

A função resposta $\tilde{g}(E)$ tem um pólo simples de resíduo 1 em uma energia que é dada pela condição:

$$S(E) = 2\pi\hbar \left[n + \left(k + \frac{1}{2} \right) \frac{u}{2\pi} \right]. \quad (4.57)$$

para cada órbita periódica estável. Em outras palavras, a densidade de estados tem uma função singular δ de intensidade 1 para cada órbita periódica a qual satisfaça (4.57). Esta condição parece ser a generalização da regra de Bohr e Sommerfeld para sistemas mecânicos os quais não são multiplamente

periódicos, ou seja, sistemas os quais não podem ser desacoplados em sistemas de um grau de liberdade cada, com a ajuda de apropriadas constantes de movimento, mas depende do ângulo de estabilidade da órbita. Embora muito elegante, esta última relação mostrou-se inadequada, pois aparecem muitos pólos espúrios que não correspondem aos níveis reais.

4.7.1 Somando repetições de órbitas instáveis

Calculamos agora a contribuição de uma particular órbita periódica instável para $\tilde{g}(E)$, quando ela é percorrida uma, duas, ... vezes. O número de pontos conjugados é simplesmente proporcional ao número de períodos. Então se são ν pontos conjugados para um período simples, haverá $n\nu$ pontos conjugados para n períodos. Similarmente, a integral de ação será nS e o expoente de instabilidade $n\nu$, se S e ν são respectivamente, a integral de ação e o expoente de instabilidade para um período simples.

A contribuição de uma órbita periódica instável para $\tilde{g}(E)$ é dada pela soma:

$$\frac{T}{i\hbar} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2|\sinh(u/2)|} \exp \left[in \left(\frac{S}{\hbar} - \frac{\nu\pi}{2} \right) \right]. \quad (4.58)$$

O cálculo aqui é semelhante ao da contribuição de órbitas estáveis. Para $u > 0$, (4.59) é uma série geométrica convergente que pode ser transformada exatamente como (4.57) em:

$$\begin{aligned} & \frac{T_0}{i\hbar} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\exp \left\{ in \left[\frac{S}{\hbar} - \frac{\nu\pi}{2} \right] \right\}}{\exp(u/2)[1 - \exp(-u)]} \\ & \frac{T_0}{i\hbar} \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^k \exp \{ in [S/\hbar - \nu\pi/2 + iu/2 + iku] \} \\ & \frac{T_0}{i\hbar} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{\exp \{ i [S/\hbar - \nu\pi/2 + iu(1/2 + k)] \}}{1 - \exp \{ i [S/\hbar - \nu\pi/2 + iu(1/2 + k)] \}} \end{aligned} \quad (4.59)$$

A função resposta $\tilde{g}(E)$ tem pólos simples de resíduo 1, mas não no eixo real da energia. Se nós calcularmos a densidade de estados ao longo do eixo de energia real [35] encontramos uma série de picos alargados. Seus máximos estão localizados em:

$$S = 2\pi\hbar(n + \nu/4) \quad (4.60)$$

e sua largura é dada por $u\hbar$, i.é., a distância dos dois pontos ao longo do eixo S onde tomamos a metade do valor do pico da Lorentziana. O comprimento do pico dividido por sua largura é dado por $u/2\pi$.

Encontramos então, a seguinte situação: órbitas periódicas estáveis dão lugar a singularidades (funções δ) na densidade semi-clássica de estados nas energias que são dadas pela condição (4.57), ao passo que as órbitas periódicas instáveis dão picos alargados, cujos máximos são dados pela condição (4.60). Contudo, os exemplos de Gutzwiller [35], mostram que todos os autoestados da equação de Schroedinger correspondem somente às funções δ , não ao "background" contínuo. Parece, contudo, que o "background" não pode ser negligenciado se o sistema mecânico tem todas as órbitas periódicas instáveis.

Esta conclusão é certamente, muito insatisfatória pois ela não nos deixa formular uma regra simples pela qual poderíamos obter os autovalores aproximados da energia da densidade semi-clássica de estados. Por outro lado, mesmo os picos suavizados associados com órbitas periódicas instáveis são bem definidos, à medida que o ângulo de estabilidade, u é pequeno comparado a 2π .

Outro ponto onde um grande número de questões são levantadas é que ao assumirmos uma órbita periódica estável *isolada*, para uma energia fixa, estamos indo contra sua natureza, pois todas as órbitas periódicas estáveis ou estão circundadas por um canal cheio de toros invariantes concêntricos ou residem num toro invariante numa região integrável. Nesse último caso, elas são parabólicas e ν toma o valor de 0 ou π e nesses casos a fórmula não é aplicável. Este caso foi estudado por Miller [36].

Nós poderíamos parar neste ponto, uma vez que os ingredientes mais

relevantes foram mencionados, mas algumas considerações darão a *FGT* uma melhor perspectiva.

4.7.2 Simetrias discretas.

Uma Hamiltoniana com um grupo de simetrias, como rotação, translação, tem correspondentes constantes de movimento, tal como um momento angular ou linear. As simetrias discretas, contudo, tal como reflexão no plano ou inversão através do ponto não ajudam na integração das equações de movimento. Mas em Mecânica Quântica, tais simetrias correspondem a operadores que comutam com a Hamiltoniana; as autofunções assim como a função de Green podem ser reduzidas dessa maneira. Como um exemplo, considere uma partícula no espaço Euclidiano bidimensional movendo-se em um potencial $V(x, y)$ onde $V(x, y) = V(-x, y)$. As autofunções podem ser pares ou ímpares sob a reflexão $x \rightarrow x' = -x$, $y \rightarrow y' = y$, ou seja, $\hat{X}\Psi(x, y) = \Psi(-x, y) = \pm\Psi(x, y)$. A função de Green (4.33) agora consiste dos termos $\mathcal{G} = \mathcal{G}_+ + \mathcal{G}_-$, onde $\mathcal{G}_\pm$ tem a mesma forma que $\mathcal{G}$ em (4.33) com a soma restrita a autofunções pares (ímpares). Estas duas funções parciais são definidas por:

$$\mathcal{G}_\pm(x'', y''; x', y'; E) = \frac{1}{2} \left[\mathcal{G}(x'', y''; x', y'; E) \pm \mathcal{G}(-x'', y''; x', y'; E) \right]. \quad (4.61)$$

O cálculo do traço é feito exatamente como em (4.36) integrando

$$\int \int dx dy \mathcal{G}_\pm(x, y; x, y; E) = g_\pm(E).$$

Nós inserimos mais uma vez a fórmula (4.35), e integramos cada termo separadamente. O primeiro termo no lado direito é calculado como antes e leva à órbita periódica por causa da condição (4.37) da fase estacionária. O

mesmo argumento é aplicado ao segundo termo em (4.61) e dá uma condição estranha:

$$\left(\frac{\partial S(-x'', y''; x', y'; E)}{\partial x''} + \frac{\partial S(-x'', y''; x', y'; E)}{\partial x'} \right)_{x'', y''=x', y'=xy} = 0. \quad (4.62)$$

Com uma equação análoga para a componente y . A ação é calculada não de (x, y) voltando para (x, y) , mas de (x, y) para $(-x, y)$. O primeiro termo em (4.62) pode ser escrito como:

$$-\frac{\partial S(-x'', x'; x', y'; E)}{\partial(-x'')} = -p_x',$$

enquanto que o segundo termo em (4.62) é $-p_x'$.

Em outras palavras, a trajetória vai de (x, y) para seu ponto especular $(-x, y)$, e a componente x do momento é oposta à componente x do momento em (x, y) ; a componente y do momento é a mesma nos dois pontos fixos. A trajetória não se fecha, mas seus pontos mantêm a simetria de reflexão em ambas as posições e momentos, isto é, as órbitas periódicas contribuem também com a metade de seus períodos para a densidade de níveis, se elas são periódicas sob estas transformações de simetria [37].

4.8 Aplicabilidade da Fórmula de Gutzwiller

A função de Green de um sistema mecânico quântico foi aproximada com a ajuda de grandezas do correspondente sistema clássico, numa série de três artigos de Gutzwiller [38],[39], [35]. Mostrou-se que todos os bem conhecidos resultados do WKB para estados ligados podem ser obtidos desta maneira sem hipóteses adicionais. No último destes trabalhos, o conceito de densidade semi-clássica por unidade de intervalo de energia foi introduzido e

testado para uma partícula sujeita a um potencial esfericamente simétrico. Pode-se mostrar que as órbitas periódicas sozinhas determinam esta densidade de estados e são portanto, responsáveis pela ocorrência de estados estacionários, isto é, regiões de alta densidade ao longo do eixo de energia. No trabalho de 1971, [1] Gutzwiller estende esses conceitos para partículas em um potencial onde nem a equação de Schroedinger nem as equações clássicas correspondentes podem ser separadas. (Um elétron próximo a uma impureza doadora de um semicondutor.)

Partindo da analogia entre o movimento de átomos e o movimento de partículas no bilhar de Sinai, Zaslavski em 1977 [40] encontrou regras de quantização que determinam a distribuição estatística dos níveis de energia, quando a energia E é tomada maior que a energia crítica ε_c , violando, assim, as integrais de movimento e tornando as trajetórias estocásticas.

Apesar desses resultados favoráveis, Wintgen [37] começa seu trabalho de 1988 afirmando que "... pouco se sabe sobre a aplicabilidade do método. Gutzwiller aplicou a teoria ao problema anisotrópico de Kepler, que é classicamente caótico, usando um esquema de codificação e incluindo assim, todas as órbitas periódicas do sistema. Apesar dos autovalores concordarem bem com os resultados quânticos, não é possível assegurar que o método funciona quando esquemas de codificação não são possíveis e somente as órbitas periódicas mais simples são conhecidas..." Neste trabalho, Wintgen aplica a fórmula do traço para calcular pela primeira vez, uma densidade de estados suavizada para um sistema Hamiltoniano cujo movimento clássico é caótico. O espectro quântico exato foi suavizado e comparado ao obtido da fórmula de Gutzwiller.

Como consequência destes trabalhos, poderíamos estar aptos a obter órbitas periódicas clássicas das correlações de longo alcance da sequência de autovalores quânticos, e isto, de fato, tem sido demonstrado [32], [41]. O que *falta* é uma demonstração da validade e precisão da teoria de Gutzwiller para correlações de curto-alcance, ou seja, autoestados individuais.

Esforçando-se para obter autovalores quânticos para sistemas caóticos de órbitas periódicas clássicas, trabalhos mais recentes de Wintgen [42] encaram (pelo menos) dois problemas sérios: a fórmula geral do traço não converge para energias reais e os autovalores computados não são reais.

— O primeiro problema é causado pela proliferação exponencial de órbitas

periódicas para sistemas classicamente caóticos e requer uma suavização da densidade de estados ou uma continuação analítica da teoria.

— O segundo problema poderá ser superado apelando-se para as funções zeta de Riemann e a Forma do Traço de Selberg [42].

Não poderíamos terminar este capítulo “Caologia Quântica”, sem pelo menos citar outra importante contribuição das órbitas periódicas para a aproximação semiclássica das autofunções de um sistema classicamente caótico. Órbitas periódicas instáveis induzem “*scars*” (cicatrizes) em algumas funções de onda. As cicatrizes coalescem, cada vez mais em torno da órbita periódica, quando $\hbar \rightarrow 0$. Estas são novas implicações da teoria de órbitas-periódicas para as autofunções de sistemas caóticos [43]. Deixamos para os mais interessados algumas referências bem recentes, [44], [45], [46].

Capítulo 5

Quebra de Simetrias nas Seções de Poincaré

Até agora estivemos preocupados em entender as propriedades gerais dos sistemas dinâmicos, partindo daí, para entender as propriedades dos sistemas Hamiltonianos. Procuramos entender as ferramentas de que dispomos para manusear os efeitos de difícil compreensão, que surgem à medida que o sistema que estamos trabalhando já não é integrável. Nesse caminho tivemos oportunidade de visualizar o *caos clássico*, através das seções de Poincaré e como as órbitas periódicas são demasiadamente importantes, quando tomamos o limite semiclássico de um sistema caótico. O que vimos, nos dá base para partirmos para um estudo mais específico. Nos restringiremos, a partir daqui, ao objetivo desta dissertação, onde nos propomos a quebrar as simetrias do potencial NELSON, e ver como se alteram as principais famílias de órbitas periódicas e o respectivo espectro quântico. Nesses próximos capítulos, nos limitamos a mostrar os resultados obtidos e analisá-los à luz da teoria contida nos capítulos anteriores.

5.1 O Potencial Nelson e sua generalização

Para um sistema Hamiltoniano com dois graus de liberdade, em geral, somente uma integral é conhecida: a Hamiltoniana $H(q_1, q_2, p_1, p_2)$, portanto, o sistema é geralmente não-integrável. Não podemos resolvê-lo analiticamente e escrever uma solução geral explícita. Apesar disso, o problema pode ser atacado numericamente. Consideramos o movimento de um ponto material de massa unitária ($m = 1$), em um plano bidimensional $V(x, y)$:

$$\ddot{x} = -\frac{\partial V}{\partial x}, \quad \ddot{y} = -\frac{\partial V}{\partial y}. \quad (5.1)$$

Se graficarmos x e y como coordenadas horizontais em um espaço ordinário e V como coordenada vertical, então $V(x, y)$ representa uma superfície, e as equações (5.1) descrevem aproximadamente, o movimento de uma bolinha rígida nesta superfície. A forma Hamiltoniana do problema é :

$$q_1 = x, \quad q_2 = y, \quad p_1 = \dot{x}, \quad p_2 = \dot{y}, \quad (5.2)$$

$$H = \frac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2) + V(q_1, q_2). \quad (5.3)$$

O potencial V determina o tipo de superfície por onde a bolinha passeia. Tomando V de forma polinomial, vemos que se este polinômio for de segunda ordem somente, as equações de movimento (5.1) são lineares, e o problema é trivialmente integrável. Portanto, deveríamos usar um polinômio de grau 3, pelo menos, para produzir um problema não-trivial. Isso já é suficiente para reproduzir todas as características do caso mais geral, como por exemplo, o potencial de Hénon-Heiles. Aproveitando os resultados de uma extensiva investigação numérica das famílias de órbitas periódicas, bifurcações e simetrias, [3], [47], [4], vamos estudar as seções de Poincaré deste potencial, descrito por:

$$V(x, y) = \left(y - \frac{x^2}{2}\right)^2 + \mu \frac{x^2}{2} \quad (\mu = 0.1) \quad (5.4)$$

apelidado potencial NELSON. Em seguida, estudaremos os efeitos da quebra das simetrias $x \rightarrow -x$ e $t \rightarrow -t$ através da inclusão de termos adicionais na Hamiltoniana. Definimos então, o sistema NELSON generalizado como:

$$H(x, p_x, y, p_y) = \frac{1}{2} (p_x + \beta y)^2 + \frac{1}{2} (p_y - \beta x)^2 + \left(y - \frac{x^2}{2} + cx^3\right)^2 + \mu \frac{x^2}{2}. \quad (5.5)$$

Fazendo $\beta = 0$ e $c = 0$, recaímos no problema original. Fazendo $c \neq 0$ e $\beta = 0$, quebramos a simetria $x \rightarrow -x$; $c = 0$ e $\beta \neq 0$, quebramos a simetria $t \rightarrow -t$ e finalmente $c \neq 0$ e $\beta \neq 0$ resulta em um sistema generalizado sem simetrias especiais.

O potencial NELSON consiste de um vale profundo que tem aspecto parabólico, cercado por altas montanhas, conforme sugere a figura (5.1). Ele é simétrico com relação ao eixo y . A Hamiltoniana é não-integrável e apresenta caos suave ("soft chaos"), em contraste com estudos existentes que se referem aos bilhares e/ou sistemas exibindo um código simbólico para suas órbitas periódicas.

As órbitas periódicas mais simples deste sistema, fig. (5.2), foram extensivamente estudadas por Baranger e Davies [4]. Este potencial tem um mínimo na energia zero, e devido a simetria de reflexão em ambos x e p_x , o plano $x = 0$, $p_x = 0$ é um plano invariante no espaço de fase. Assim, o potencial é harmônico ao longo deste plano, e é foliado por uma família de oscilações na direção- y , com período constante $\tau = 2\pi/\sqrt{2}$, a família "VERTICAL", V. De acordo com o estudo numérico de Baranger et al, esta é a família com menor período no intervalo de energia (0.0, 0.300). Neste intervalo, a família vertical sofre três bifurcações principais: uma quadruplicação de período em $E \cong 0.019$, gerando duas novas famílias, a família A, estável e a família H instável; uma triplicação de período em $E \cong 0.077$, gerando duas novas famílias, ambas degeneradas, C estável e P instável. A

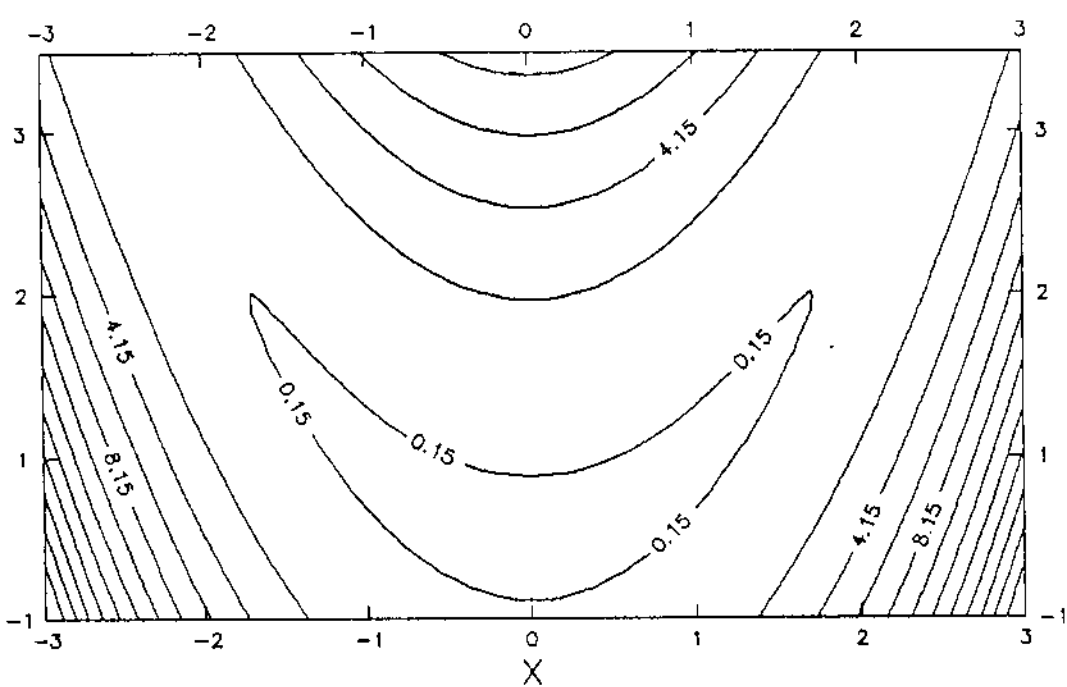


Figura 5.1: curvas equipotenciais de NELSON, evidenciando sua simetria $x \rightarrow -x$

família VERTICAL, continua estável até ocorrer a duplicação de período em $E \cong 0.136$, gerando a família inicialmente estável B, tornando-se então fracamente hiperbólica. Todas essas famílias estão belamente ilustradas na fig. (5.2). Estas famílias tem o período mais curto no intervalo de energia mencionado.

Outra família importante deste sistema é a família "HORIZONTAL" H, assim chamada porque parte das oscilações harmônicas se dá na direção- x . Seu período é sempre maior que o período da quadruplicação de V, e neste intervalo de energia ela sofre duas bifurcações isócronas¹ [4], [48], com uma das famílias geradas elíptica e outra hiperbólica.

Primeiramente, vamos identificar algumas dessas órbitas periódicas do potencial NELSON, nas seções de Poincaré e então, acrescentaremos termos que quebram a simetria x , p_x e p_y e daí, analisaremos as bifurcações destas famílias.

5.2 A seção de Poincaré de NELSON

A figura (5.1) representa parte do plano (x, y) que é ocupada por curvas equipotenciais fechadas. Esse potencial tem a forma de um poço infinito. O sistema tem uma integral: a própria Hamiltoniana. Seu valor constante para uma dada trajetória será representado por E , e é a energia total por unidade de massa da partícula. Da equação (5.3) temos:

$$V(x, y) \leq E, \quad (5.6)$$

portanto, as trajetórias são forçadas a permanecer na parte do plano (x, y) onde esta desigualdade é satisfeita. A velocidade também é restringida; da equação (5.3) temos:

¹Bifurcações isócronas são aquelas em que o período não muda. Observe na fig. (5.2) os pontos indicados por 4, $\bar{4}$ ou 4^2 .

$$\frac{1}{2} (p_1^2 + p_2^2) \leq E, \quad (5.7)$$

visto que, $V(x, y)$ é sempre positivo ($\mu = 0.1$). Assim, as trajetórias devem permanecer num volume finito do espaço de fase. Segue-se então, do clássico teorema de recorrência de Poincaré, que as trajetórias são, necessariamente, recorrentes. Se a forma da Hamiltoniana não fosse positivo-definida, as linhas equipotenciais poderiam abrir-se e não poderíamos garantir que as trajetórias fossem recorrentes para algum valor arbitrário de $V(x, y)$; de fato, muitas trajetórias poderiam “escapar” para o infinito no plano (x, y) .

Nenhuma outra integral é conhecida além de H [$H(x, p_x, y, p_y) = E$]; partimos então, para a investigação numérica. Como usualmente, primeiro reduzimos a ordem do sistema, fixando E , e o usamos para eliminar as coordenadas p_1 . Em seguida, definimos uma seção de superfície por

$$q_1 = 0. \quad (5.8)$$

As coordenadas na seção de superfície serão q_2 e p_2 . Podemos verificar que estes dois números definem um ponto de partida para uma trajetória: q_1 é dado pela equação (5.8), e p_1 pode ser obtido através da eq. (5.3):

$$p_1 = \pm \left(2E - \frac{p_2^2}{2} - q_2^2 \right)^{1/2}. \quad (5.9)$$

Os sinais $\pm$ são importunos, pois significam que a correspondência não é única; a um ponto da seção de Poincaré correspondem duas possíveis trajetórias. Podemos eliminar esta ambiguidade simplesmente redefinindo a seção de Poincaré como:

$$q_1 = 0 \quad \text{e} \quad p_1 \geq 0. \quad (5.10)$$

A seção q_1, p_1 é análoga a q_2, p_2 , com a condição $q_2 = 0$ e $p_2 \geq 0$.

Partimos agora para os resultados numéricos. Tomamos primeiro uma energia relativamente baixa $E = 0.01$, fig.(5.3a) e $E = 0.02$, fig. (5.3b). Obtemos uma sequência típica de pontos, que parecem rodar numa curva, ou seja, os resultados sugerem que existem curvas invariantes. (Somente os pontos são resultados da computação, a curva é uma interpretação). Ainda mais, pontos sucessivos parecem rodar regularmente em torno da curva. Isto é exatamente o que poderíamos esperar de um sistema integrável.

Para energias relativamente baixas, o sistema tem um comportamento regular, integrável, pois temos um oscilador- y e um oscilador- x independentes, conforme mostra a fig.(5.3). Na fig. (5.3a) identificamos a família **H**, levemente deslocada da origem e na fig. (5.3b) identificamos a família **V**, na origem. Aumentando um pouco a energia, o acoplamento torna-se mais efetivo e já ocorrem deformações nas curvas invariantes. Essas deformações são bem aparentes na fig.(5.4a), onde ainda vemos facilmente **H**, levemente deslocada da origem. Na fig.(5.4b), a seção yp_y para $E = 0.05$, já é bastante confusa. Vemos duas ilhas centrais, correspondentes a **H** e **I**, (ver família **I** na fig. (5.2), imersas numa região caótica limitada por um toro bem regular que separa as bifurcações isócronas de **H**, um ramo estável,(que é uma rotação simétrica, que chamei de **R**) e o outro instável (que é uma libração assimétrica, que chamei de **L**) dessa região caótica. A família **I** é uma continuação da família **H** (portanto, suas trajetórias são bem parecidas com as trajetórias de **H**). Nessa energia, $E = 0.05$ a família **I** tem dois ramos, um estável e outro instável, que aparecem nitidamente na seção (5.4b). O ramo instável da família **I** é responsável pela região caótica delimitada por um toro bem regular.

Aumentando ainda mais a energia, fazendo $E = 0.08$, fig.(5.5a), as bifurcações isócronas de **H**, ou seja, **R** e **L** são instáveis, a família **H** ainda permanece estável, de modo que ainda podemos identificá-la na seção. Identificamos também o ramo estável da quadruplicação de período, **H** e acabou de ocorrer a triplicação de **V**, que também tem um ramo estável e outro instável. A triplicação é nitidamente vista em $E = 0.1$, fig. (5.5b). Para E maior que 0.1, a seção fica uniformemente coberta de pontos, indicando que o sistema está num regime fortemente instável.

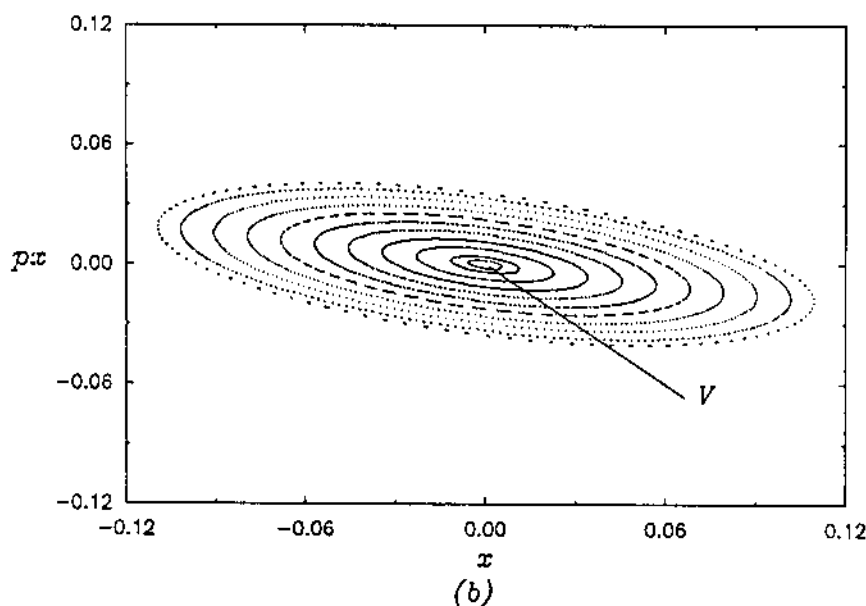
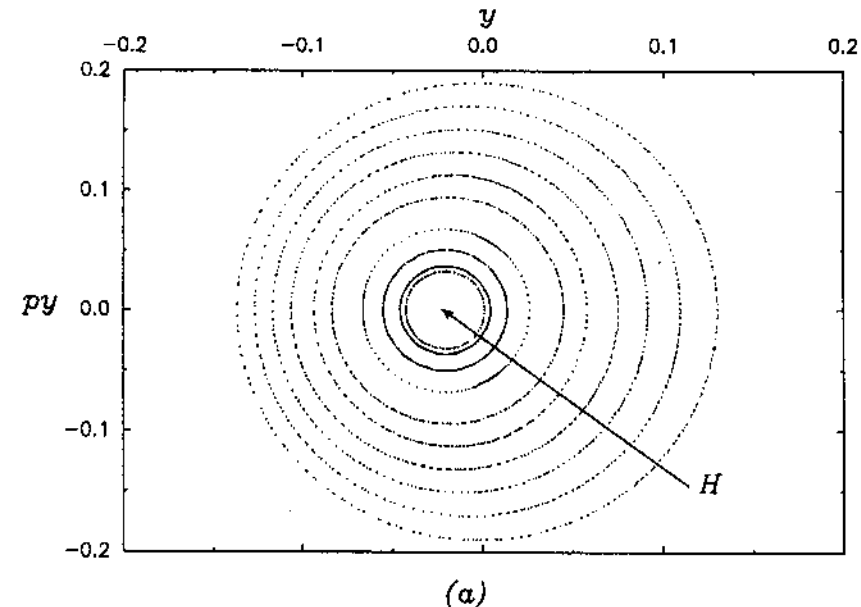


Figura 5.3: seção de Poincaré do potencial NELSON a) seção yp_y mostrando nitidamente a família **H** (Horizontal), como o ponto fixo central, levemente deslocado da origem, em $E = 0.02$ e b) seção xp_x , mostrando a família **V** (Vertical) em $E = 0.01$, com o ponto fixo na origem.

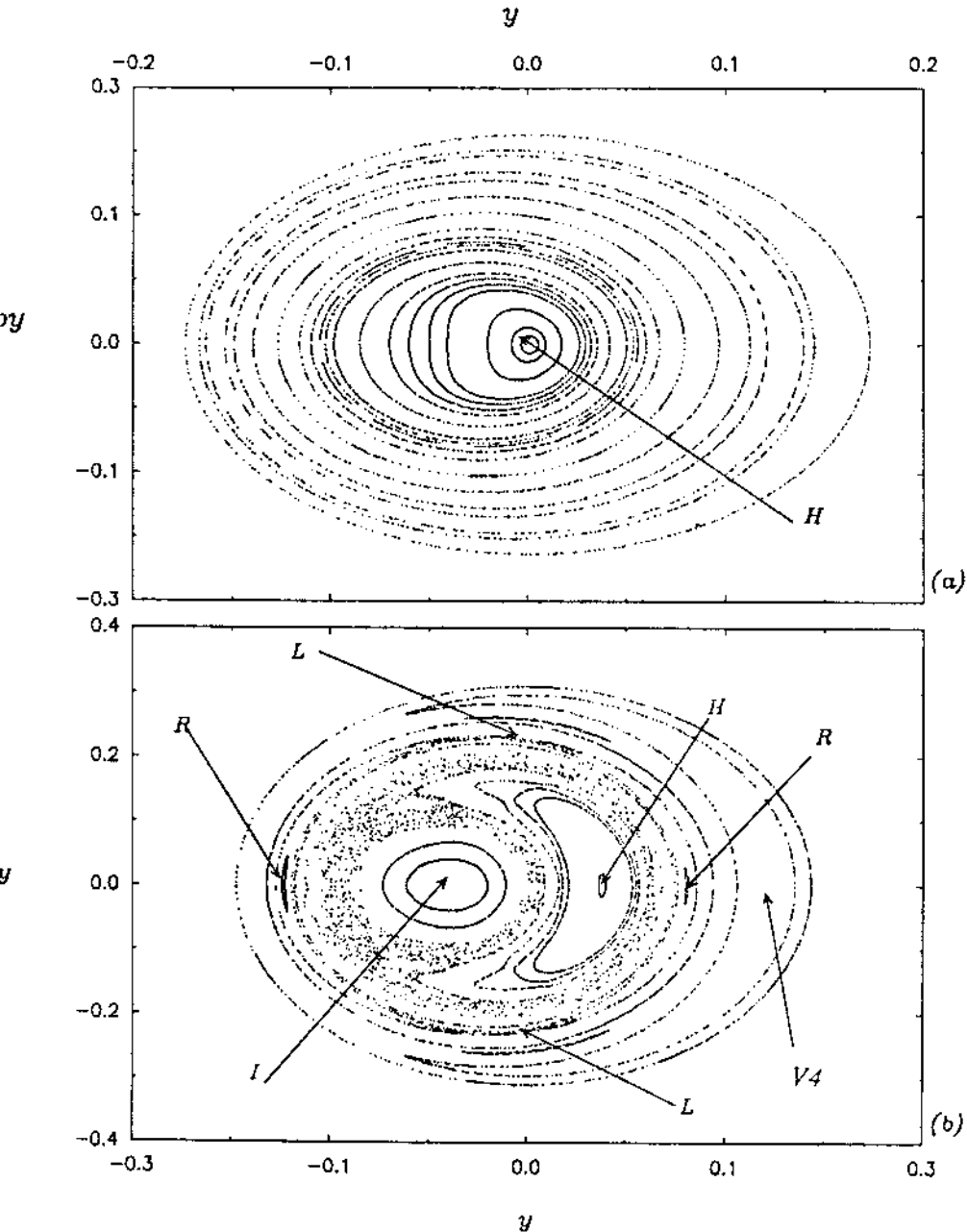


Figura 5.4: seção de Poincaré, yp_y , do potencial NELSON. Em a) vemos deformações nos toros para $E = 0.03$ e em b) em $E = 0.05$, identificamos a família H , suas bifurcações isócronas R e L . Vemos também família I e a quadruplicação da família vertical V . Independente do nome dado as famílias na ref. [3], fig. (5.2), usamos o símbolo $V4$ para a quadruplicação da família Vertical

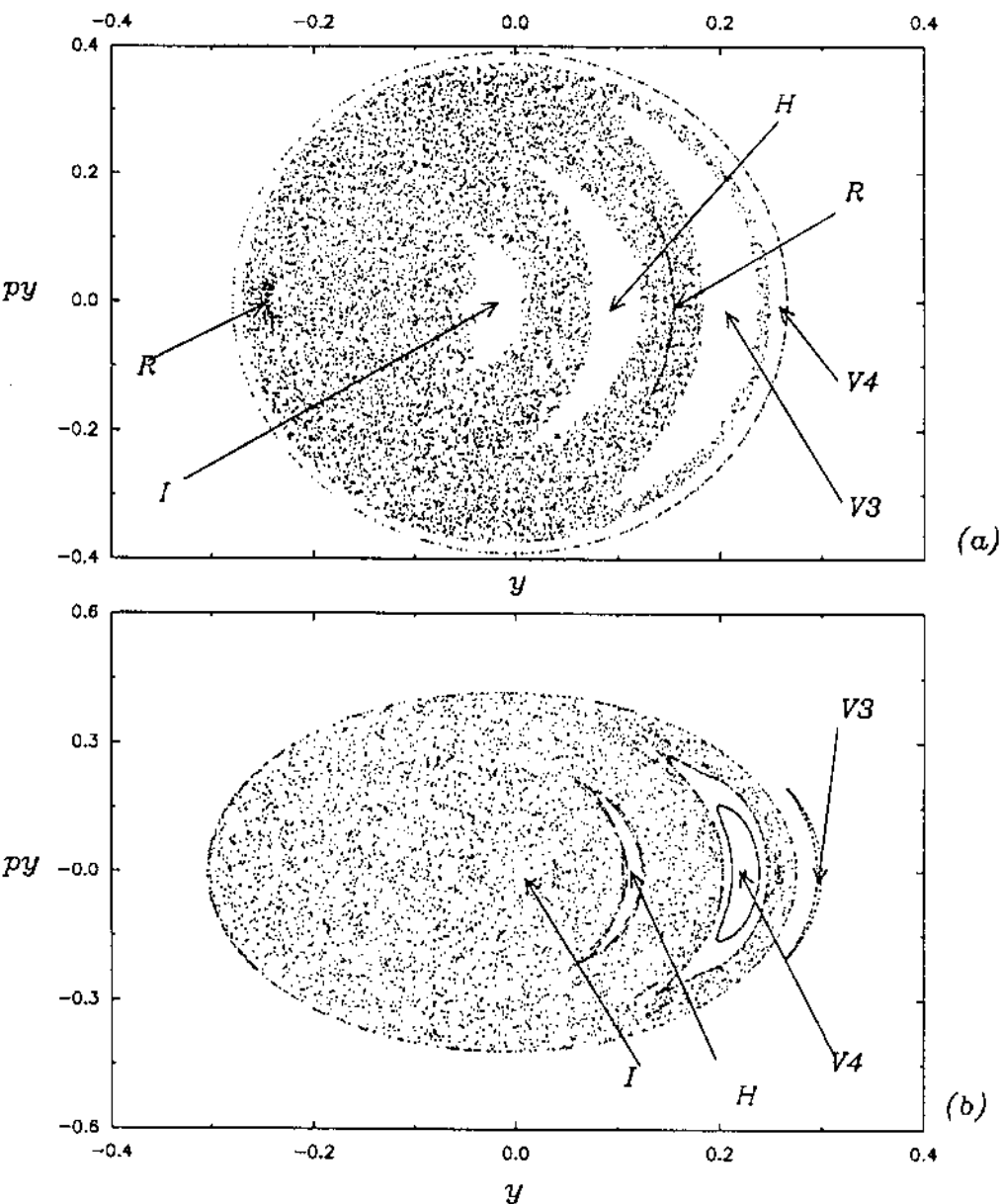


Figura 5.5: seções yp_y do potencial NELSON. a) $E = 0.08$ e b) $E = 0.1$. Usamos R para a bifurcação isócrona de H , fig. (5.2); H para a família H horizontal; I para a família I , fig. (5.2) e $V4$ e $V3$ para a quadruplicação e para a triplicação da família vertical, respectivamente

As seções $x p_x$, mostram claramente a família Vertical (V) e suas bifurcações. Para $E = 0.02$, fig. (5.6a), acabou de ocorrer a quadruplicação de período ², que aparece de forma bem nítida em $E = 0.03$, fig. (5.6b). Apesar dessa bifurcação a seção mostra ainda um comportamento bem regular. A família vertical V aparece como ponto fixo no centro dessas seções.

Para $E = 0.05$, fig. (5.7a) vemos o aparecimento de muitas ilhas pequenas e regiões de instabilidade que se tornam expressivamente caóticas em $E = 0.08$, fig. (5.7b). Nessa energia acabou de ocorrer a triplicação de período que aparece explicitamente em $E = 0.1$, fig. (5.8a), mostrando seu ramo estável e instável.

Convém ressaltar aqui, que analisar as seções $x p_x$ é bem mais fácil que as seções $y p_y$, conforme você já deve ter observado. Isto não é obra do acaso, pois as bifurcações da família V ocorrem para energias relativamente mais altas que as principais bifurcações de H, mantendo-se estáveis para energias relativamente altas em relação a família H. Tendo em vista isso, aumentamos ainda mais a energia, fazendo a seção $x p_x$ para $E = 0.15$. Nessa energia, todas as ramificações de H e as bifurcações de V são instáveis, exceto a duplicação de V, que praticamente acabou de ocorrer. A fig. (5.8b) mostra nitidamente a duplicação de V e observamos que a nova família, V2 é elíptica. Para energias maiores que 0.2 aproximadamente, todas as famílias são instáveis e consequentemente as seções são uniformemente cobertas por pontos.

5.3 Quebra da simetria de reflexão espacial nas Seções de Poincaré

Ao quebrarmos a simetria $x p_x$ do potencial NELSON, ligando o parâmetro c em:

²Lembre-se que a triplicação é degenerada

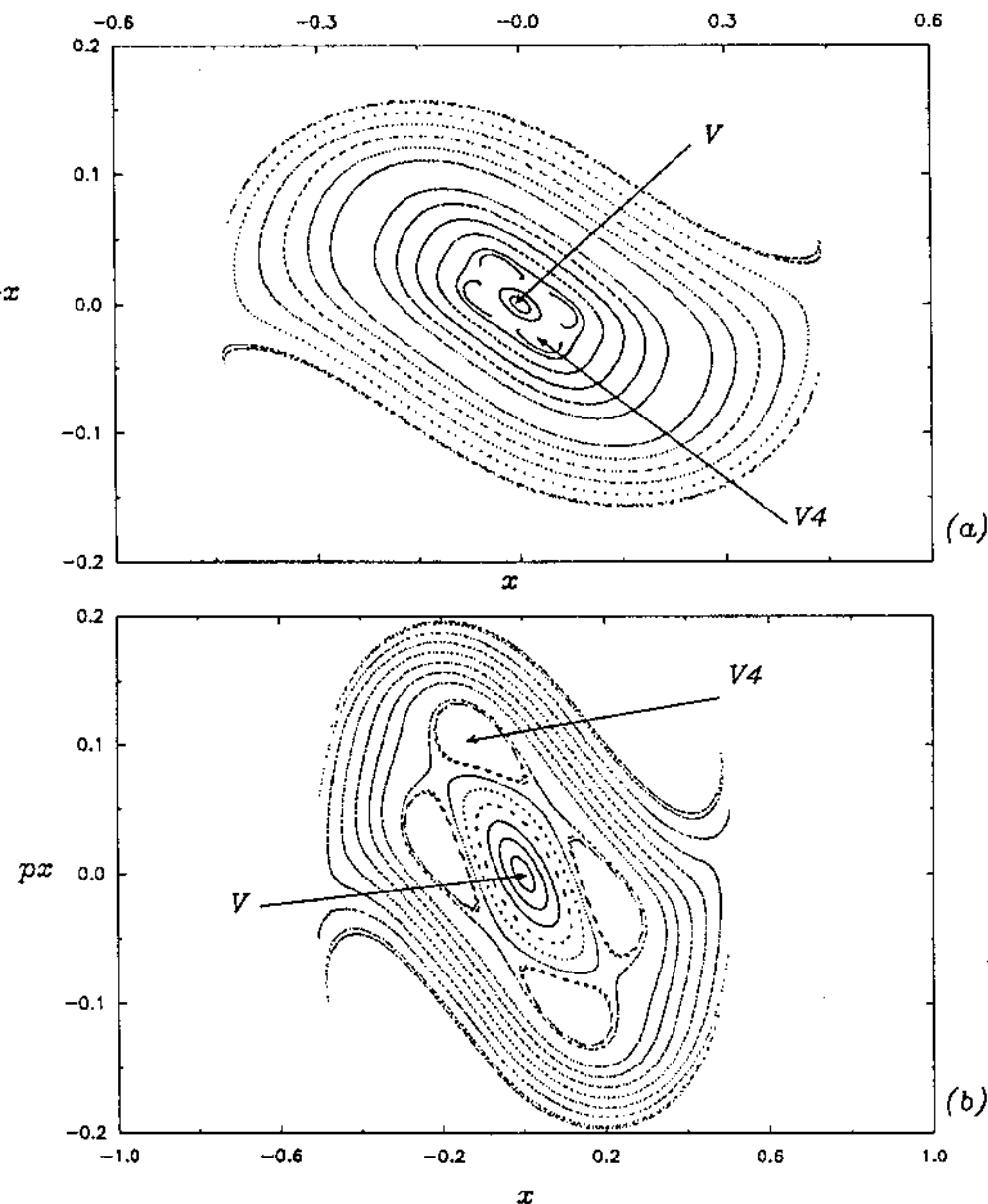


Figura 5.6: seção do potencial NELSON no plano $x p_x$. Em a) $E = 0.02$ e b) $E = 0.03$. Em 0.02 a quadruplicação de V acabou de ocorrer e em 0.03 ela aparece bem nítida. As famílias H horizontal e a quadruplicação estão identificadas por H e $V4$ respectivamente.

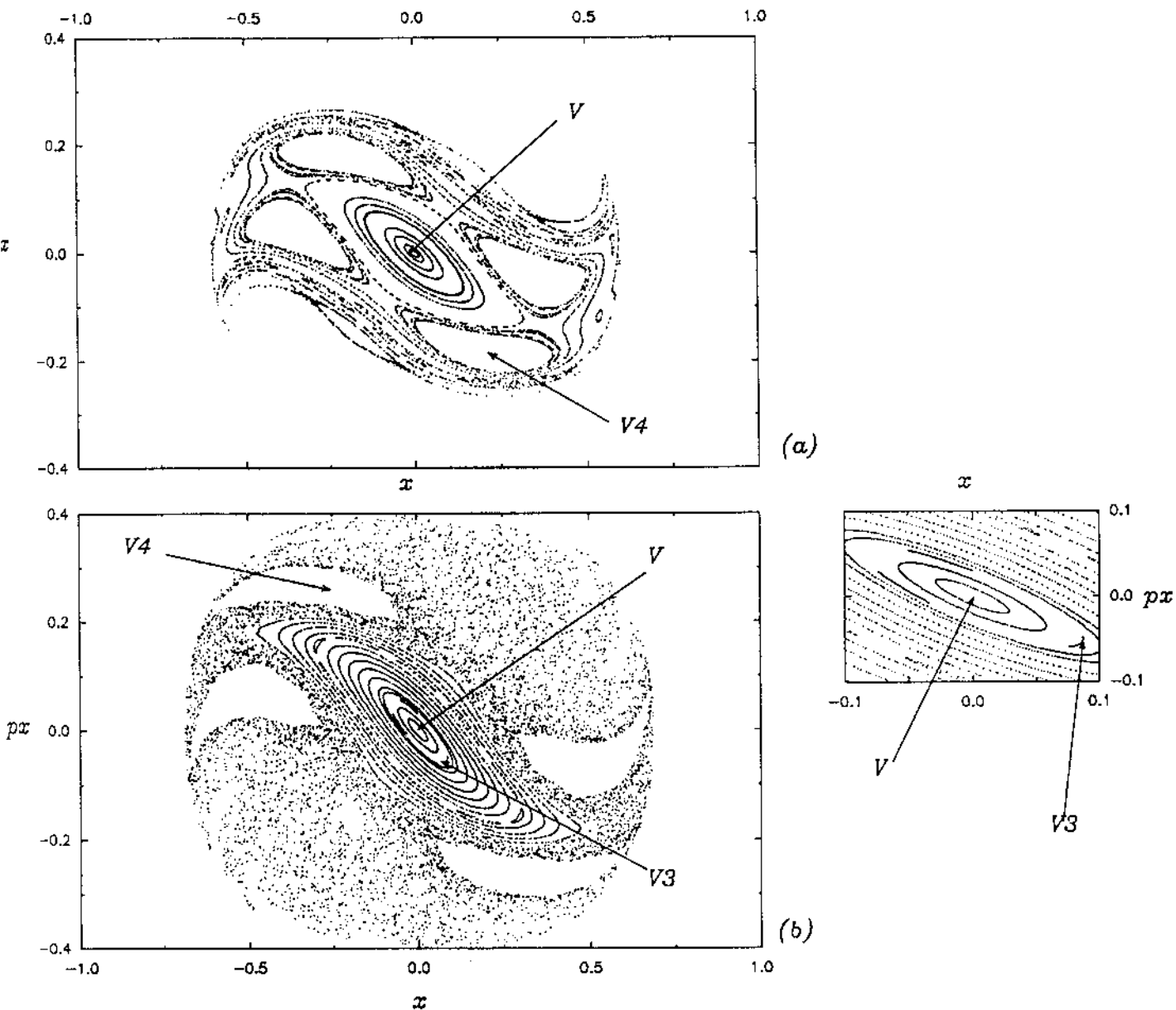


Figura 5.7: seções $x p_x$ do potencial Nelson. Em a) $E = 0.05$ vemos a quadruplicação de período, seu ramo estável e instável e algumas regiões de instabilidade e em b) $E = 0.08$ vemos que a triplicação de V que acabou de ocorrer, nessa energia a seção já mostra um comportamento bastante instável. Essas famílias estão identificadas por $V4$ e $V3$ respectivamente.

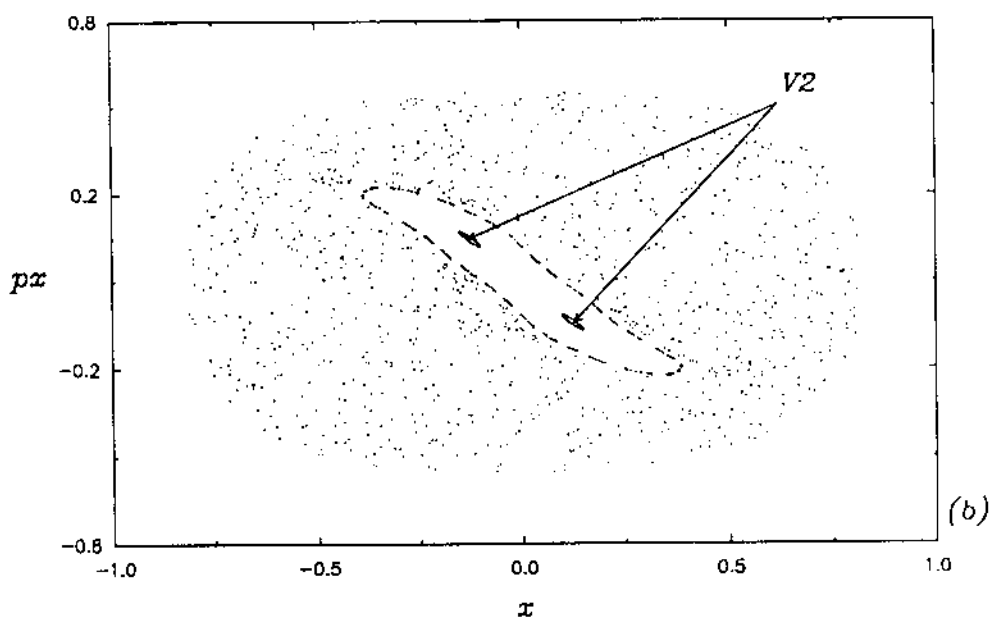
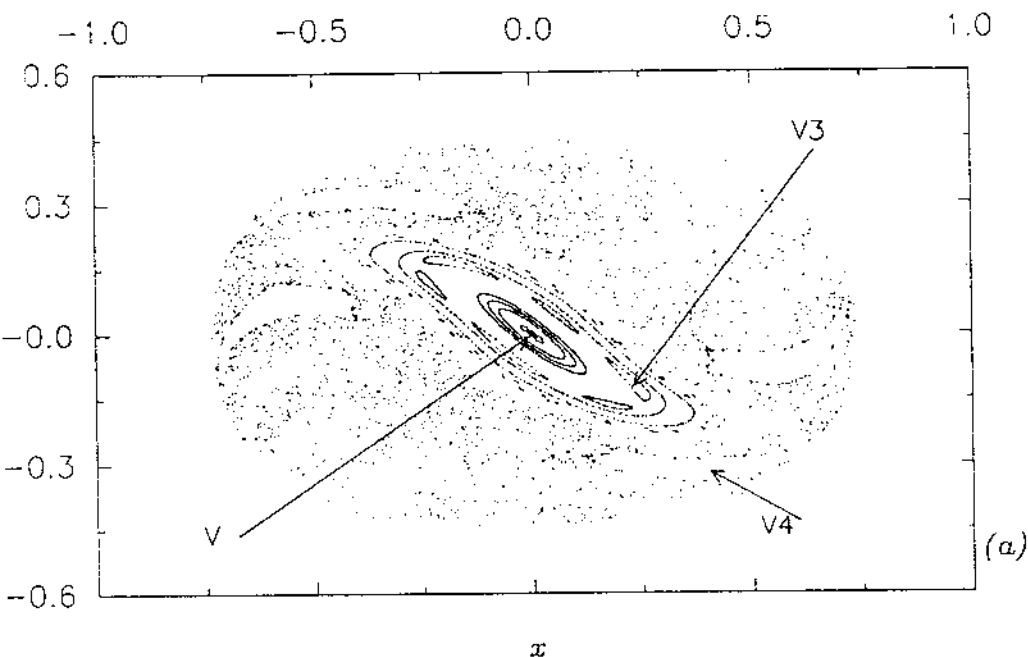


Figura 5.8: seções $x p_x$ do potencial Nelson. Em a) $E = 0.1$ vemos a triplicação de período com seu ramo estável e seu ramo instável e em b) $E = 0.15$, a única família que aparece é a duplicação de período de V que é elíptica. Essas famílias estão identificadas por $V3$ e $V2$ respectivamente.

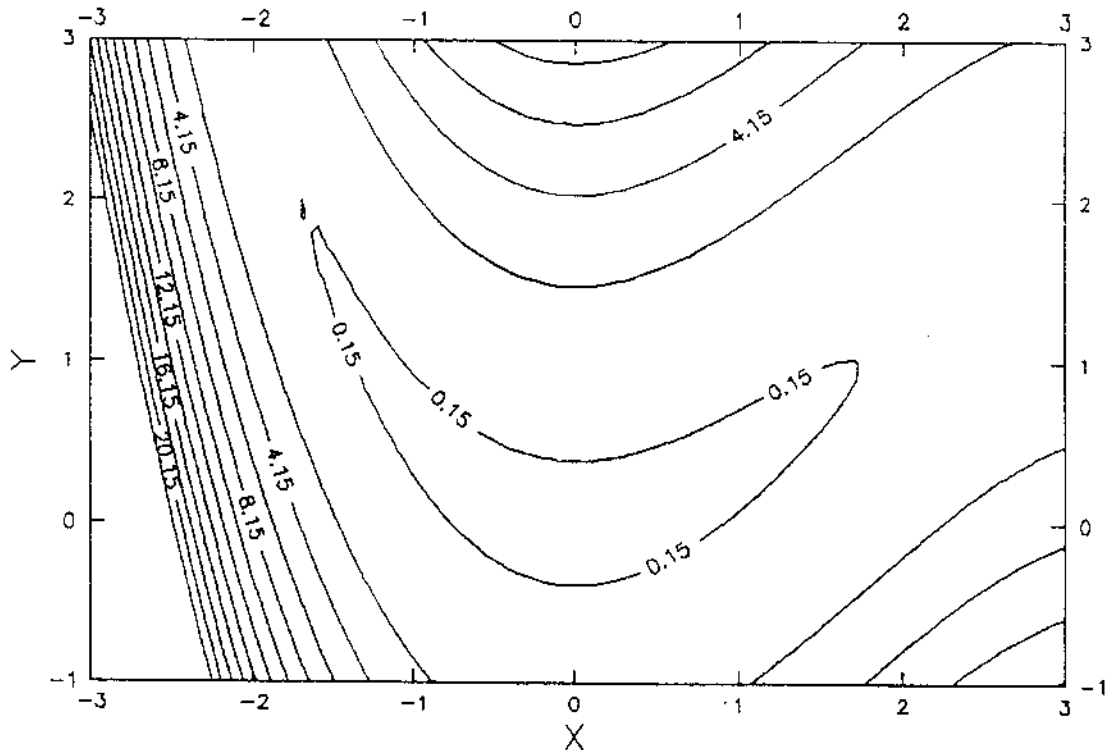


Figura 5.9: curvas de nível do potencial assimetrizado, mostrando a deformação do poço para $c = 0.1$

$$V(x, y) = \left(y - \frac{x^2}{2} + cx^3 \right)^2 + \mu \frac{x^2}{2}. \quad (5.11)$$

deformamos o poço de potencial, fig. (5.9). A quebra de simetria feita desta forma, garante que o movimento continue sendo limitado, condição importante para a quantização do sistema, mas, no entanto, as órbitas periódicas são alteradas. As rotações tornam-se assimétricas e as librações H também. O diagrama $E \times \tau$ é sensivelmente diferente do original para NELSON, fig. (6.2 e 6.11).

Devemos ter em mente que a família H , certamente vai sentir muito mais essa deformação do potencial que a família V , pois quebramos a simetria $x \rightarrow -x$, e que além disso, esperamos um comportamento muito mais complicado nas seções yp_y do que em xp_x , uma vez que isso já foi observado no potencial simétrico.

A fig. (5.10a), mostra os toros centrais levemente deformados, mas

ainda permite a identificação de H. Para $E = 0.03$, fig.(5.10b) aparecem muitas ilhas e torna-se difícil a identificação das órbitas do diagrama (6.11).

Aumentamos ainda mais a energia, fig. (5.11) e vemos que a maior parte da seção é densamente coberta por pontos indicando um regime altamente instável.

Conforme esperavamos, as seções xp_x , não foram tão drasticamente afetadas. Em $E = 0.03$ aparece algumas alterações nas bordas, fig. (5.12a) e permitem identificar seguramente a quadruplicação. Em $E = 0.05$, fig. (5.12b), começa aparecer regiões altamente instáveis e uma série de ilhas significando o aparecimento de novas bifurcações. A triplicação da família Vertical é bem visível em $E = 0.08$, fig. (5.13). Para energias mais altas, o sistema é fortemente instável, fig. (5.14).

Observadas as seções de Poincaré do potencial NELSON assimetrizado, podemos concluir que o parâmetro c , introduziu um comportamento mais caótico no sistema. A família Vertical, V, propriamente não se altera, pois houve uma quebra de simetria em x , no entanto, observamos uma alteração qualitativamente diferente na triplicação de período, que para $c \neq 0$ já não é degenerada. Ainda mais, a família H se altera sensivelmente, fig. (6.11 e 6.15). Outras bifurcações, embora não calculadas, certamente ocorreram e bifurcações das bifurcações, assim como alterações na família I, tão expressivamente instável, podem ter gerado toda a instabilidade com a qual nos deparamos nas seções yp_y para $c = 0.1$.

Em seguida, quebraremos a simetria de reversão temporal da Hamiltoniana e veremos como nosso sistema responde a introdução de um campo magnético perpendicular ao plano xy .

5.4 Quebra da simetria de reversão temporal nas seções de Poincaré

Nosso sistema, agora totalmente assimétrico é equacionado por:

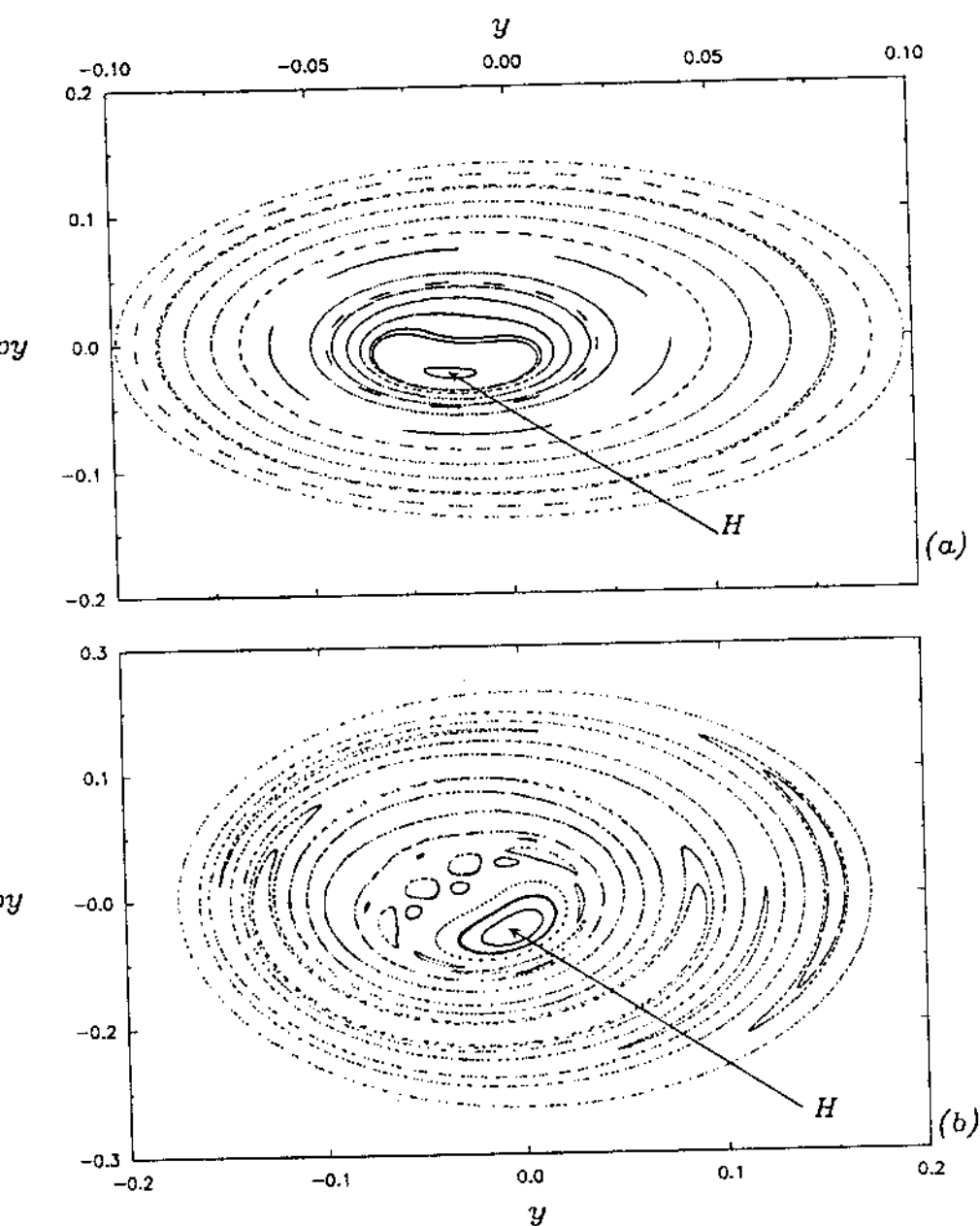


Figura 5.10: seção de Poincaré yp_y do potencial Nelson assimétrico ($c = 0.1$). Em a) Para $E = 0.01$ já há deformação do toro central sendo que nessa energia, a seção do potencial NELSON é bem regular; b) Para $E = 0.03$ aparecem inúmeras bifurcações. A família Horizontal é identificada por H .

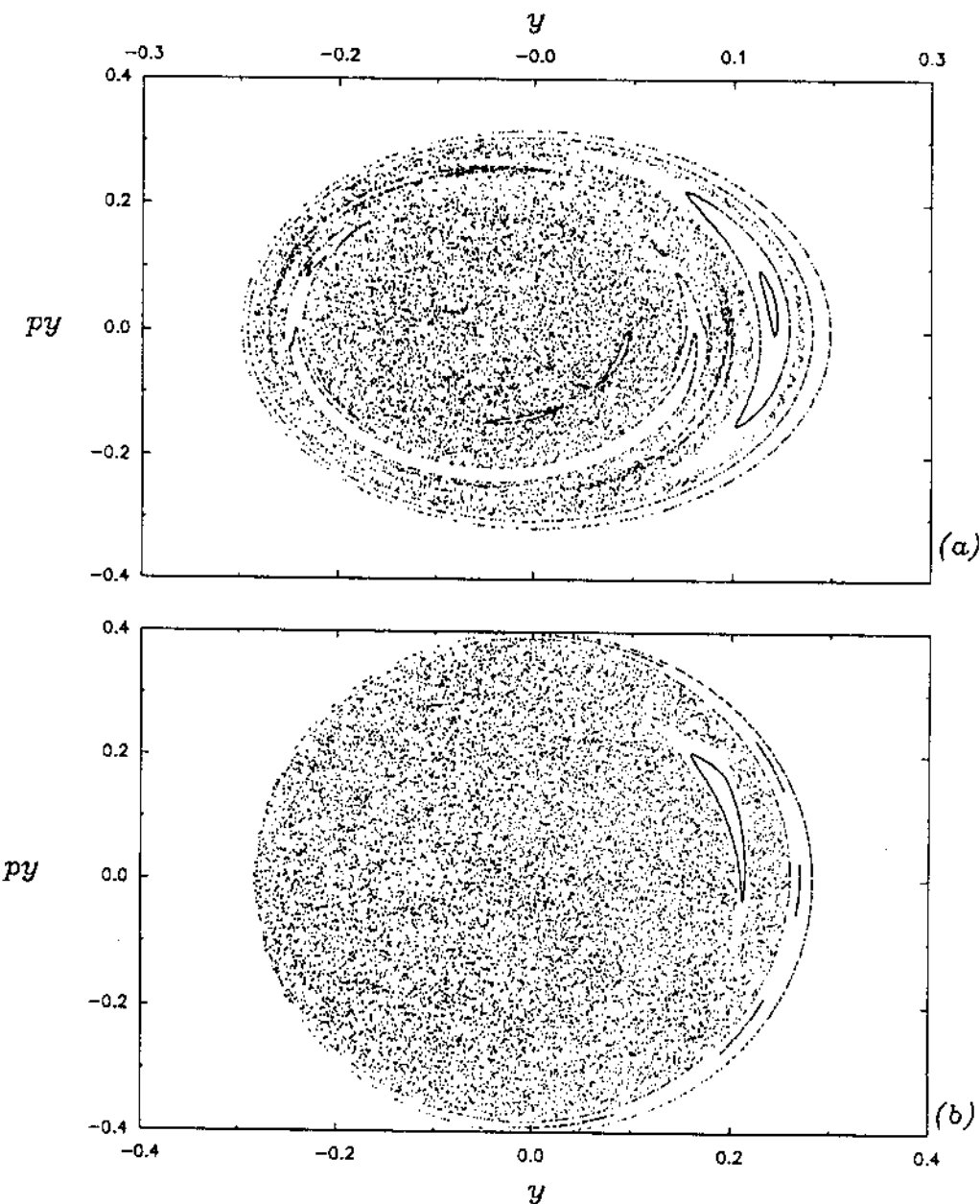


Figura 5.11: seção de Poincaré yp_y do potencial Nelson assimetrizado ($c = 0.1$). Em a) $E = 0.05$ e em b) $E = 0.08$. Vemos uma crescente complexidade, ou seja, caos em energias relativamente mais baixa, quando $c \neq 0$.

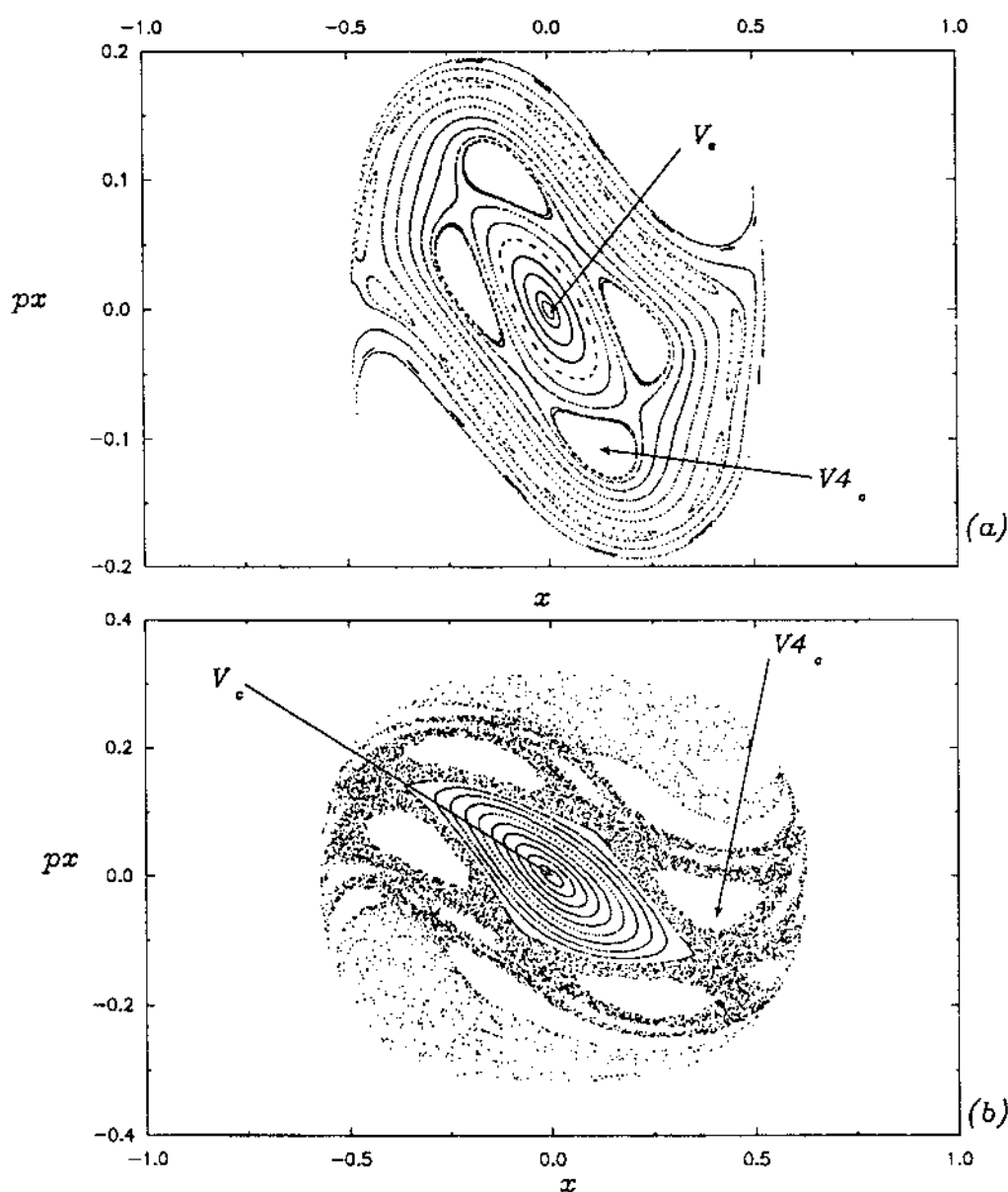


Figura 5.12: seção de Poincaré xp_x para o potencial Nelson assimetrizado ($c = 0.1$). Em a) $E = 0.03$ vemos a quadruplicação da família vertical e em b) $E = 0.05$ observamos um regime bastante instável. $V4_c$ e V_c representam a quadruplicação da família Vertical e a família Vertical, respectivamente.

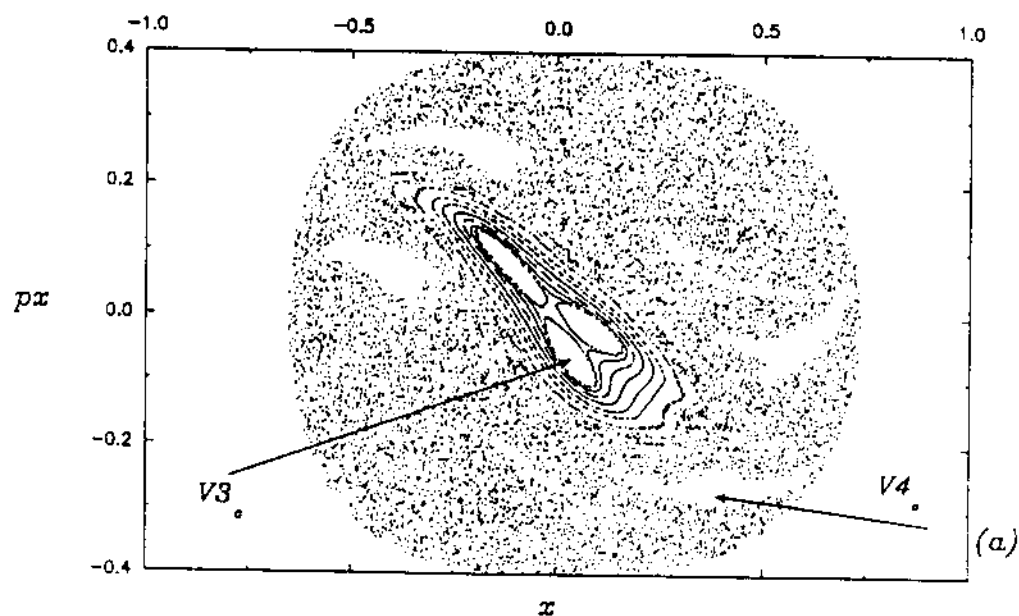


Figura 5.13: seção de Poincaré xp_x do potencial Nelson assimetrizado ($c = 0.1$) para $E = 0.08$. Vemos a triplicação da família vertical $V3c$.

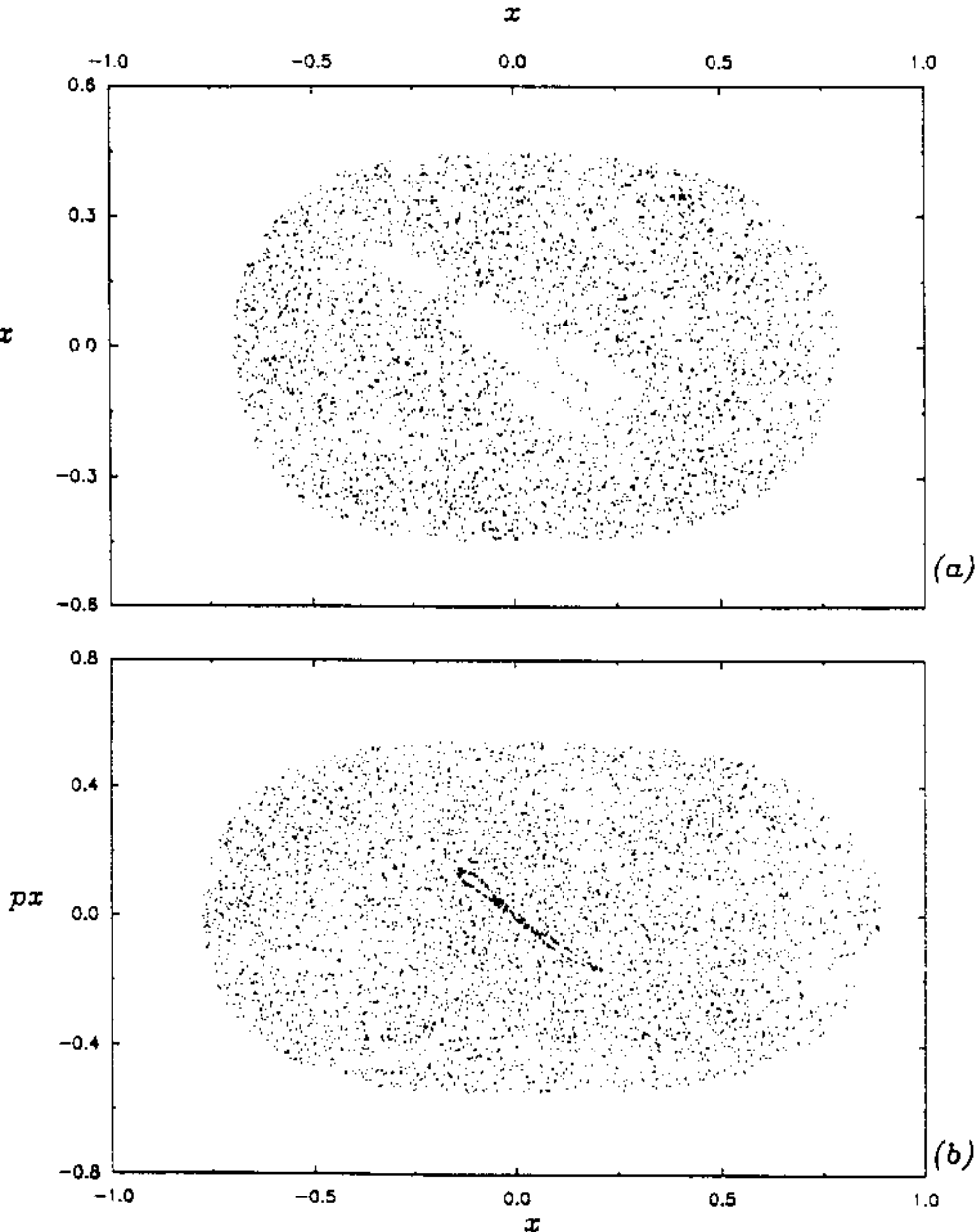


Figura 5.14: seção de Poincaré xp_x do potencial Nelson assimetrizado ($c = 0.1$). Em a) $E = 0.1$ e em b) $E = 0.15$. O sistema já está fortemente instável. V3 e V4 representam respectivamente, a triplicação e a quadruplicação da família vertical.

$$H = \frac{1}{2}(p_x + \beta y)^2 + \frac{1}{2}(p_y - \beta x)^2 + \left(y - \frac{x^2}{2} + cx^3\right)^2 + \mu \frac{x^2}{2} \quad (5.12)$$

Ao quebrarmos a simetria de reversão temporal, fazendo $\beta \neq 0$, o diagrama $E \times \tau$, (6.19) mostra o aparecimento uma família (H_β) numa energia relativamente alta em relação a configuração inicial (fig. 5.2), a família H_β permanece estável até a energia 0.09 e não houve grande alteração em L_β com relação a L_c , fig. (6.11). A família Vertical de Nelson, que não sentiu a quebra de simetria $x \rightarrow -x$, agora sente a quebra de simetria de reversão temporal e se altera dependendo do valor do parâmetro *beta*.

Vamos agora analisar as seções de Poincaré com o parâmetro $\beta = 0.03$. Esperamos que as seções yp_y tornem-se ainda mais complicadas, contudo em $E = 0.02$, fig. (5.15a), identificamos a família Horizontal (agora H_β) e L_β (um ponto estável e outro instável).

Ao aumentarmos um pouco a energia, fig. (5.15b), já não é possível identificar seguramente essas famílias devido ao grande número de ilhas que aparecem e regiões de instabilidade que se tornam fortemente caóticas para E maior que 0.05, fig. (5.16).

Ainda aqui, as seções xp_x , fig. (5.17), sofrem menos com o parâmetro β . Há alguns detalhes adicionais e uma visível adição de instabilidade, fig. (5.18), em relação as seções xp_x anteriores. Em $E = 0.15$ os pontos se distribuem uniformemente na seção, contudo ainda é possível identificar todas as bifurcações da família vertical, V_β do diagrama (6.23).

Finalmente, para um bom entendimento destas citadas famílias de órbitas periódicas, dedicamos o próximo capítulo ao seu estudo. Veremos suas possíveis ramificações e as condições para que elas aconteçam ao quebrarmos uma a uma, as simetrias do sistema.

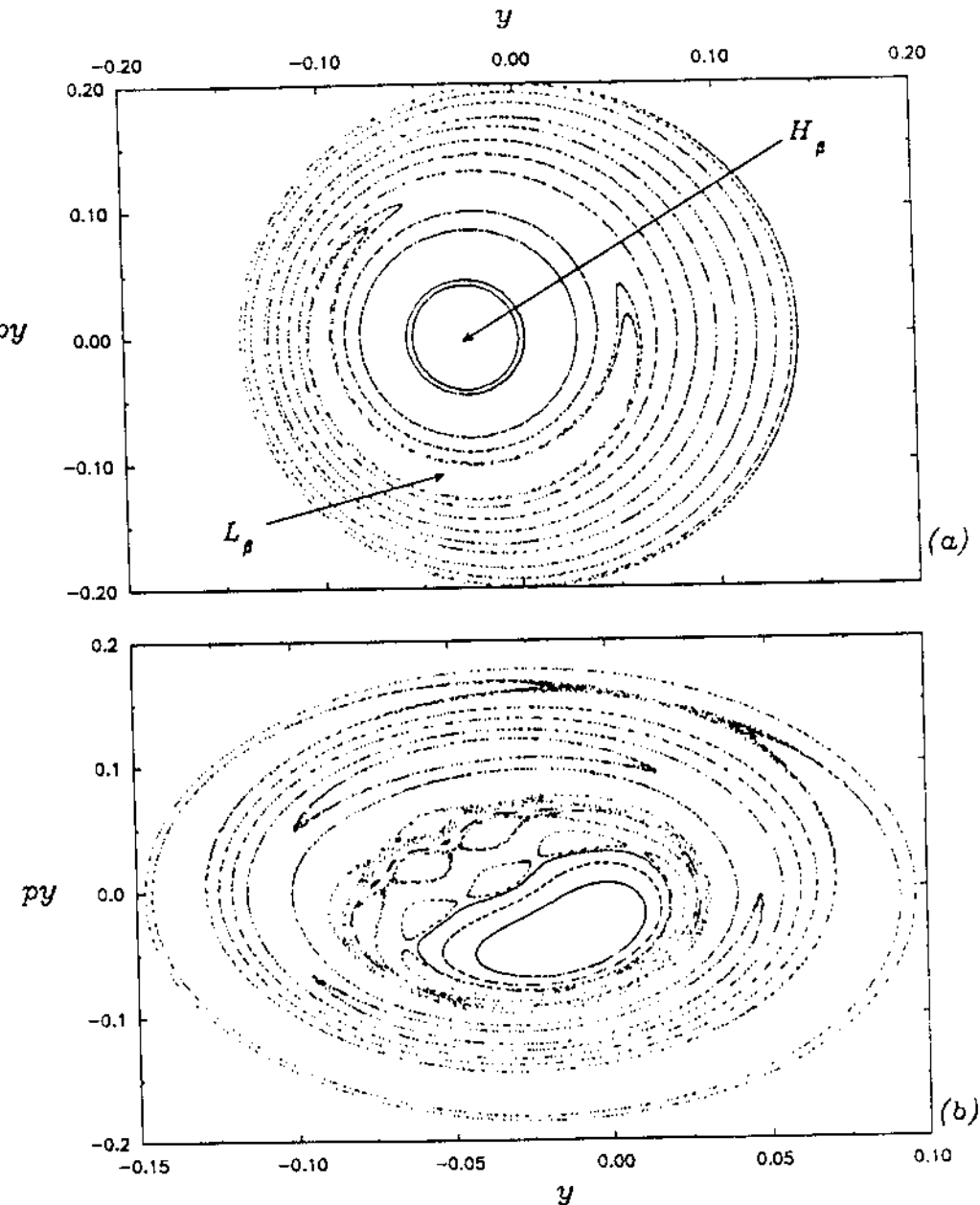


Figura 5.15: seção de Poincaré, yp_y para o potencial Nelson generalizado. Em a) $E = 0.02$ identificamos a família Horizontal, agora H_β e L_β , fig. (6.19) e em b) $E = 0.03$ aparecem inúmeras bifurcações.

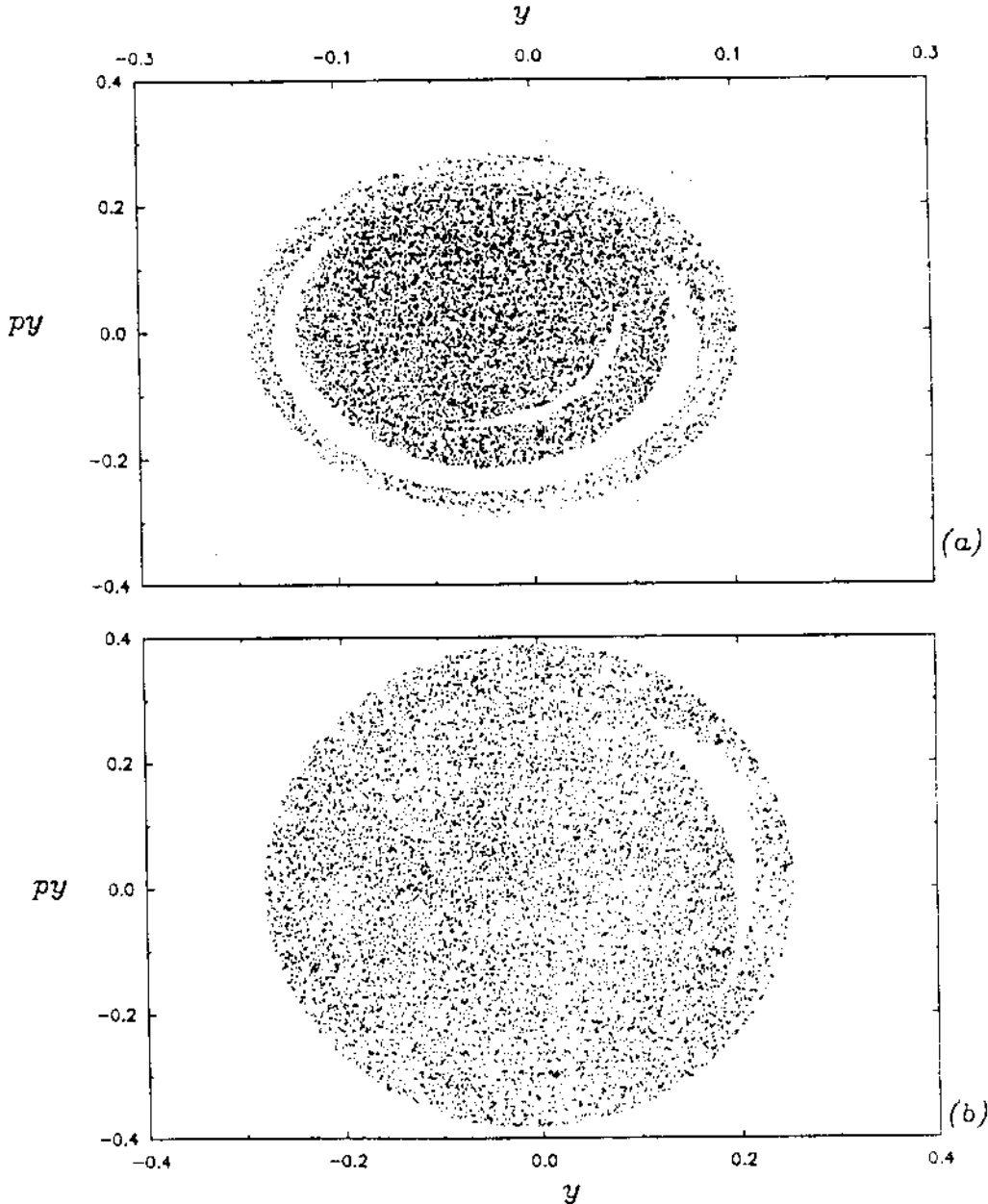


Figura 5.16: seção de Poincaré, yp_y do potencial Nelson generalizado, $c = 0.1$ e $\beta = 0.03$. Em a) $E = 0.05$ e b) $E = 0.08$. Regiões altamente instáveis.

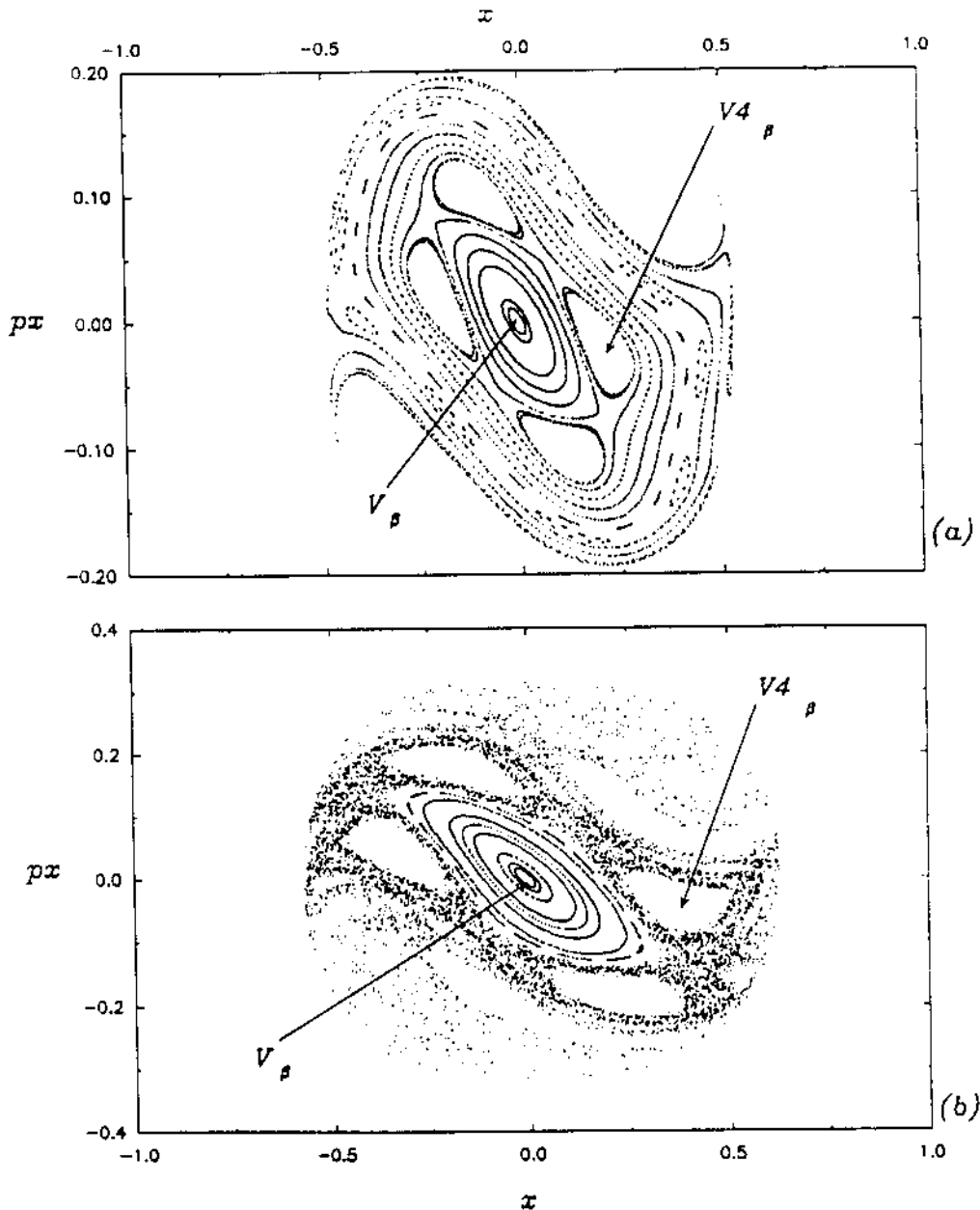


Figura 5.17: seção de Poincaré, xp_x , do potencial Nelson generalizado, $c = 0.1$ e $\beta = 0.03$. Em a) $E = 0.03$ e em b) $E = 0.05$. Observamos um comportamento mais caótico do sistema em relação as seções xp_x anteriores, para a mesma energia. A quadruplicação e a triplicação de período da família Vertical são identificadas por $V4$ e $V3$, respectivamente. (Os sub-índices β , somente lembram que $\beta \neq 0$).

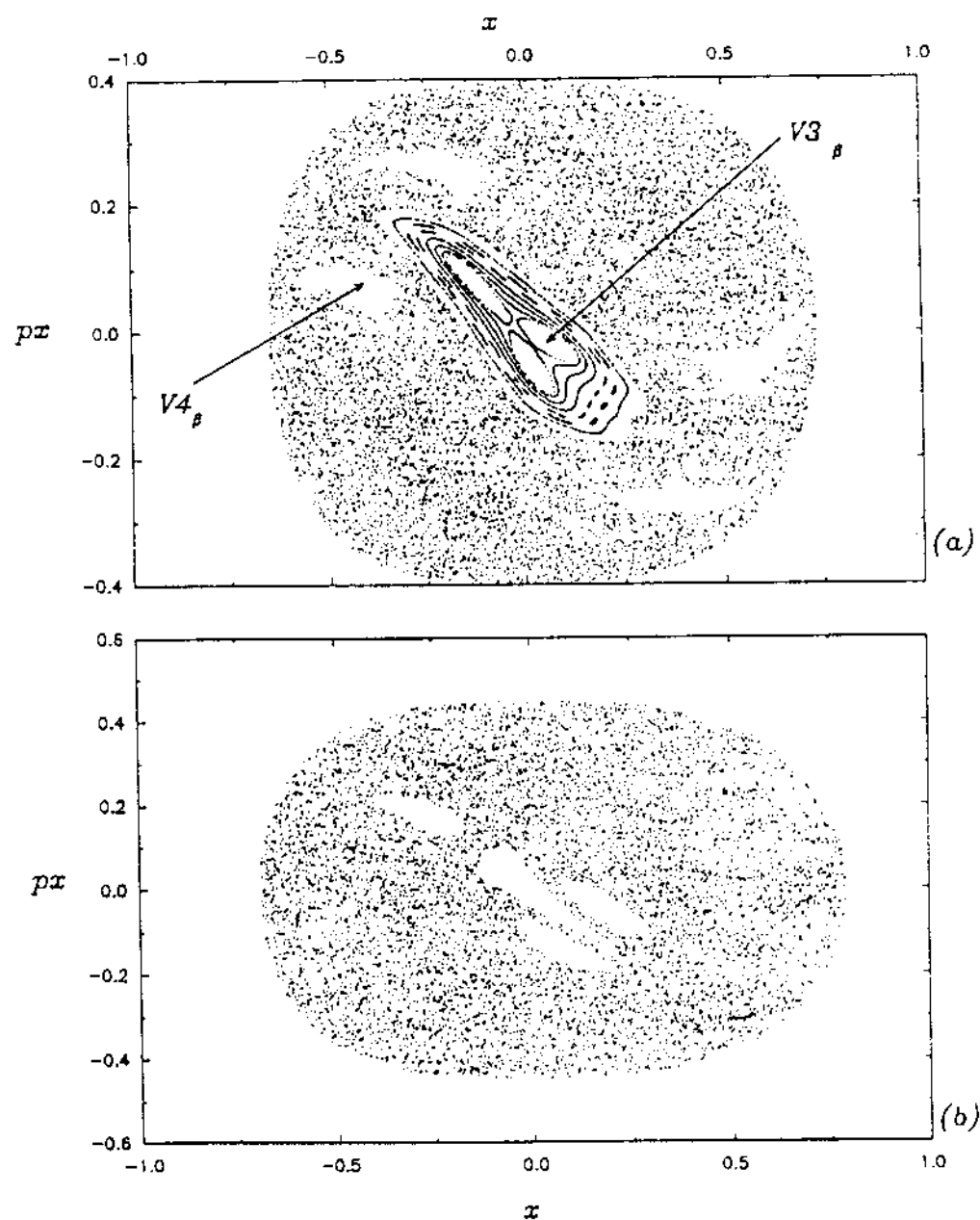


Figura 5.18: seção de Poincaré, xp_x , do potencial Nelson generalizado, $c = 0.1$ e $\beta = 0.03$. Em a) $E = 0.08$ e b) $E = 0.1$. Identificamos ainda, as bifurcações da família Vertical, fig(6.23) e vemos uma crescente adição de instabilidade.

Capítulo 6

Quebra de Simetrias nas Famílias de Órbitas Periódicas

Fomos duplamente motivados nos dois últimos capítulos a conhecer as órbitas periódicas do nosso sistema. Primeiramente, vimos que a densidade semi-clássica emerge de uma soma sobre todas as órbitas periódicas do sistema classicamente caótico (Fórmula do Traço de Gutzwiller - Cap. 4) e em segundo lugar, recorreremos várias vezes ao diagrama energia-período, $E \times \tau$, para conhecer as órbitas periódicas estáveis das principais famílias e localizar as principais órbitas periódicas instáveis nas seções de Poincaré. Famílias de órbitas que são importantes no diagrama, podem não ter essa importância refletida na seção de Poincaré, ou equivalentemente, ilhas "aparentemente desprezíveis" (em relação à área) na seção de Poincaré podem corresponder às órbitas mais importantes do sistema. Esse fato, mostra claramente que o diagrama $E \times \tau$ e as seções de Poincaré juntos, podem nos dar uma informação mais completa do sistema. Para calcular as órbitas periódicas, foi necessário desenvolver métodos de computação especialmente adaptados às órbitas periódicas, muito mais seguro que o usual procedimento envolvendo as seções de Poincaré. Esse método, [4], foi desenvolvido por Baranger. Um aspecto importante do método de Baranger, é que ele trabalha tão bem

órbitas estáveis quanto instáveis, que têm um importante papel nas regras de quantização do problema. Muitas das aproximações mais tratáveis da dinâmica quântica de muitos corpos tem um aspecto clássico para ela; elas consistem de pacotes de onda de muitos corpos seguindo trajetórias clássicas. As aproximações de Hartree-Fock e o campo médio dependente do tempo são deste tipo. É bem sabido que, tais aproximações podem ser geradas, de modo geral escolhendo-se uma função de onda que depende de parâmetros apropriadamente dependentes do tempo; quando tal função "tentativa" é introduzida no princípio variacional dependente do tempo, os parâmetros que são encontrados satisfazem as equações clássicas de Hamilton. Para maiores referências, ver [3].

No meio da complexidade apresentada pelos sistemas não-integráveis, onde órbitas quase-periódicas sobre toros se misturam com órbitas caóticas instáveis, uma estrutura simples, a *órbita periódica* ainda está imersa nesse emaranhado. Essas órbitas são densas no espaço de fase, no sentido que, dado qualquer ponto existe uma órbita periódica passando arbitrariamente próxima, ainda que de período muito longo. As soluções periódicas de sistemas Hamiltonianos de dois graus de liberdade, formam uma família a um parâmetro (o parâmetro é a energia E , ou o período τ). Quando o parâmetro é variado, nos movemos ao longo da família e existe valores deste parâmetro para o qual novas famílias são geradas. Os pontos onde isto acontece, (E_b, τ_b) , são chamados **pontos de bifurcação**. O período das trajetórias bifurcadas serão um múltiplo inteiro da trajetória original. As trajetórias periódicas podem ou não tornar-se hiperbólicas, quando sofrem uma bifurcação e as novas famílias ramificadas podem ou não ser elípticas ou hiperbólicas. Extensivas análises numéricas de bifurcações das soluções periódicas foram feitas em [3] e [4] para sistemas Hamiltonianos com dois graus de liberdade.

Outra característica muito útil de cada trajetória periódica é sua matriz monodromia M , [ver seção 2.3.2 e [49]]. Esta matriz descreve a alteração da posição inicial e da velocidade, após um período, devido a uma pequena alteração arbitrária nas condições iniciais. Para espaços bidimensionais, M é uma matriz (4×4) . Dois autovalores de M são sempre um e os outros dois têm produto unitário e podem ser ou conjugados complexos (na forma

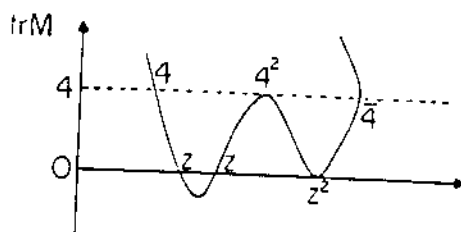


Figura 6.1: $TrM \times E$, ilustrando os pontos denotados por $4, 4^2, Z, Z^2$ e $\bar{4}$.

$e^{i\alpha}$, $e^{-i\alpha}$) ou real (na forma $\pm e^{\pm u}$, $\pm e^{-u}$). No primeiro caso, a trajetória é estável e o traço de M está entre 0 e 4. No último caso, a trajetória é instável e o traço de M fica fora do intervalo $[0, 4]$.

A topologia do gráfico $E \times \tau$ é determinada por suas ramificações. Em uma ramificação isócrona (onde o período não muda) há uma confluência de duas famílias distintas de órbitas periódicas; portanto, M tem quatro autovalores unitários e traço de M , (TrM), igual a 4 (observe os pontos assinalados por $4, \bar{4}$ ou 4^2 na fig. (5.2)). Em uma ramificação que dobra o período, dois autovalores devem ser -1 ; portanto, $TrM = 0$ (observe os pontos assinalados por Z e Z^2 na fig. (5.2)). Há também triplicação de período, onde $TrM = 1$, quadruplicação de período, onde $TrM = 2$ e assim por diante. Em resumo, podemos dizer que o valor do TrM determina a estabilidade e a bifurcação de uma família de órbitas periódicas. Os símbolos, $\bar{4}$, 4^2 e Z^2 indicam a variação de TrM com E , conforme a figura (6.1) extraída da ref. [3].

Percebemos que a medida que aumentamos o período τ , o gráfico $E \times \tau$ torna-se cada vez mais denso e complicado. Mas "não é denso em todo lugar", ou seja, as famílias mais importantes, assim como as densidades mais baixas de $E \times \tau$ são encontradas para pequenos valores de τ .

6.1 Famílias de Órbitas periódicas do potencial Nelson

No capítulo anterior, discutimos amplamente a forma do potencial Nelson, de forma que partimos, agora, diretamente para as principais famílias de órbitas periódicas.

A simetria de reversão temporal dita a existência de dois tipos de trajetórias periódicas, que são tradicionalmente conhecidas como **librações** (a trajetória é sua própria reversa-temporal; portanto a partícula segue o mesmo caminho em ambas direções, com pontos de retorno no final) e **rotações** (a partícula segue um caminho fechado em uma única direção; a direção é oposta para a trajetória reversa-temporal). Na fig. (5.2), as rotações são indicadas pela letra grega ρ , as famílias não marcadas são as librações, indica-se também, o intervalo de TrM , usando linhas grossas ou símbolo s para as trajetórias estáveis e linhas finas ou o símbolo u para as instáveis. Enfim, nesta figura temos todas as possíveis informações acerca das famílias Vertical **V** e Horizontal **H** e suas principais bifurcações, pois foram calculadas cerca de 4000 trajetórias, compreendendo aproximadamente 40 famílias. Nosso trabalho, muito menos laborioso, enfocou o que acontece com as principais famílias, **H** e **V**, ao quebrarmos as simetrias deste potencial, em especial, nos restringimos a observar como se altera a bifurcação isócrona da família Horizontal, ao quebramos as simetrias do potencial Nelson. Dessa forma, o primeiro passo consistiu em calcular a família Horizontal **H** e essas bifurcações (**L** para a Libração) e (**R** para a Rotação), ilustradas na fig. (6.2).

Dado que nosso potencial tem simetria $x \rightarrow -x$, usualmente distinguimos entre famílias simétricas e assimétricas. As órbitas periódicas da família **H**, fig.(6.5), consistem de librações simétricas e as órbitas da família **R** são rotações simétricas¹, fig.(6.6), ou sejam, são espacialmente simétricas, mas são temporalmente assimétricas. As librações (órbitas da família **L**), ao contrário, são espacialmente assimétricas, mas tem simetria de reversão temporal, fig. (6.7).

¹Convém lembrar que de acordo com a fig. (6.4), a família **R** e a família **L** são degeneradas, ou sejam, são duplas

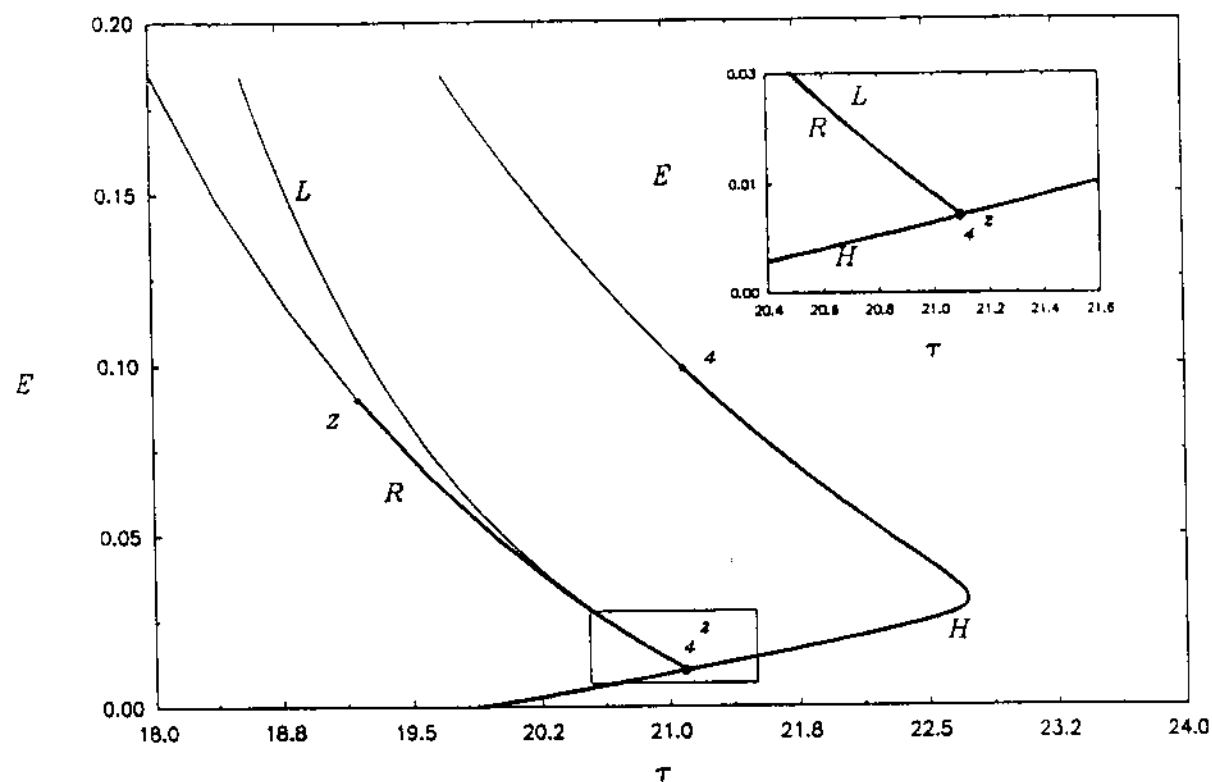


Figura 6.2: Diagrama $E \times \tau$ do potencial Nelson. A figura mostra parte da Família Horizontal H , com sua ramificação isócrona, L para a Libração e R para a Rotação. Usamos linha cheia para indicar que a família é estável e linha fina para indicar que a família é instável. Os pontos assinalados Z , 4 e 4^2 indicam o valor de TrM de acordo com a fig. (5.2). De fato, foi mostrado em [48] que 4^2 's não existem e que na verdade, existem dois 4 muito próximos, dando a impressão de um 4^2 , fig. (6.3).

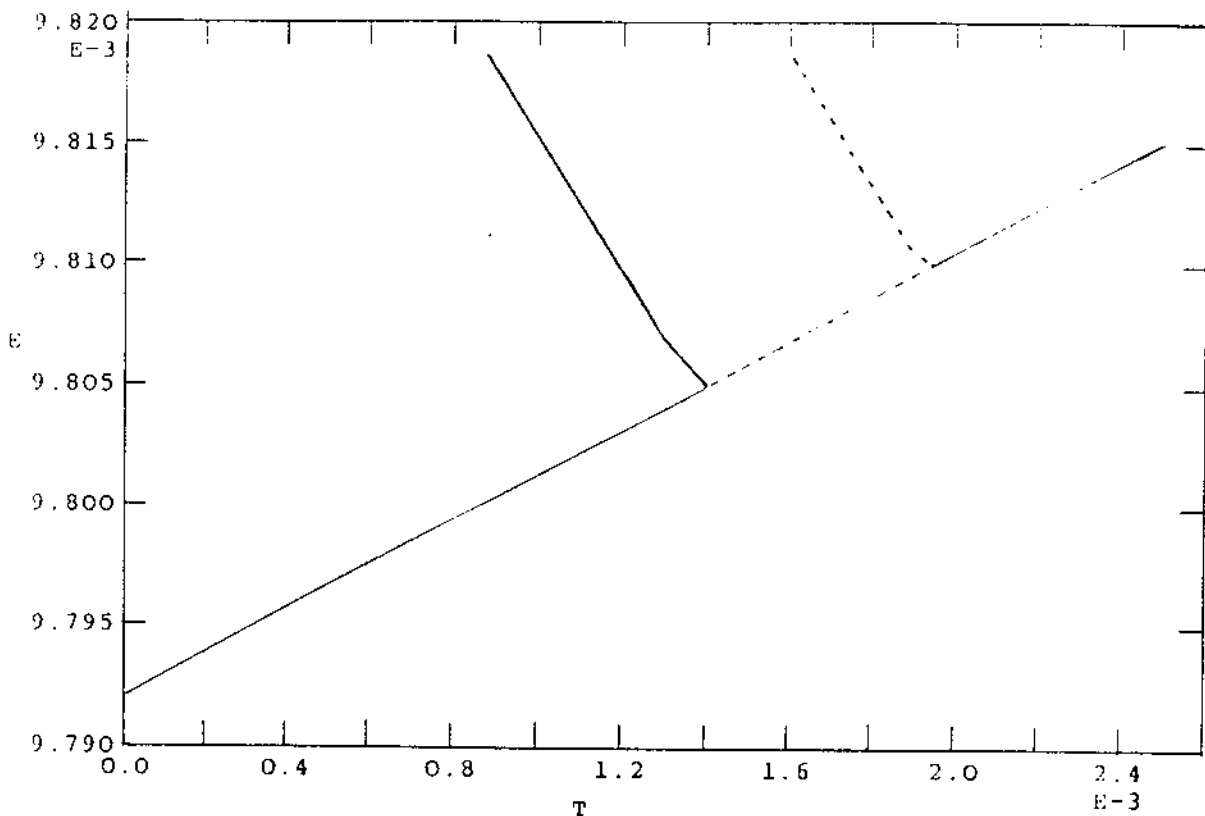


Figura 6.3: Diagrama $E \times \tau$ para a família Horizontal de Nelson. $E \times \tau$ ($\tau = T + 21.0000$) mostra duas bifurcações consecutivas ocorrendo em Nelson. Note que se a resolução não for suficientemente boa, a trajetória bifurcada parecerá sempre elíptica. Ver fig. (6.2 ou 5.2) para notação.

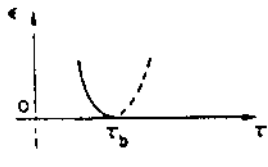
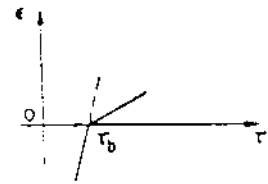
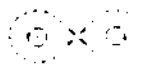
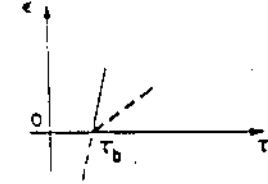
$E \times \tau$	Fixed points of P	
	$\epsilon \leq 0$	$\epsilon > 0$
		
		
		

Figura 6.4: Diagrama $E \times \tau$ e pontos fixos (com curvas invariantes) em um ponto de bifurcação isócrona. A linha cheia (pontilhada) é usada para indicar uma família elíptica (hiperbólica). Linhas finas (cheias ou pontilhadas) indicam que há duas famílias degeneradas ramificando-se do ponto de bifurcação.

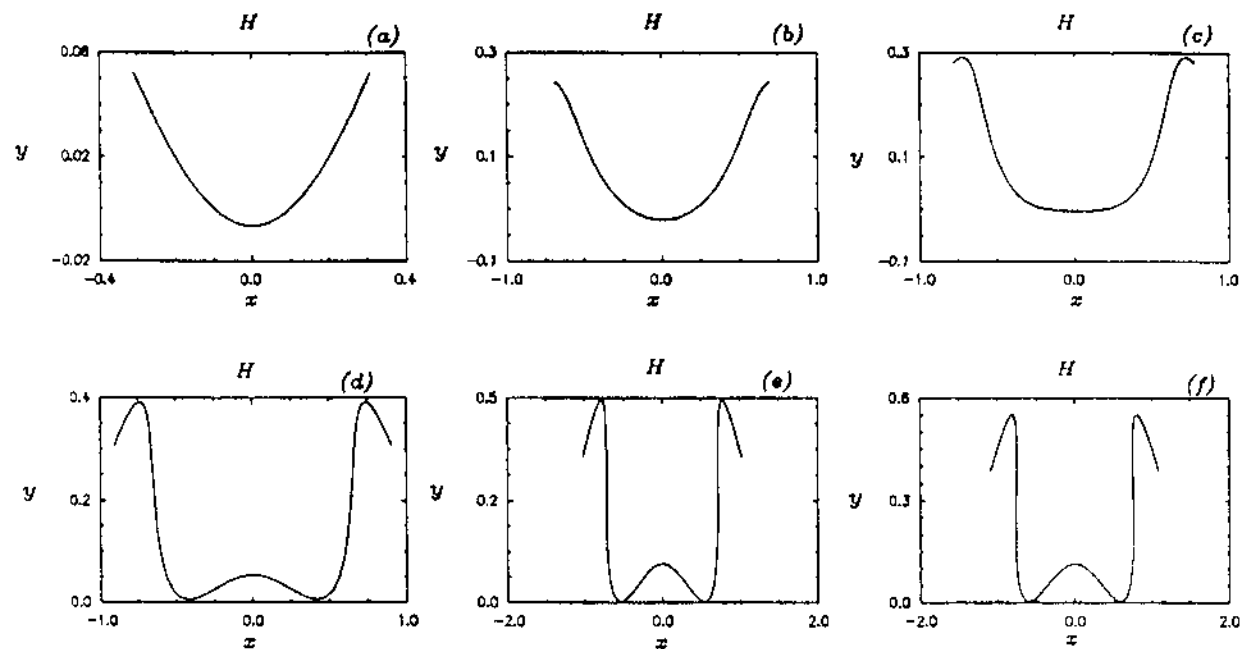


Figura 6.5: série de librações da família **H** do potencial Nelson, para as seguintes energias: a)0.005, b)0.02, c)0.03, d)0.05, e)0.08 e f)0.1.

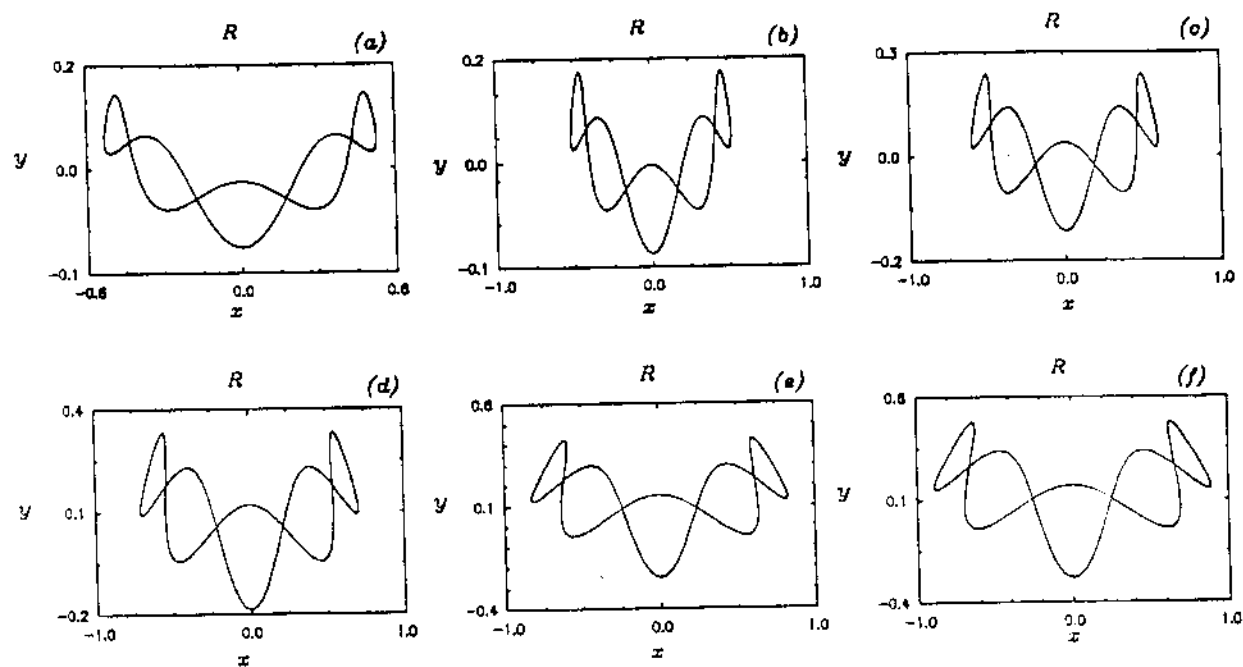


Figura 6.6: série de rotações da família R do potencial Nelson, para as seguintes energias: a)0.014, b)0.017, c)0.05, d) 0.08, e)0.1, f)0.12

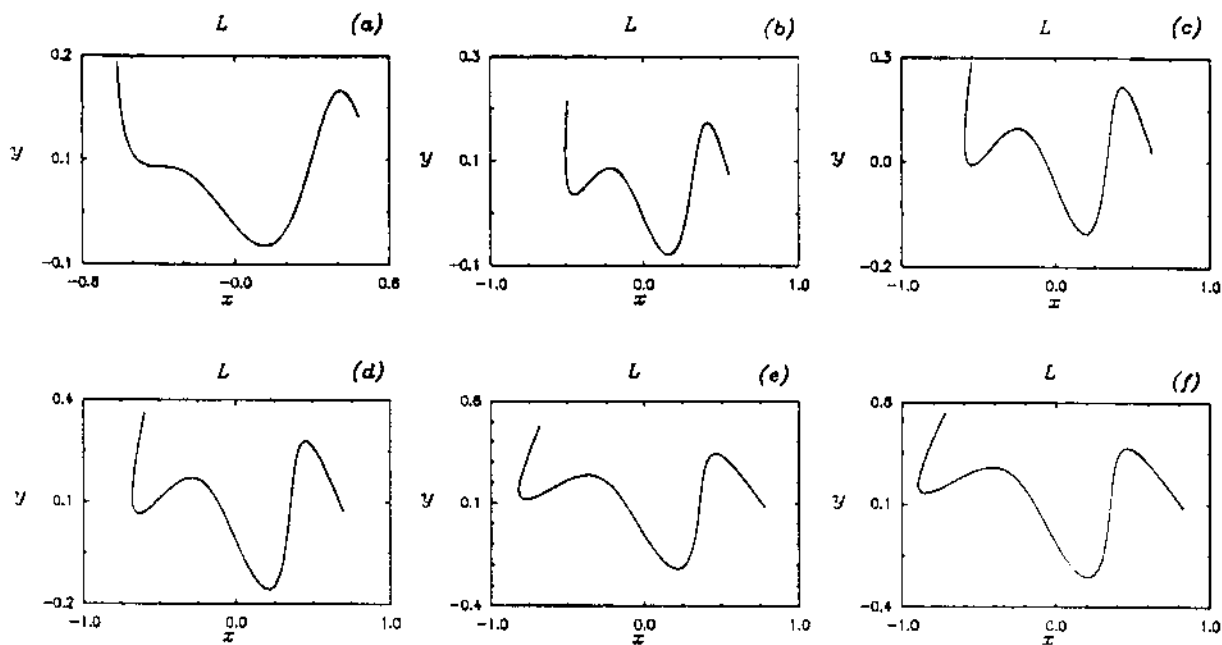


Figura 6.7: série de librações da família L do potencial Nelson, para as seguintes energias: a)0.012, b)0.021, c)0.05, d)0.08, e)0.1, f)0.15

Na Ref.[3] há um resumo de todas as possíveis bifurcações nas famílias de trajetórias periódicas, para Hamiltonianas possuindo 0, 1 ou 2 simetrias. Um estudo analítico neste sentido, foi feito por Meyer, [50], mas ele se restringiu ao caso genérico de Hamiltonianas sem simetrias. Em [3] o trabalho de Meyer é estendido incluindo-se Hamiltonianas com simetria de reversão temporal e simetria de reflexão espacial. Neste trabalho, encontra-se que estas duas simetrias são responsáveis por uma série de tipos interessantes de ramificações adicionais. Em particular, Meyer encontrou que ramificações isócronas não existem e que, em todo lugar onde $TrM = 1$, a curva $E \times \tau$ teria uma tangente horizontal, passando de estável para instável, mas sem ramificações. No potencial NELSON, há muitos exemplos deste comportamento. Um resultado importante do trabalho [48] é que as ramificações isócronas existem, desde que uma simetria esteja presente, ou $x \rightarrow -x$ ou reversão temporal, como ilustra a fig. (6.4). As rotações assimétricas, que não têm simetrias, são as únicas famílias em que nenhuma ramificação isócrona pode ocorrer.

Há uma diferença topológica interessante entre as librações e as rotações. As librações são mais persistentes; uma família de librações típicas tem uma curva muito mais longa no plano $E \times \tau$, com várias ramificações adicionais ligadas a ela. Assim, torna-se natural considerar as librações como as famílias "mais importantes". As rotações, por outro lado, sempre formam pontes curtas de ligação entre duas librações ou entre duas partes de uma libração, na curva $E \times \tau$.

Outra família importante no potencial NELSON é a família vertical V. A fig.(6.8), mostra essa família e duas de suas bifurcações principais, a duplicação de período (V2) e a triplicação de período (V3 e V3a). A família V consiste de librações simétricas e é estável até a energia $E \approx 0.15$, tornando-se então instável. Neste ponto, $TrM = 0$ e ocorre a duplicação de período, dando origem a família V2, que é uma libração simétrica, ver fig. (6.9), inicialmente estável, tornando-se instável para $E \approx 0.4$. Para $E \approx 0.077$, ocorre a triplicação de período, originando a família (V3) com dois ramos, um estável, a rotação simétrica fig. (6.10), e o outro instável, a libração assimétrica, fig. (6.10).

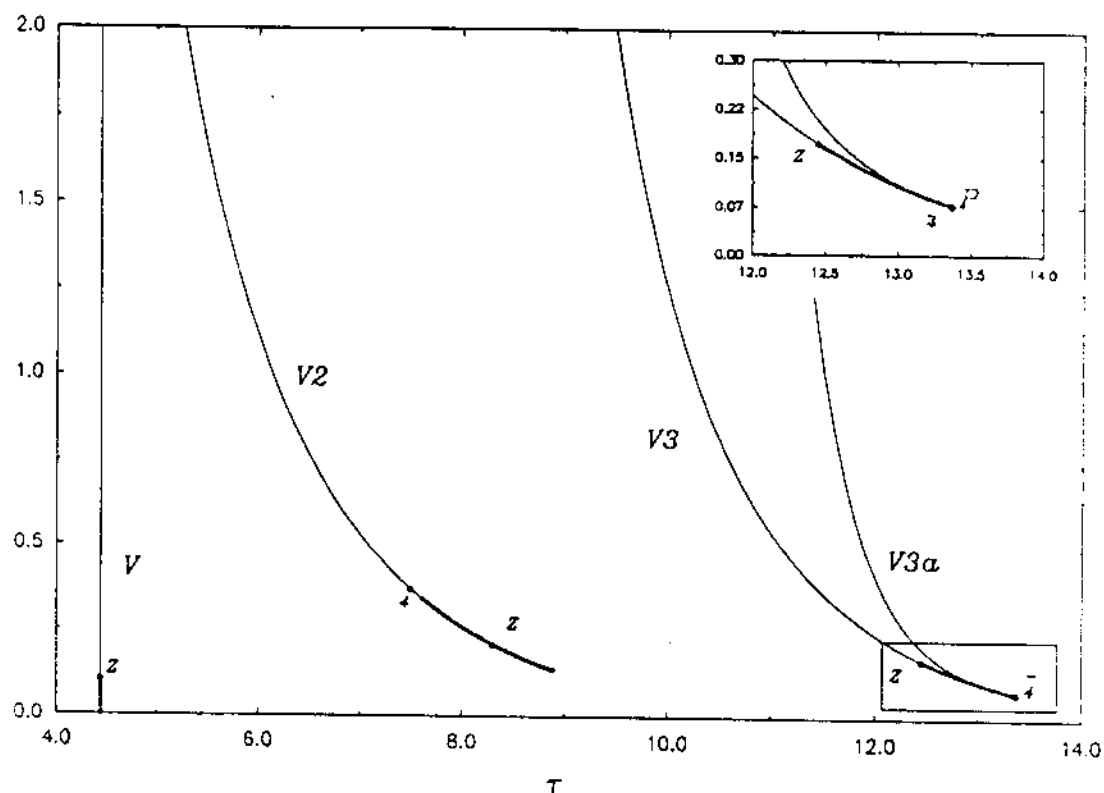


Figura 6.8: Diagrama $E \times \tau$ do potencial Nelson. Vemos a família Vertical (**V**), a duplicação (**V2**) e os dois ramos da triplificação (**V3** e **V3a**). As linhas cheias indicam estabilidade e as finas instabilidade. Os pontos assinalados por Z , Z^2 , 1 indicam o valor do TrM de acordo com a fig. (6.1) e a letra P indica o ponto de bifurcação.

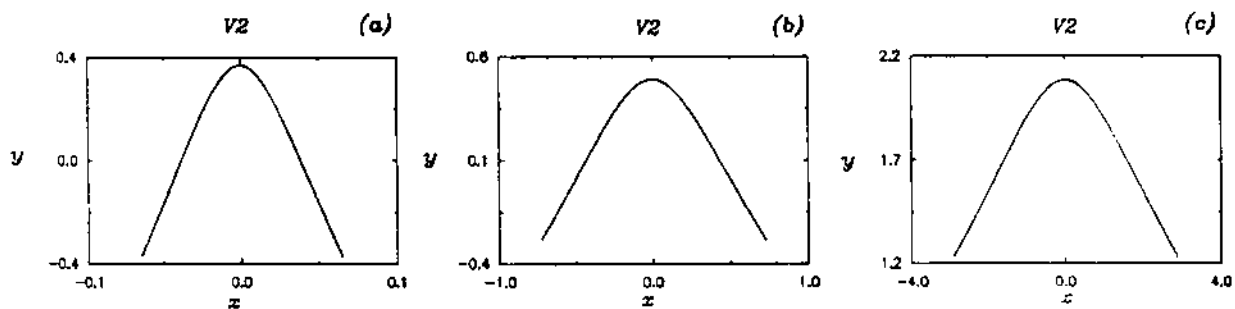


Figura 6.9: órbitas da duplicação da Família Vertical (V2) do potencial Nelson, para as seguintes energias: a)0.13, b)0.32, c)9.14

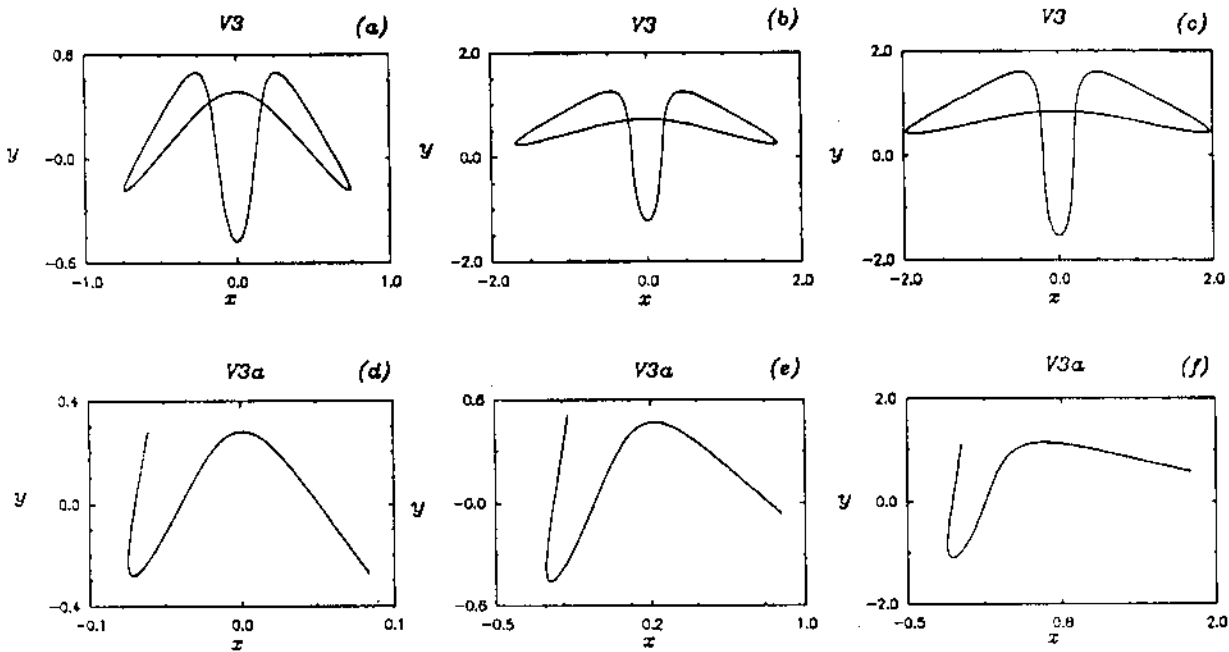


Figura 6.10: órbitas da triplicação da Família Vertical ($V3$) para o potencial Nelson, com as seguintes energias: a)0.237, b)1.51, c)2.43 e ($V3a$) com as seguintes energias: d)0.08, e)0.24, f)1.21

No limite de baixas energias, toda essa complicação se reduz a dois simples osciladores harmônicos, um horizontal e um vertical com períodos não congruentes. Olhando a forma do potencial, vemos que $V(x = 0, y)$ é puramente quadrático e portanto, as oscilações verticais (família V) mantêm seu comportamento linear e seu período constante para todas as amplitudes; elas aparecem no gráfico $E \times \tau$ como uma linha vertical. Isso não acontece com as oscilações horizontais (família H), sua amplitude aumenta com a energia.

Há inúmeras outras famílias e um número de interessantes ramificações que surgem à medida que aumentamos a energia. Na Ref.[3], as classificações gerais de todas as possíveis ramificações é explorada e na Ref.[4] o potencial NELSON é amplamente estudado. Nós paramos neste ponto, salientando que estes trabalhos são fundamentais para um bom entendimento do que se segue. Primeiramente, quebraremos a simetria de reflexão espacial, ligando o parâmetro c e em seguida, quebraremos a simetria de reversão temporal, submetendo a partícula carregada a um campo magnético perpendicular ao plano xy , ligado pelo parâmetro β . O potencial Nelson generalizado, fica assim, na forma

$$H = \frac{(p_x + \beta y)^2}{2} + \frac{(p_y - \beta x)^2}{2} + \left(y - \frac{x^2}{2} + cx^3\right)^2 + \mu \frac{x^2}{2} \quad (6.1)$$

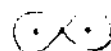
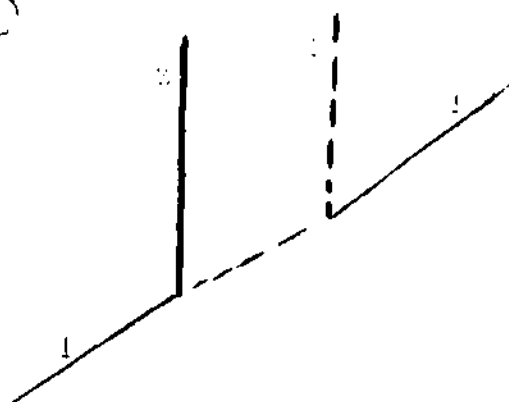
onde $\beta = eB_0/2c$ e $\mu = 0.1$.

6.2 Quebra da simetria de reflexão espacial na família de órbitas periódicas

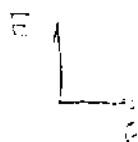
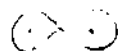
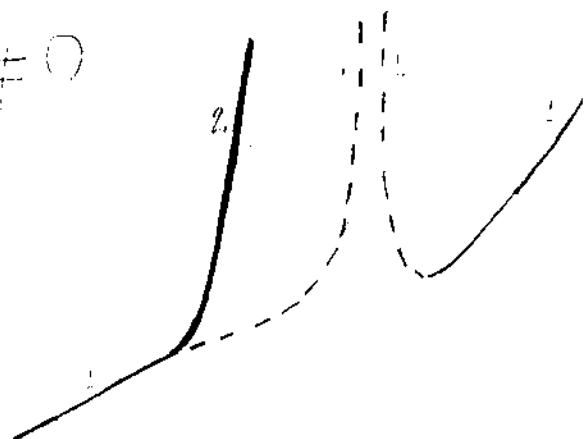
Primeiramente fazemos o parâmetro $c \neq 0$, eq.(6.1), mantendo $\beta = 0$. Fizemos $c = 0.1$ e calculamos as famílias de órbitas periódicas para o potencial assimetrizado. Nesse caso, o número total de simetrias do sistema é um, a simetria de reversão temporal. A trajetória da família horizontal, **Hc**, agora uma libração assimétrica, conforme a fig. (6.12), é inicialmente estável, até que $TrM = 4$ e dá origem à uma ramificação estável, ou melhor,

duas famílias estáveis e segue instável, ver fig. (6.11). A família Rc é uma rotação assimétrica, conforme a fig. (6.13). Ela nasce estável e torna-se instável em $E = 0.09$, pois neste ponto TrM passa por zero. A família L , original, se descola de H , dando origem a família Lc , que continua sendo uma libração assimétrica, conforme a fig. (6.14). A seção de Poincaré na proximidade do ponto de bifurcação é esquematizada a seguir, para $c = 0$ e $c \neq 0$.

$C=0$



$C \neq 0$



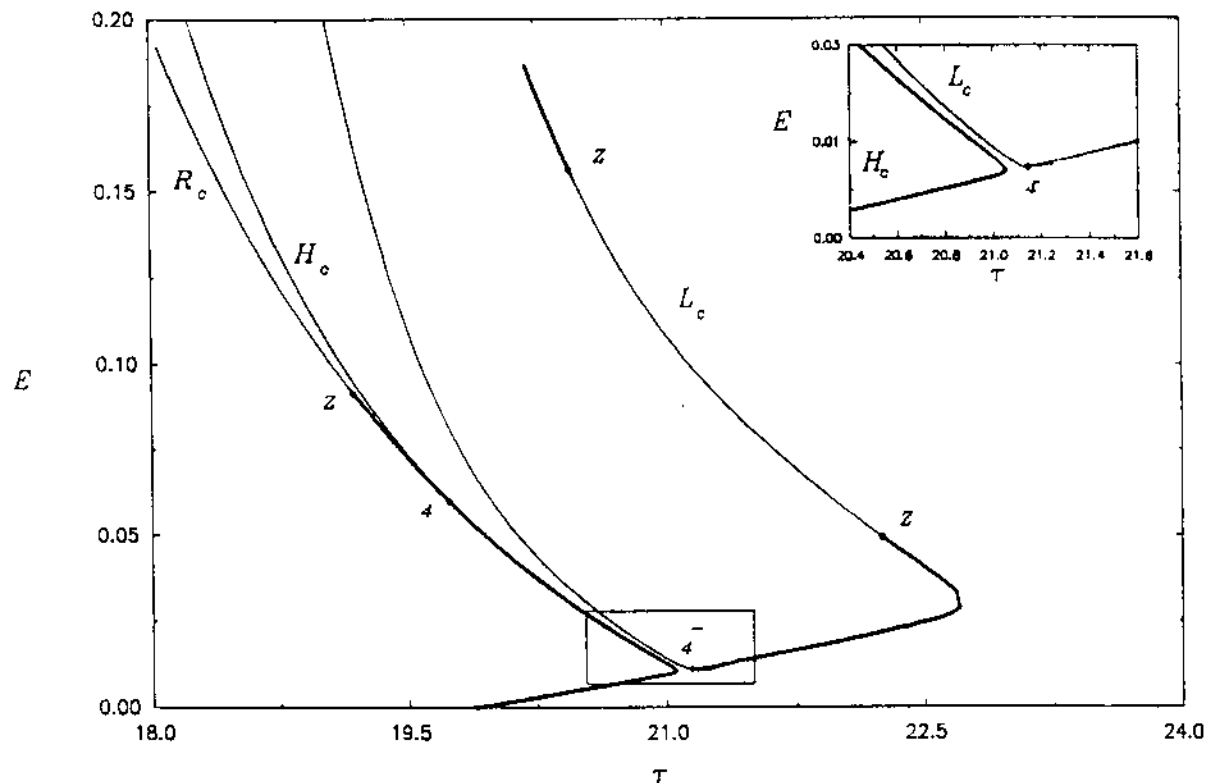


Figura 6.11: Diagrama $E \times \tau$ para o potencial Nelson assimetrizado ($\epsilon = 0.1$). A figura mostra a família Horizontal H_c , a rotação R_c e a libração L_c . A notação é a mesma da fig. (6.2).

A família Vertical V não se altera com a quebra da simetria $x \rightarrow -x$, pois V , não sente o parâmetro ϵ , continuando uma linha vertical em $\tau \approx 4.443$ (isso pode ser mostrado através das equações de movimento). Calculamos assim, somente as famílias da triplicação de período, $V3c$, $V31c$ e $V3ac$, fig. (6.15). A família $V3ac$, consiste de librações assimétricas e é uma família degenerada. Ao passar pelo ponto de bifurcação temos então uma outra família, $V3c$ que inicialmente é instável. Ao passar pelo ponto onde $TrM = 4$, essa família torna-se estável. $V3c$ consiste de librações assimétricas e continua estável até passar novamente por $TrM = 4$, perdendo

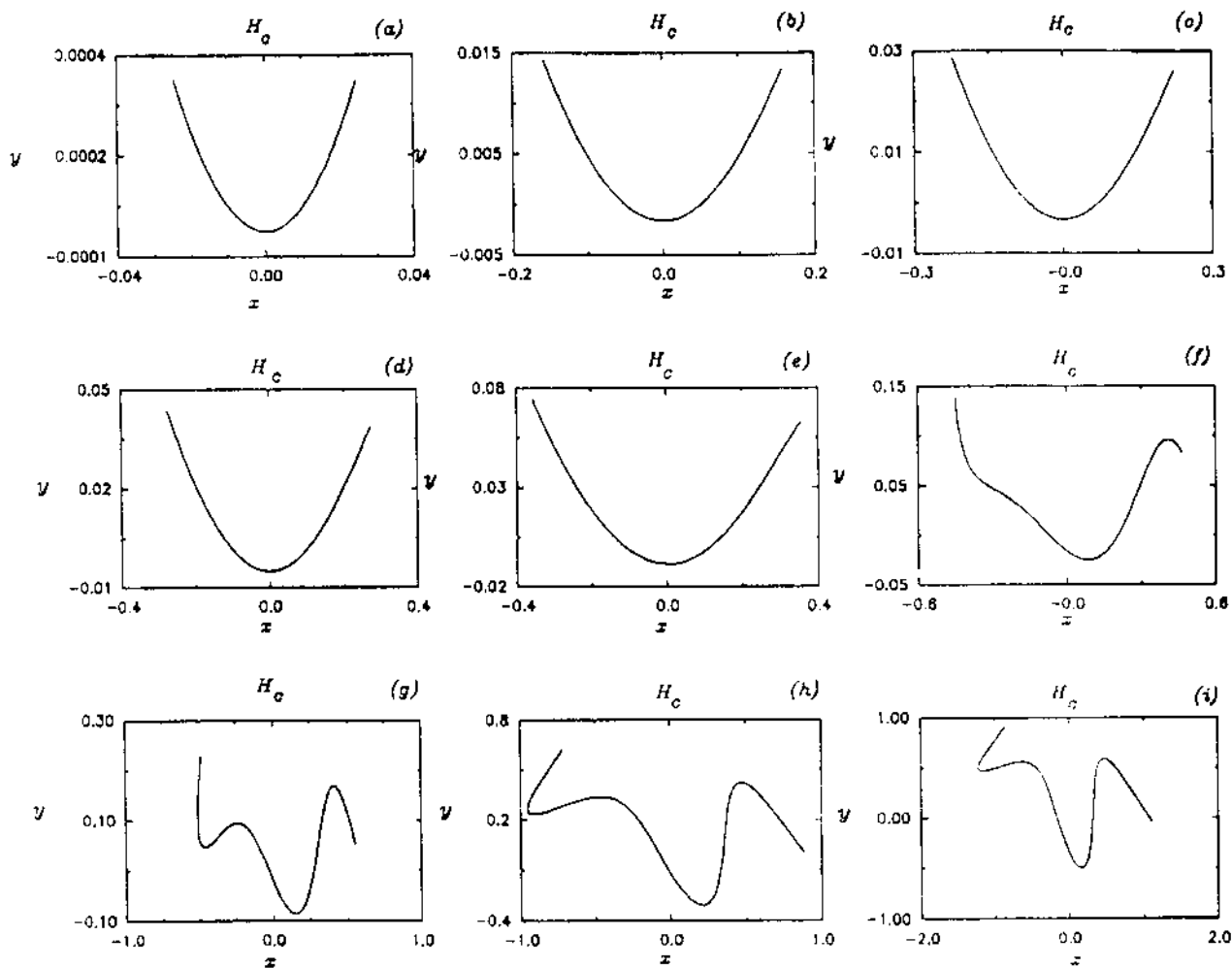


Figura 6.12: série de órbitas de He para o potencial Nelson assimetrizado ($c = 0.1$). As librações, que eram simétricas para $c = 0$ tornaram-se assimétricas. A sequência tem as respectivas energias: a)0.0003, b)0.0012, c)0.0025, d)0.0037, e)0.006, f)0.010, g)0.021, h)0.13, i)0.29

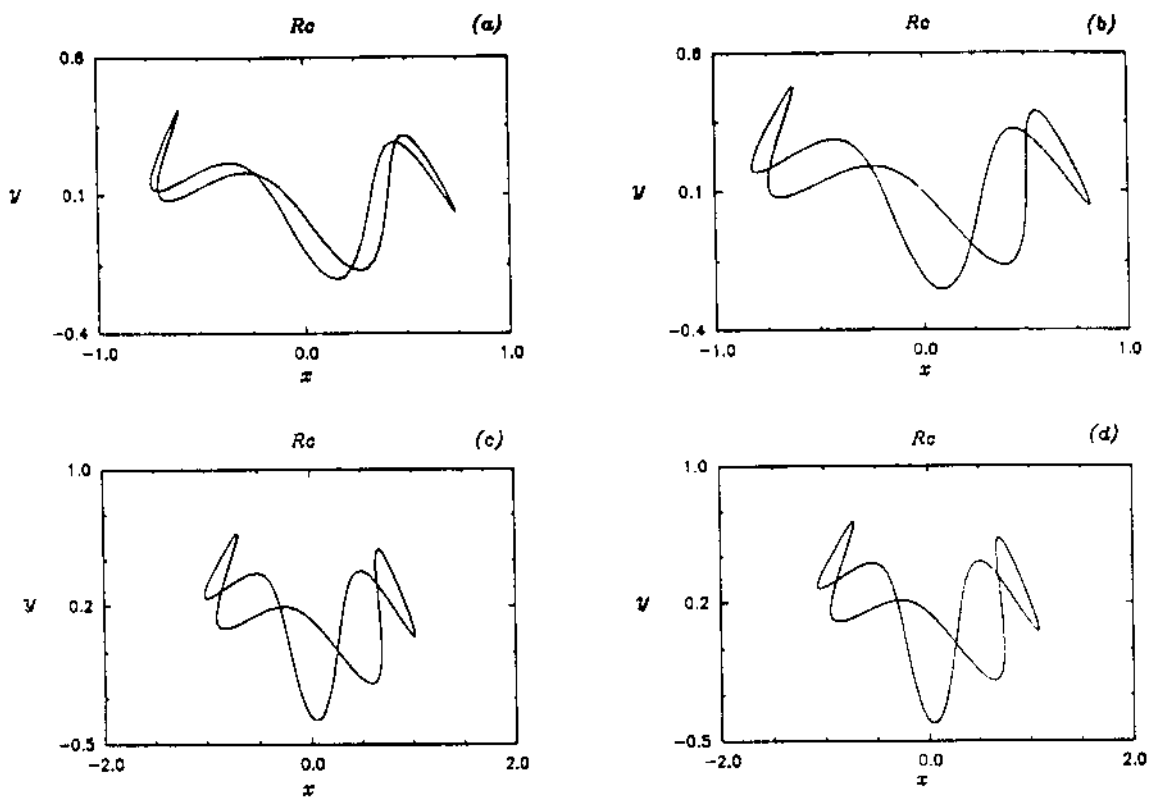


Figura 6.13: série de órbitas de Rc para o potencial Nelson assimetrizado ($c = 0.1$). As rotações, que eram simétricas para $c = 0$ tornaram-se assimétricas. A sequência tem as respectivas energias: a)0.06, b)0.08, c)0.16, d)0.189

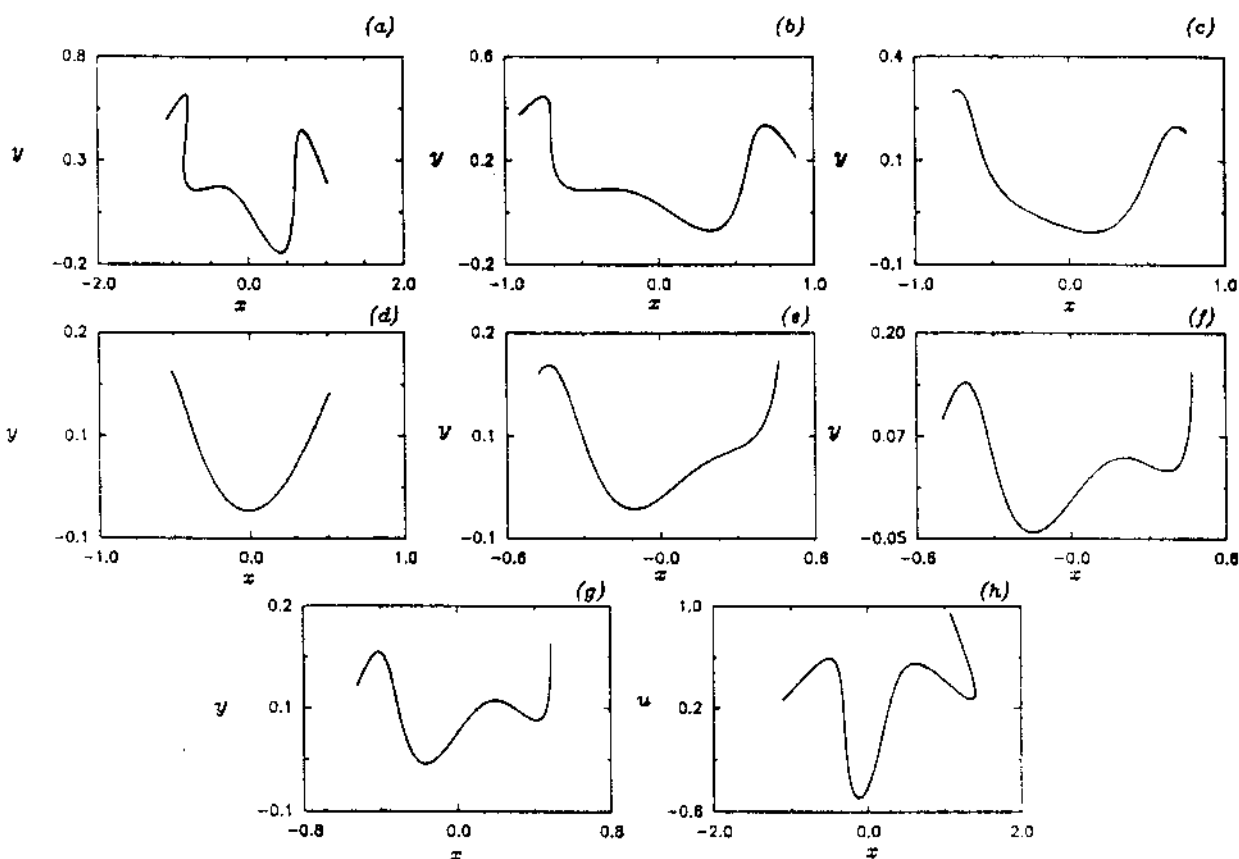


Figura 6.14: série de órbitas de Lc para o potencial Nelson assimetrizado ($c = 0.1$). A sequência tem os respectivos (E, τ) : a)(0.096,21.15), b)(0.051, 22.2), c)(0.029,22.7) d)(0.013,21.4) e)(0.011,21.11), f)(0.013,21.4), g)(0.016,20.91) e h)(0.28,18.75). A órbita em (d), que está nas proximidades do ponto onde $TeM = 1$, separa a série (a,c) da série (e,h) que é uma a reflexão da outra.

a estabilidade e dando origem a uma ramificação isócrona, a família **V31c** que inicialmente é estável e perde a estabilidade ao passar por $TrM = 0$. Essa nova família **V3ac** consiste de rotações assimétricas, conforme ilustrado na fig. (6.16).

Ressaltamos que a quebra da simetria de reflexão espacial, alterou o padrão de classificação de bifurcações, conforme esquematizaremos em seguida. A seção de Poincaré na vizinhança do ponto de bifurcação, indicado por **P** nas figs. (6.8) e (6.15), mostram bifurcações qualitativamente diferentes, fig. (6.18).

Mostramos no decorrer desta seção que houve alterações qualitativas no padrão de bifurcações, quando fizemos $c = 0.1$. Mas como nos restringimos ao comportamento das bifurcações isócronas, o leitor pode ter sido induzido a pensar que, em geral, não houve alterações drásticas nas famílias. Contudo, convém lembrar que as seções de Poincaré mostram que o comportamento das famílias tornou-se ainda mais instável, à medida que aumentamos a energia, para $c = 0.1$, e que mesmo para energias relativamente baixas, aparecem inúmeras ilhas que retratam as novas bifurcações de famílias que não estudamos, ou mesmo bifurcações das ramificações que estamos estudando, pois toda vez que TrM é igual a zero, um dois, etc., e levando em conta o número de simetrias das órbitas de uma família, novas bifurcações (como duplicação, triplicação, quadruplicação, etc.) devem aparecer e ainda mais, se simetrias são presentes, há em geral mais de uma possibilidade para as novas bifurcações, diferentemente da classificação de Meyer, para sistemas generalizados, onde temos uma única possibilidade de bifurcação, exceto na quadruplicação onde temos duas possibilidades [50].

6.3 Quebra da simetria de reversão temporal na família de órbitas periódicas

Finalmente, ligamos o parâmetro $\beta = 0.03$, que quebra a simetria de reversão temporal, conforme a eq. (6.1). Ao fazermos isso, nosso sistema não apresenta mais, nenhuma simetria e esperamos obter bifurcações genéricas. As únicas órbitas possíveis agora, são as rotações assimétricas, figs. (6.20).

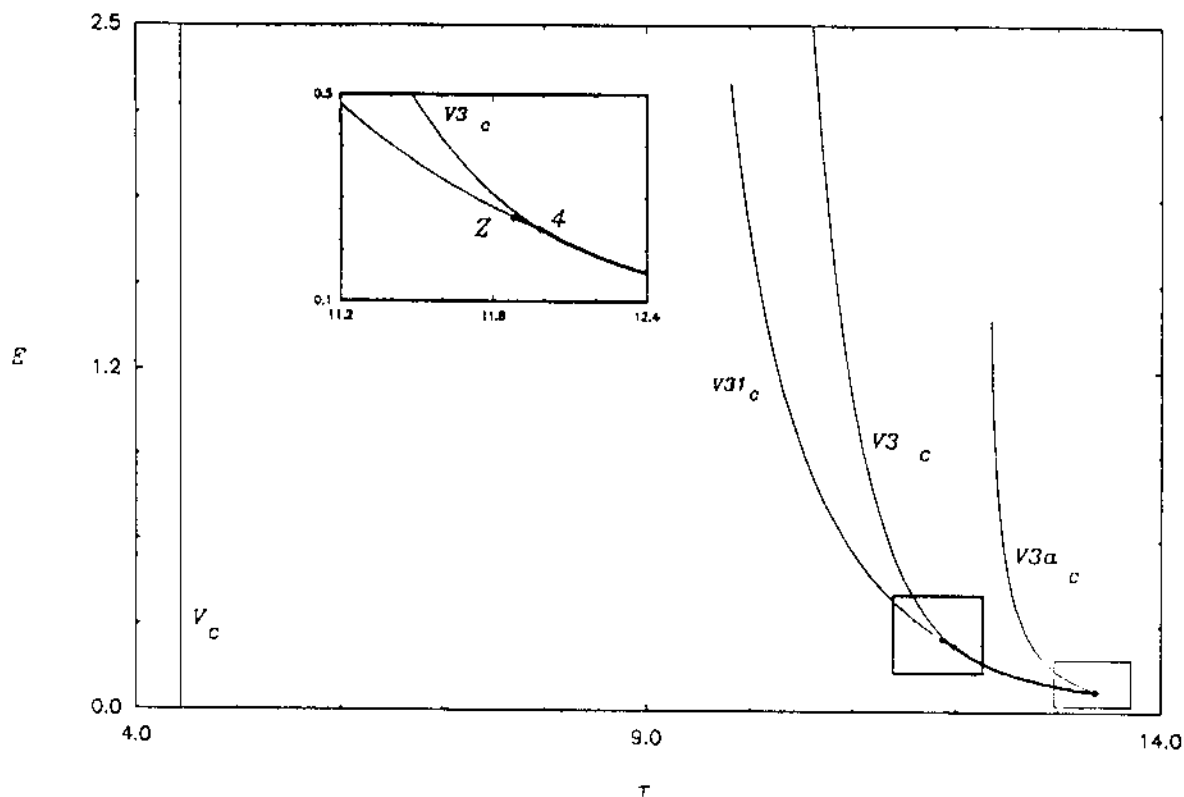


Figura 6.15: Diagrama $E \times \tau$ para a Família Vertical do potencial Nelson assimetrizado ($c = 0.1$). A notação é a mesma da fig. (6.2). Convém ressaltar que a seção de Poincaré nas vizinhanças do ponto de bifurcação P, revelam um padrão de bifurcação qualitativamente diferente daquela do potencial Nelson original.

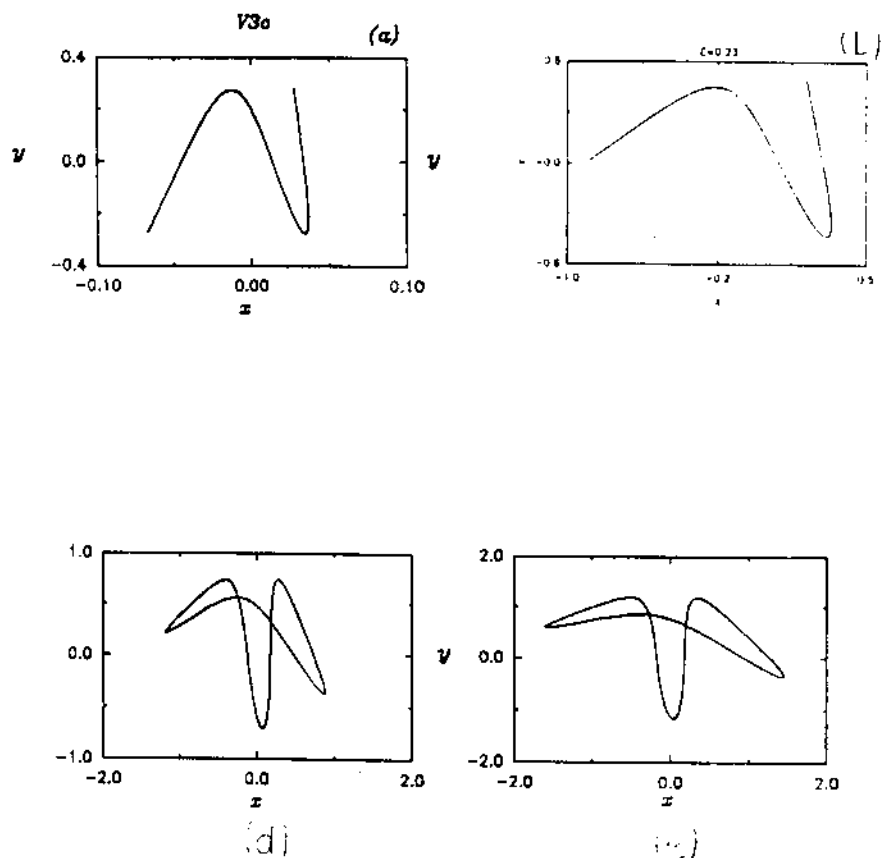


Figura 6.16: algumas órbitas periódicas da família $V3c$ para as seguintes energias: a) 0.190; b) 0.230 e $V31c$ para as seguintes energias: d) 0.520 e e) 1.360

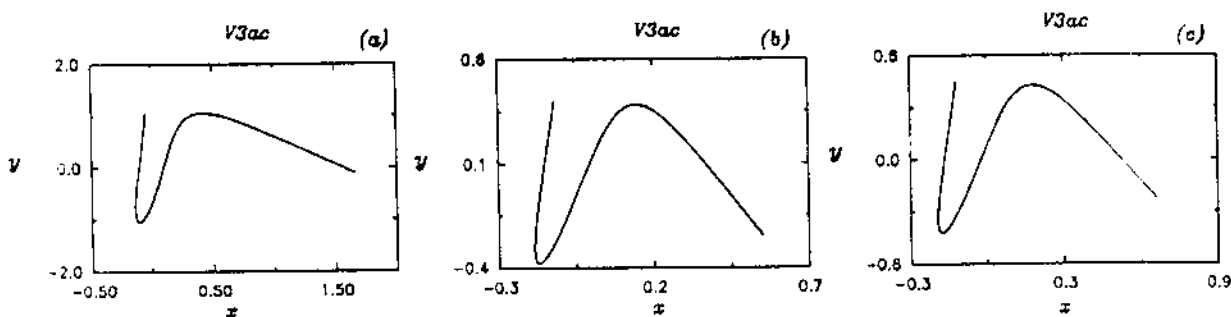


Figura 6.17: algumas órbitas periódicas de $V3ac$ para as seguintes energias: a) 0.077, b) 0.158, c) 1.93

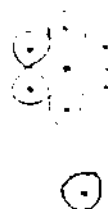
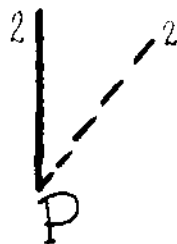
6.21 e 6.22) e estas não produzem ramificações isócronas, conforme já dissemos. Consequentemente, vemos no diagrama (6.19) que R_β se desligou de H_β^2

A família H_β , permanece estável até $E \approx 0.09$ onde $TrM = 0$ e então torna-se instável. A família R_β , é sempre instável, pelo menos até a energia calculada, pois não conseguimos obter numericamente o ramo estável dessa família. O ramo estável foi colocado na fig. (6.19), para mostrar o que esperavamos obter. A família L_β é instável até $\tau = 21.13$ e $\epsilon = 0.011$ onde $TrM = 4$, tornando-se aí estável, indo estável até $\tau = 22.7$ para $E = 0.048$, onde TrM passa por zero, tornando-se novamente instável.

Para a família Vertical, fig. (6.23), o parâmetro $\beta = 0.03$ é pequeno para causar uma alteração visível na família V_β , ou seja, deslocá-la. Fizemos

²Nota: Mantemos as letras R , L e H com um sub-índice β , para as famílias, mas devemos lembrar que quando $c = 0.1$ e $\beta = 0.03$ todas as órbitas periódicas são rotações assimétricas, ou seja, não existem librações.

$$C=0$$



$$C \neq 0$$

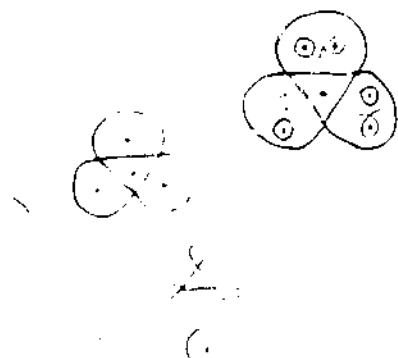
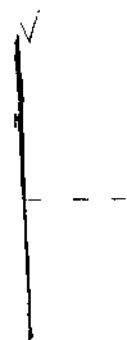


Figura 6.18: seção de Poincaré nas vizinhanças do ponto fixo P , da triplicação de período da família vertical. a) para $c = 0$ e b) para $c \neq 0$.

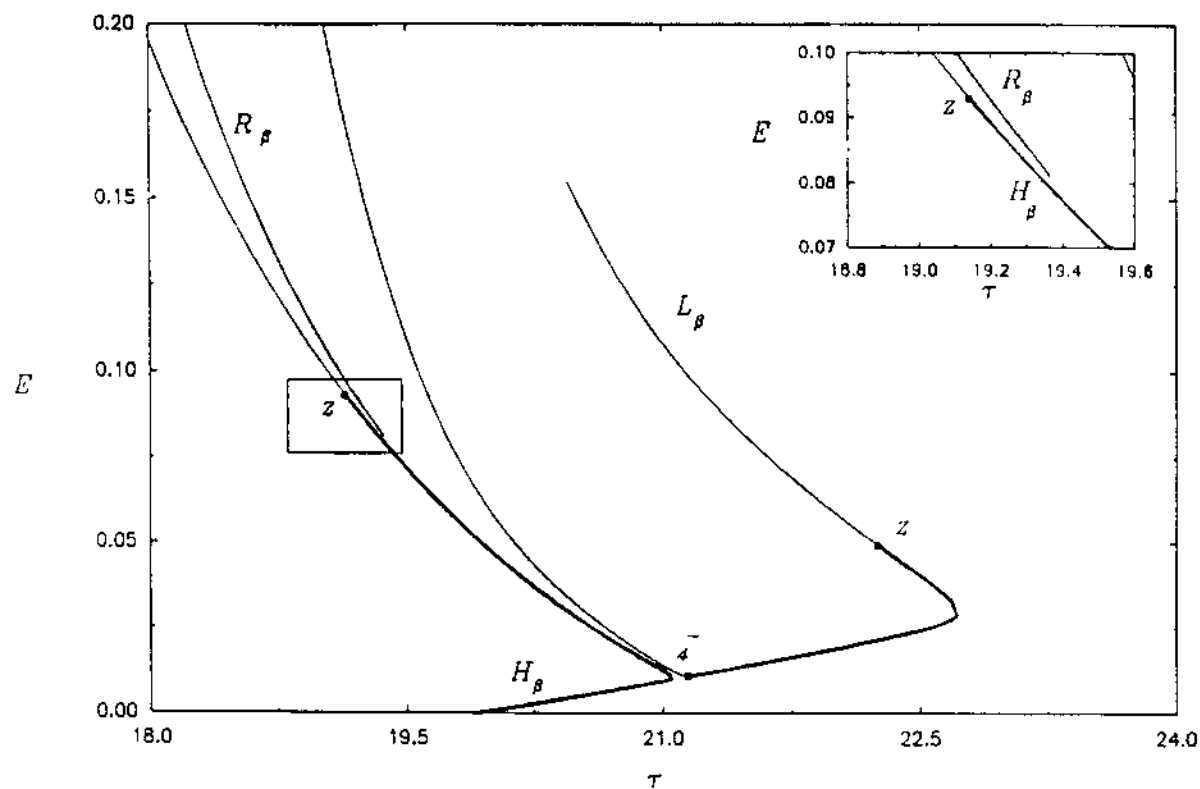


Figura 6.19: Diagrama $E \times \tau$ para a família horizontal do potencial Nelson generalizado ($c = 0.1$ e $\beta = 0.03$). A notação é a mesma da figura (6.2).

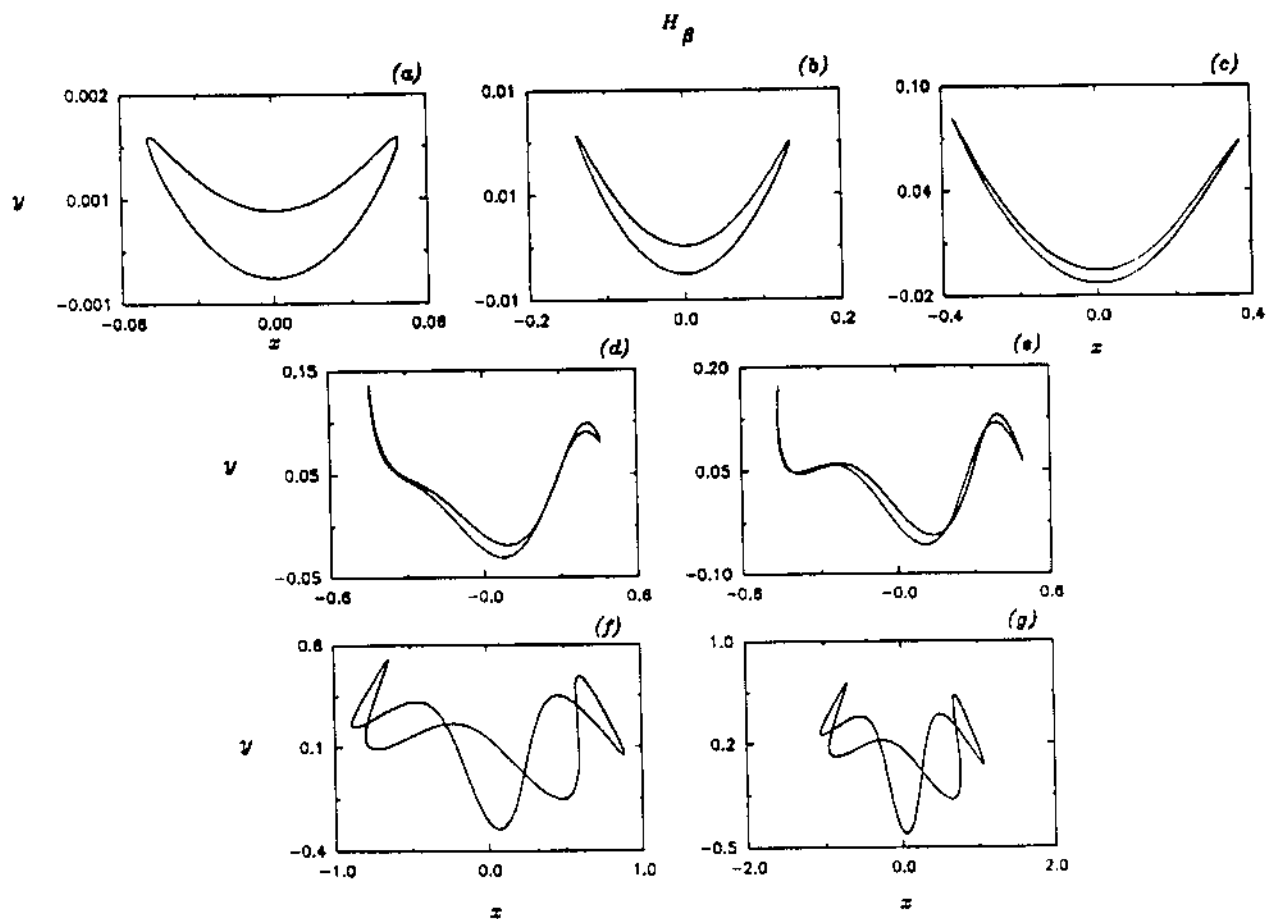


Figura 6.20: órbitas periódicas da família H_β para o potencial Nelson generalizado ($\beta = 0.03$ e $c = 0.1$) para as seguintes energias: a) 0.00012, b) 0.0009, c) 0.007, d) 0.0107, e) 0.0139, f) 0.106, g) 0.187

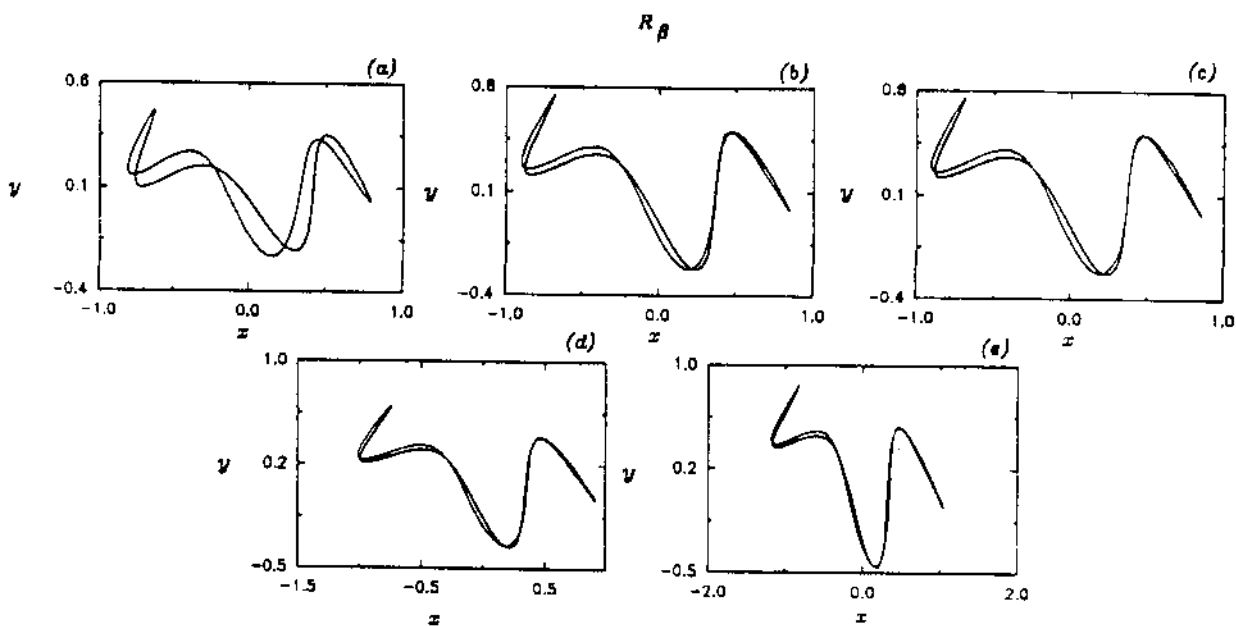


Figura 6.21: órbitas periódicas da família R_β para o potencial Nelson generalizado ($\beta = 0.03$ e $c = 0.1$) para as seguintes energias: a) 0.08, b) 0.111, c) 0.114, d) 0.157, e) 0.250

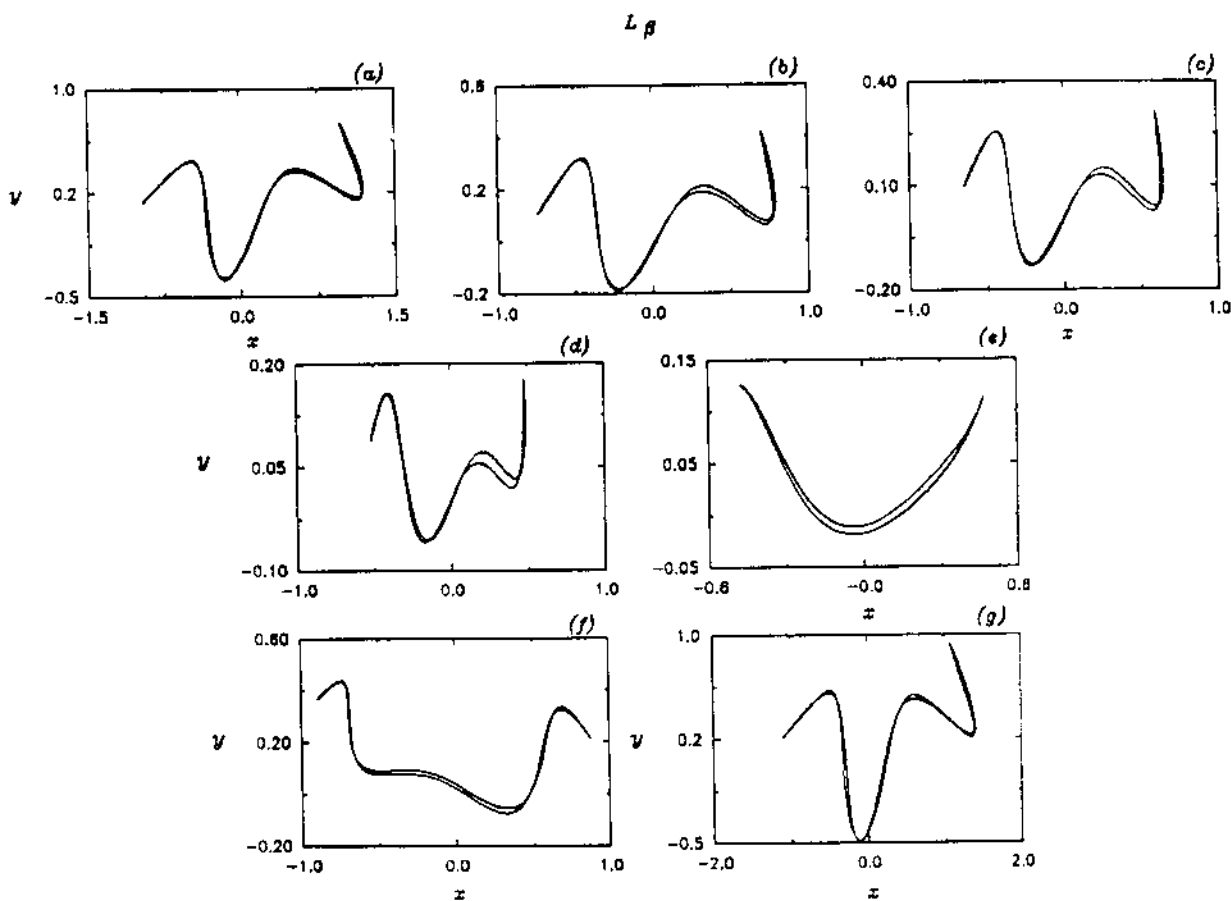


Figura 6.22: órbitas periódicas da família L_β para o potencial Nelson generalizado ($\beta = 0.03$ e $c = 0.1$) para os seguintes (τ, E) : a)(19.115,0.177), b)(19.91,0.0655), c)(20.31,0.040), d)(20.915,0.0165), e)(21.195,0.011), f)(22.25,0.049), g)(19.14,0.172)

então, o cálculo da família Vertical para $\beta = 2$ e o período de V_β , foi para $\tau \approx 2.56$.

Com relação às bifurcações da família Vertical, a triplicação de período apresenta o mesmo comportamento do caso anterior, ou seja, o potencial Nelson assimetrizado ($c = 0.1$ e $\beta = 0$). Não houve alteração quanto à bifurcação. O ramo $V3_\beta$ é instável até $E = 0.24$ onde $TrM = 0$, tornando-se então estável. Quando $TrM = 4$, no ponto onde $dE/d\tau = 0$, ocorre uma bifurcação do caso genérico, ou seja, a trajetória muda de estável para instável, seguindo instável o ramo $V3a_\beta$. Passando então pelo ponto de bifurcação P, esquematizado na seção anterior. Algumas trajetórias de V_β , $V3_\beta$ e $V3a_\beta$ são representadas nas respectivas figuras, figs. (6.24, 6.25, 6.26).

Para finalizar este capítulo, deveríamos ainda apresentar o método de cálculo de órbitas periódicas, desenvolvido por Baranger, [47] e parte do estudo analítico das bifurcações de trajetórias periódicas simétricas, desenvolvido por M. A. M. de Aguiar et. al. em [3], mas tudo isso poderia tornar esta dissertação ainda mais extensa, de forma que preferimos não reportá-los aqui. Lembramos porém, que o método desenvolvido por Baranger é extremamente convergente e rápido, servindo tanto para o cálculo de órbitas estáveis quanto instáveis, com grande precisão e que o segundo trabalho, juntamente com [4] são essenciais para o entendimento dos nossos resultados.

O cálculo das famílias consistiu primeiramente, em encontrar a família H e suas bifurcações, R e L e a família V e suas bifurcações $V2$, $V3$ e $V3a$ do potencial NELSON original. Nesse caso, para baixas energias, a solução harmônica, é um bom "chute". Obtidas essas famílias, partimos para as quebras de simetria, usando essas famílias como "chute" para o cálculo das famílias do potencial assimetrizado e enfim da partícula sujeita ao campo magnético perpendicular ao plano xy . Os parâmetros escolhidos devem satisfazer a relação que garante a forma positivo-definida da Hamiltoniana, de modo que foram aleatórios, mas não tão aleatórios. E ainda, deveriam ser pequenos o suficiente para usarmos as soluções anteriores como chute e grandes o suficiente para tornar visíveis as alterações nas famílias de órbitas periódicas. Com o objetivo de medirmos a separação de H_c de L_c , fig. (6.11).

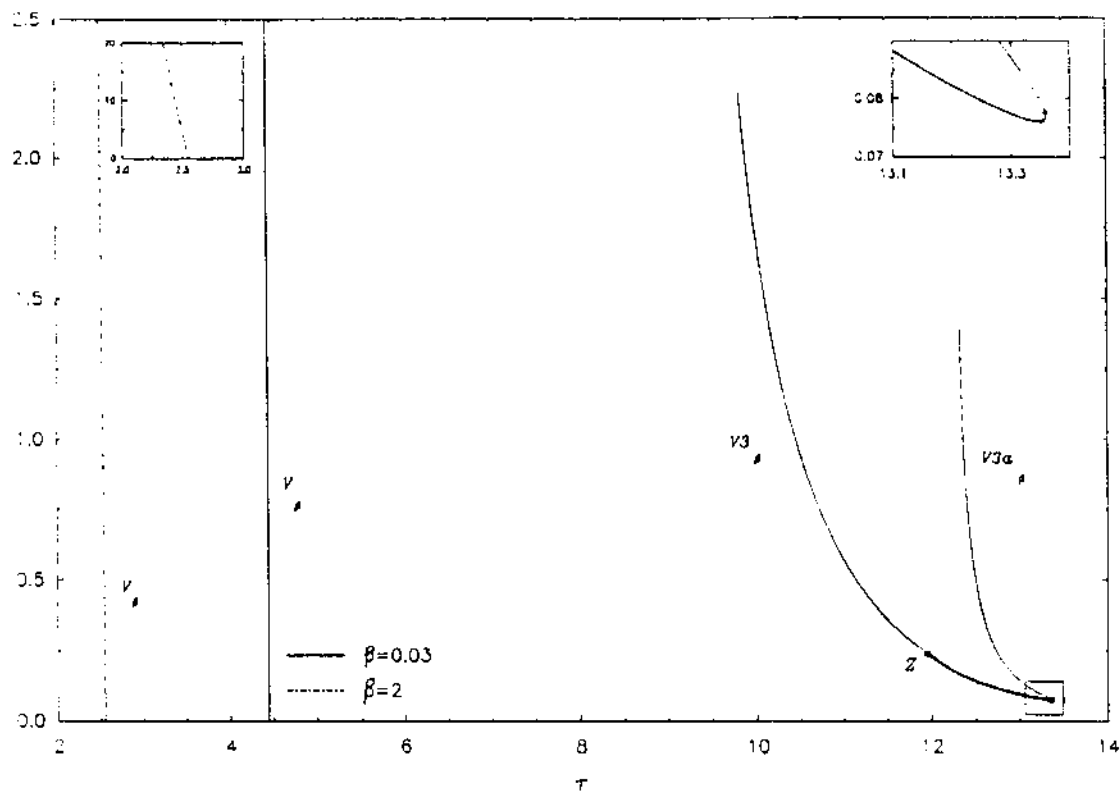


Figura 6.23: Diagrama $E' \times \tau$ da família vertical para o potencial Nelson generalizado ($c = 0.1$ e $\beta = 0.03$). Para $\beta = 0.03$, a família vertical aparece intocavelmente em $\tau = 4.443$ enquanto que para $\beta = 2.0$, a família é deslocada para $\tau \approx 2.56$.

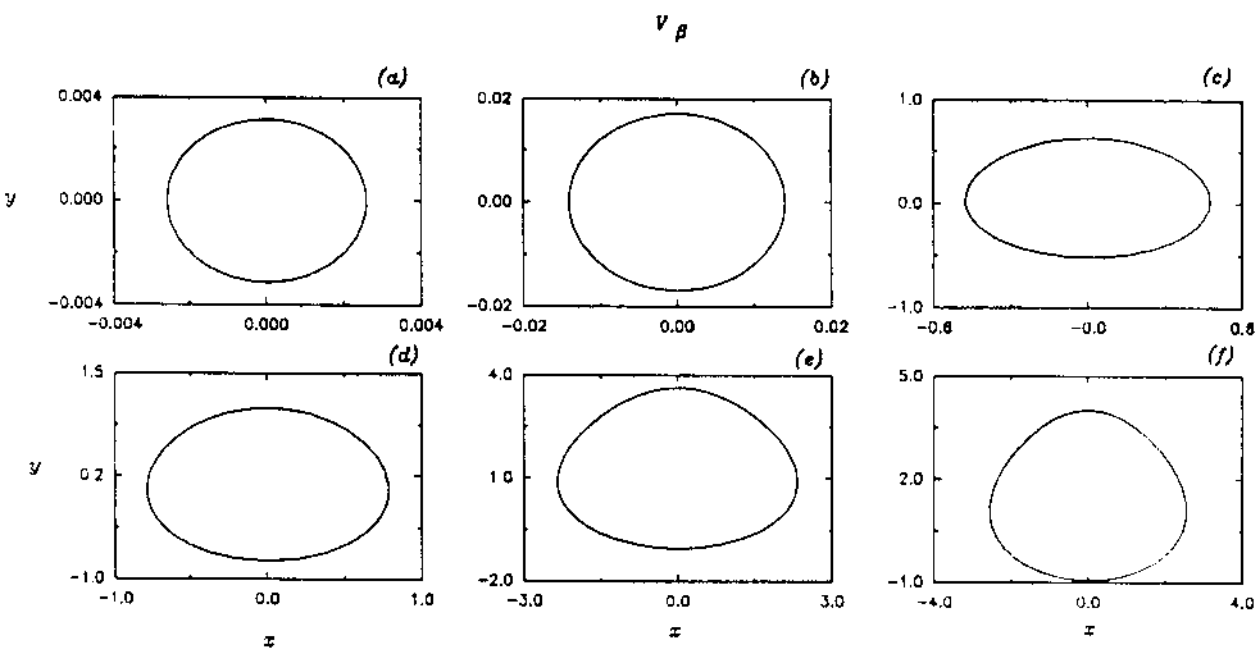


Figura 6.24: órbitas periódicas da família vertical V_β para o potencial Nelson assimetrizado ($c = 0$ e $\beta = 2.0$) para as seguintes energias: a)0.00003, b)0.000885, c)1.016, d)2.77, e)24.58, f)29.42

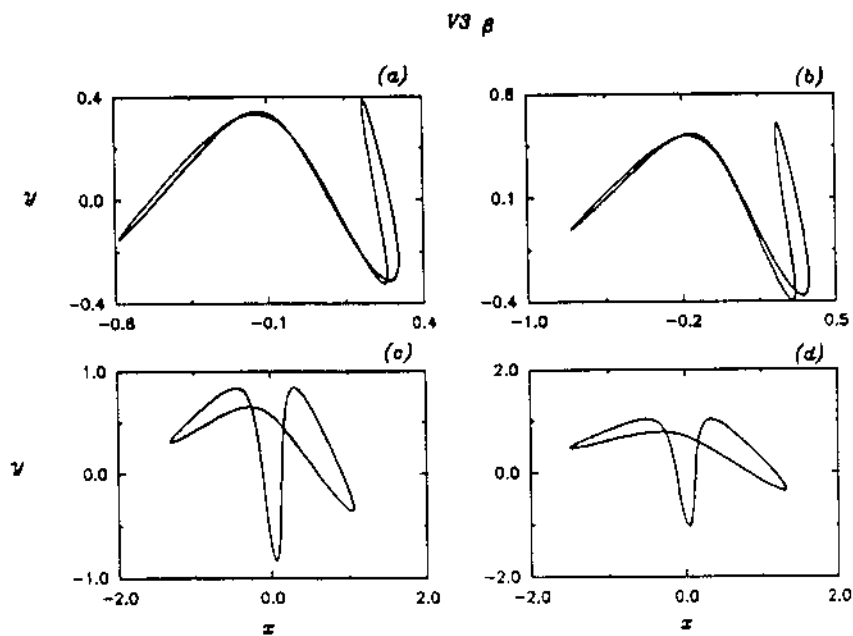


Figura 6.25: órbitas periódicas da família $V3_\beta$ para o potencial Nelson generalizado ($c = 0.1$ e $\beta = 0.03$), para as seguintes energias: a) 0.14, b) 0.19, c) 0.69, d) 1.05

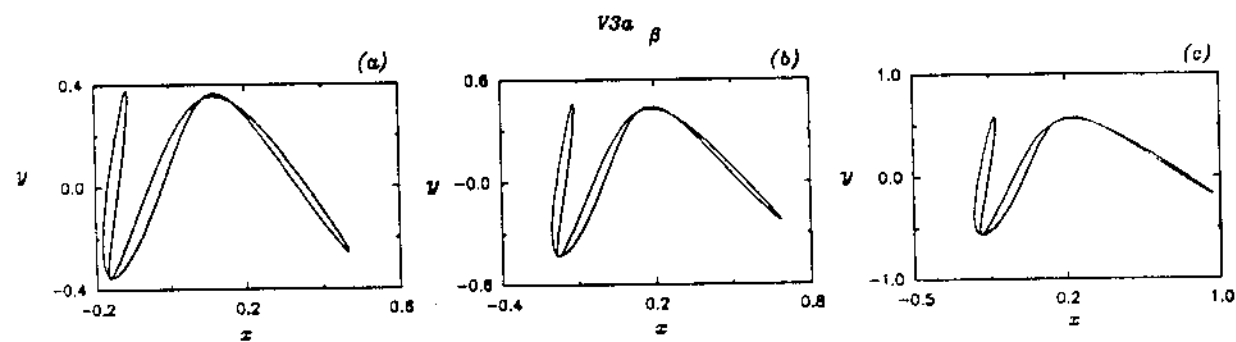


Figura 6.26: órbitas periódicas da família $V3a_n$ para o potencial Nelson gerado ($c = 0$ e $\beta = 0.03$) com as seguintes energias: a) 0.14, b) 0.20, c) 0.34

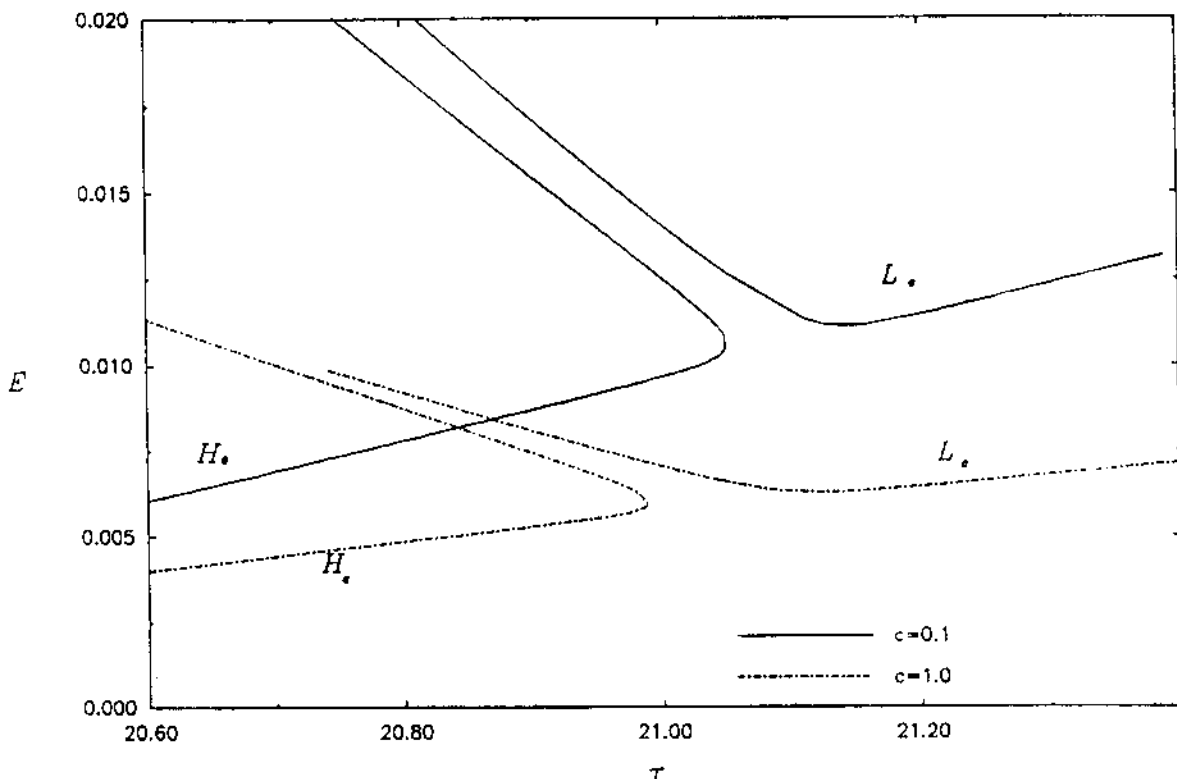


Figura 6.27: separação de H_c e L_c ao quebrarmos a simetria $x \rightarrow -x$.

na transformada de Fourier do espectro quântico suavizado, tentamos aumentar o parâmetro c , mas conforme a fig. (6.27), vemos que isso não será possível, pois a distância entre essas duas famílias, no ponto onde L_c tem energia mais baixa, não permite fazê-lo com segurança.

No próximo capítulo, fazemos um tratamento quântico do potencial NELSON, procurando identificar as órbitas periódicas que aparecem na Transformada de Fourier do espectro quântico suavizado e então, ligamos c e β , para observar como essas simetrias aparecem na densidade semi-clássica.

Capítulo 7

Quebra de simetrias no espectro de NELSON quântico

O estudo de estados quânticos e suas propriedades estatísticas têm recebido muita atenção na última década. Muitos estudos foram direcionados às propriedades estatísticas dos níveis. Para sistemas classicamente caóticos, muito empenho tem sido direcionado pela fórmula de Gutzwiller (capítulo 4). Experimentos de Welge e colaboradores para o efeito Zeeman quadrático e as análises teóricas de Wintgen e Friedrich mostram que a transformada de Fourier da densidade quântica de estados, revela periodicidades que coincidem com aquelas das famílias de órbitas periódicas [51]).

7.1 A densidade de estados suavizada

O problema dos autovalores do Nelson quântico,

$$H\Psi_1(x, y) = E_1\Psi_1(x, y) \tag{7.1}$$

foi resolvido usando a expansão:

$$\Psi_1(x, y) = \sum_{N=0}^M \sum_{n=0}^N C_1^{n, N-n} \psi_n(x) \psi_{N-n}(y), \quad (7.2)$$

onde $\psi_n(x)$ e $\psi_n(y)$, são as autofunções das Hamiltonianas dos osciladores unidimensionais H_x e H_y ,

$$H_x = \frac{p_x^2}{2} + 0.05x^2, \\ H_y = \frac{p_y^2}{2} + y^2. \quad (7.3)$$

uma vez que a Hamiltoniana do potencial Nelson é:

$$H(x, p_x, y, p_y) = \frac{1}{2}p_x^2 + \frac{1}{2}p_y^2 + (y - \frac{x^2}{2})^2 + \frac{1}{2}\mu x^2 \text{ com } \mu = 0.1. \quad (7.4)$$

O apóstrofe na soma indica que somente n pares (paridade par) ou somente n ímpares (paridade ímpar) são incluídos, pois devido a simetria $x \rightarrow -x$ do sistema, a matriz Hamiltoniana (resultante da expansão em base de osciladores) se divide em blocos distintos de estados pares e ímpares, o que facilita a identificação das famílias Horizontal¹ e Vertical² com suas bifurcações na transformada de Fourier do espectro suavizado.

O potencial Nelson tem a forma de um poço infinito, de modo que a matriz a ser diagonalizada precisa ser truncada. O primeiro limite de M , ou seja, a ordem da matriz truncada, depende da capacidade da máquina na qual trabalhamos e o outro, mais dirigido, se relaciona ao intervalo de energia E , no qual, estamos interessados. Os resultados semiclássicos são obtidos, usando-se um pequeno $\hbar$, mas lembramos que quanto menor o tamanho de $\hbar$, maior deve ser a dimensão da matriz a ser diagonalizada se queremos obter os

¹aparece na análise de Fourier dos estados ímpares suavizados

²aparece na análise de Fourier dos estados pares suavizados

autovalores até um valor fixo de E . Tendo alguns resultados da quantização do potencial Nelson [52], usamos $\hbar = 6.0 \times 10^{-3}$ e diagonalizamos uma matriz de 2652×2652 (o limite da nossa máquina).

De acordo com a teoria de órbitas periódicas [53], a densidade de estados pode ser separada em dois termos:

$$D(E) = d_m(E) + d_{osc}(E), \quad (7.5)$$

onde $D(E)$ é a densidade quântica definida por:

$$D(E) = \sum_n \delta(E - E_n), \quad (7.6)$$

$d_m(E)$ é a densidade média de estados (chamada densidade de Weyl) correspondente às órbitas de período zero ³, e $d_{osc}(E)$ é o termo oscilatório que incorpora as órbitas periódicas de período muito maior que zero. Note que $d_{osc}(E) = D(E) - d_m(E)$, ou seja, a d_{osc} continua sendo uma $\sum$ de deltas que pode ser escrita como uma $\sum$ de todas as órbitas periódicas do sistema clássico. A densidade de Weyl é definida por:

$$d_m(E) = \frac{1}{h} \int \delta(H - E) dp dq. \quad (7.7)$$

pode ser calculada analiticamente para o potencial NELSON (eq. 7.4) resultando na função linear de E :

$$d_m(E) = \frac{E}{\sqrt{2\mu}\hbar^2}. \quad (7.8)$$

³A órbita de período zero é aquela que sai de um ponto X em $t = 0$ e chega ao ponto X_1 em $t = t_1$, de forma que o limite $X(0) - X_1(t_1) \rightarrow 0$. Essas órbitas contribuem com um termo médio, $\bar{y}$ na fórmula do Traço de Gutzwiller (ver capítulo 4).

A forma explícita de densidade de Weyl, permite verificar qual o intervalo bom de energia da matriz que foi truncada. Obtido assim os autovalores, o primeiro passo consiste em obter o espectro suavizado, através do produto da densidade quântica por gaussianas de largura b , sendo que b é melhor interpretado em termos do espaçamento médio ($\bar{s}$) do intervalo de energia em questão. Ou seja,

$$d_{suave} = \sum_n \sqrt{\frac{2}{\pi b^2}} \exp \left[-\frac{(E - E_n)^2}{2b^2} \right] \quad (7.9)$$

Fisicamente, isto significa que dependendo do valor de b , pegamos pacotinhos de níveis e não níveis individuais obtendo então, uma densidade oscilante suavizada $\bar{d}_{osc}$, pois $\bar{d}_{osc} = d_{suave} - d_m$. Finalmente efetuamos a transformada de Fourier de $\bar{d}_{osc}$, para observar quais são as famílias de órbitas periódicas estão contribuindo de modo mais efetivo nessa densidade semiclássica num determinado intervalo de energia.

Ao efetuarmos a Transformada de Fourier da densidade oscilante suavizada, obtemos picos centrados em τ (período), cuja intensidade $A(\tau)$ depende da estabilidade, do número de simetrias e do período das famílias de órbitas periódicas e também da largura (b) do pacote gaussiano, conforme veremos a seguir:

— A questão da estabilidade.

As órbitas periódicas estáveis dão lugar às singularidades (funções δ) na densidade semi-clássica de estados, enquanto que as órbitas periódicas instáveis dão picos mais alargados, ou seja, contribuem mais para o termo médio $[d_m(E)]$ (capítulo 4). É evidente que nosso procedimento não foi obter a densidade semi-clássica via somatória de órbitas periódicas e sim, a partir do espectro quântico, obter o período das principais famílias do potencial clássico, já discutidas no capítulo 6. Contudo é de se esperar que as famílias predominantemente estáveis deverão aparecer com maior intensidade em relação às famílias instáveis.

— A questão do número de simetrias.

É importante compreender que as trajetórias periódicas a que estamos

nos referindo, podem ter uma ou ambas de duas diferentes simetrias. Uma delas é a simeria de reversão temporal ou simetria t : uma libração tem simetria t e uma rotação não tem. Para uma Hamiltoniana invariante à reversão temporal, cada solução periódica que é uma rotação tem uma solução companheira que é a reversa temporal da primeira, ou seja, é a mesma trajetória xy descrita na direção oposta. Estas duas rotações são duas trajetórias diferentes e pertencem a duas diferentes famílias. Uma libração por outro lado, é sua própria reversa temporal e constitui uma única entidade do ponto de vista da simetria t .

A outra possível simetria é a simetria x , que é simplesmente chamada de simetria. Novamente, cada trajetória assimétrica tem uma trajetória assimétrica que é a reflexão x da primeira. E sendo assim, dependendo do número de simetrias da órbita periódica (ou equivalentemente, da família de órbitas periódicas) ela contribui com pesos diferentes na intensidade da transformada de Fourier do espectro suavizado, ou seja:

.librações simétricas: simetria $x \rightarrow -x$ e $t \rightarrow -t$. Peso 1.

.librações assimétricas: simetria $t \rightarrow -t$. Peso 2.

. rotação simétrica: simetria $x \rightarrow -x$. Peso 2.

. rotação assimétrica: não tem simetrias. Peso 4.

— *A questão do período (τ) e da largura do pacote gaussiano (b).*

É fácil verificar que no limite em que $b \rightarrow 0$, o espectro suavizado (eq. 7.9) tende ao próprio espectro quântico, enquanto que para $b \rightarrow \infty$, o espectro suavizado tende a densidade de Weyl, ou seja, a densidade clássica. Assim sendo, se tomarmos a Transformada de Fourier do espectro suavizado com b relativamente grande, de forma que possamos identificar a família de período mais baixo (vamos supor τ) e diminuirmos⁴ b , encontraremos um possível segundo pico em 2τ , que é a duplicação de período. Acontece que em 2τ , a órbita periódica de período τ deu duas voltas, de forma que ela já está contribuindo duas vezes, ou seja, temos duas contribuições da órbita com $\tau = 1$ e uma contribuição da órbita duplicada (de período $\tau = 2$). Em geral, a intensidade da órbita τ deve ser maior que aquela da órbita 2τ que por sua vez deveria ser maior que aquela da órbita 3τ e assim por

⁴O Princípio da Incerteza de Heisenberg permite estimar o valor de b para o qual obteremos $2\tau, 3\tau, \dots$ através da relação $\tau \leq h/b$.

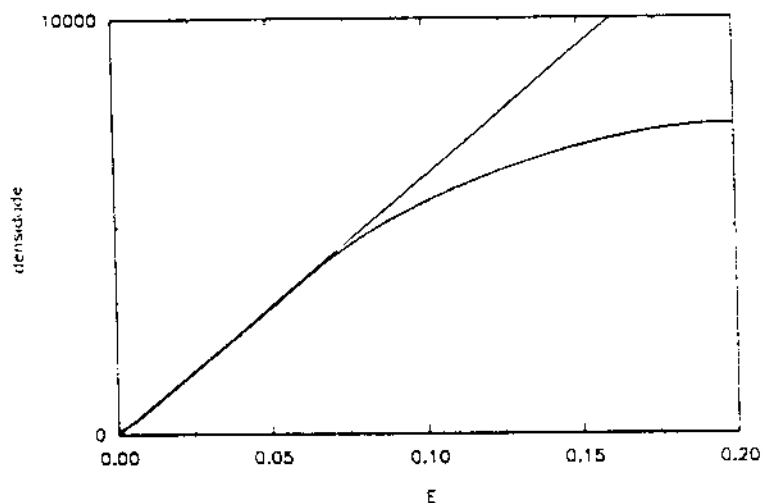


Figura 7.1: Densidade de Weyl teórica (reta) comparada a densidade oscilante suavizada com um pacote de largura grande ($b \approx 70\bar{s}$) para os estados pares do Potencial NELSON.

diante. Porém ao considerarmos as simetrias e a estabilidade das órbitas periódicas, o balanço das contribuições alteram esse quadro, por exemplo, nas duplicações de período, o ângulo de estabilidade é $\pi/2$, esse ângulo causa divergências na soma de Gutzwiller, (ver a questão da estabilidade) e consequentemente o pico da duplicação será bem mais pronunciado que o da família original.

A fig. (7.1) mostra o artifício usado para verificar a convergência dos autovalores da matriz truncada. A densidade de Weyl analítica (7.8) é comparada com a densidade oscilante suavizada com um pacote de largura relativamente grande ($b \approx 70\bar{s}$).

Na fig. (7.2a) temos a densidade oscilante suavizada e em (b) a respectiva transformada de Fourier dos estados pares suavizados, para o intervalo de energia (0.0, 0.07). Identificamos facilmente a duplicação da família Vertical V2 a quadruplicação V. A família Horizontal H aparece de forma

explícita e também contribui com a metade de seu período $H/2$, pois quando temos simetria de reflexão espacial ($x \rightarrow -x$), a órbita periódica com essa simetria também contribui com a sua metade (seção 4.7.2).

Na fig. (7.3) usamos a densidade oscilante suavizada para os estados ímpares. A família V não contribui significativamente, mas V2 e V4 aparecem. Mais uma vez, observamos a contribuição da metade das órbitas da família H.

Mostramos algumas transformadas de Fourier onde identificamos todas as famílias mais simples do potencial Nelson. Vimos claramente que a família Horizontal contribui também com a metade de seu período. Vamos agora quebrar a simetria de reflexão espacial do potencial e ver qual é o efeito dessa quebra na densidade semiclássica.

7.2 Quebra das simetrias no espectro de Nelson Quântico

Primeiramente, ao fazermos $c = 0.1$ em

$$H(x, p_x, y, p_y) = \frac{1}{2}(p_x + \beta y)^2 + \frac{1}{2}(p_y - \beta x)^2 + (y - \frac{x^2}{2} + cx^3)^2 + \frac{1}{2}\mu x^2 \quad (7.10)$$

podemos garantir que a Hamiltoniana⁵ continua limitada, garantindo ainda um espectro discreto e que a densidade de Weyl ($d_m(E)$) continua tendo seu comportamento linear (eq. 7.8) se $\beta \neq 0$, pois independe deste parâmetro, e sendo assim, ainda temos um método de estimar o intervalo de autovalores bons. Continuamos usando base de osciladores, mas vemos pela fig. (7.4) que essa base não é tão adequada à medida que aumentamos o valor do parâmetro c . Contudo, gostaríamos que c fosse o maior possível, para tornar visível as alterações das famílias de órbitas periódicas, mas para $c > 0.1$ o intervalo de autovalores é brutalmente reduzido, até que para $c = 1.0$, a

⁵No caso em que $c \neq 0$, a matriz Hamiltoniana não se separa mais em blocos distintos de estados pares e estados ímpares.

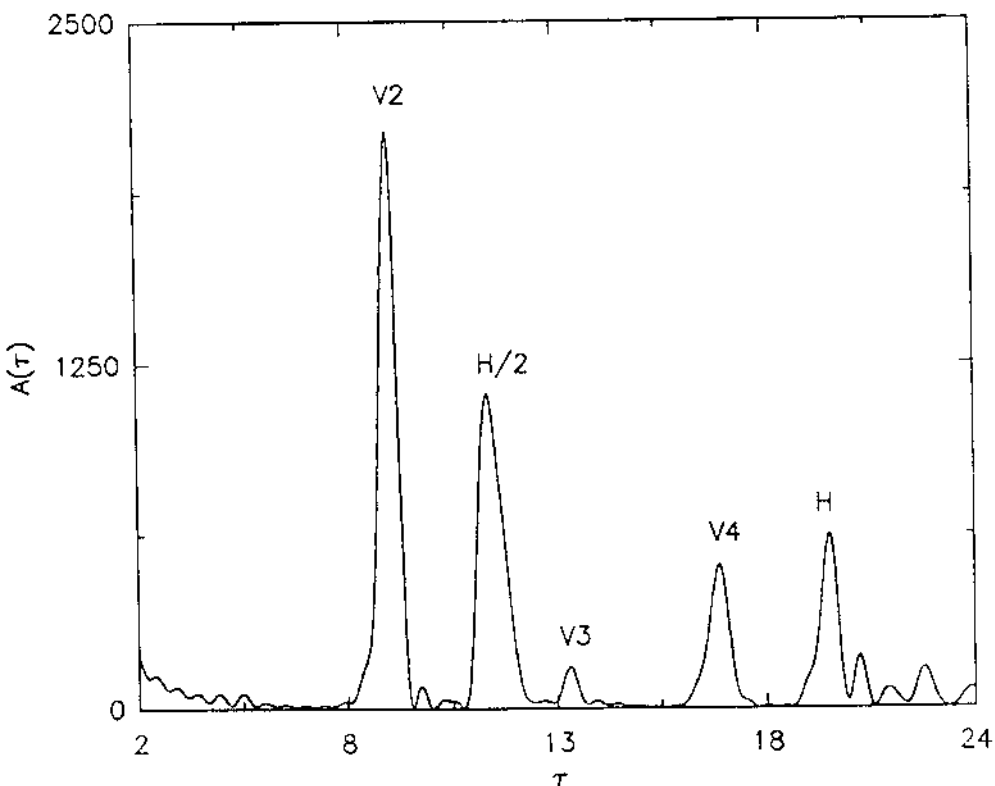
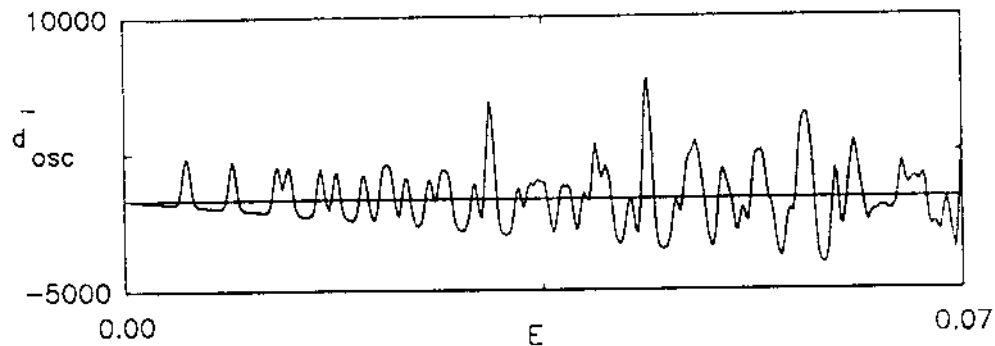


Figura 7.2: Em a) densidade oscilante suavizada dos estados pares e em b) Transformada de Fourier de a). Usamos o intervalo $(0.0, 0.07)$ para a energia e $b = 0.0003 \approx 6\bar{s}$ e $\bar{s} = 5 \times 10^{-5}$. As letras V, V2, V3 referem-se à Família Vertical, sua duplicação e triplicação respectivamente e H/2 refere-se a contribuição da metade das órbitas da família Horizontal.

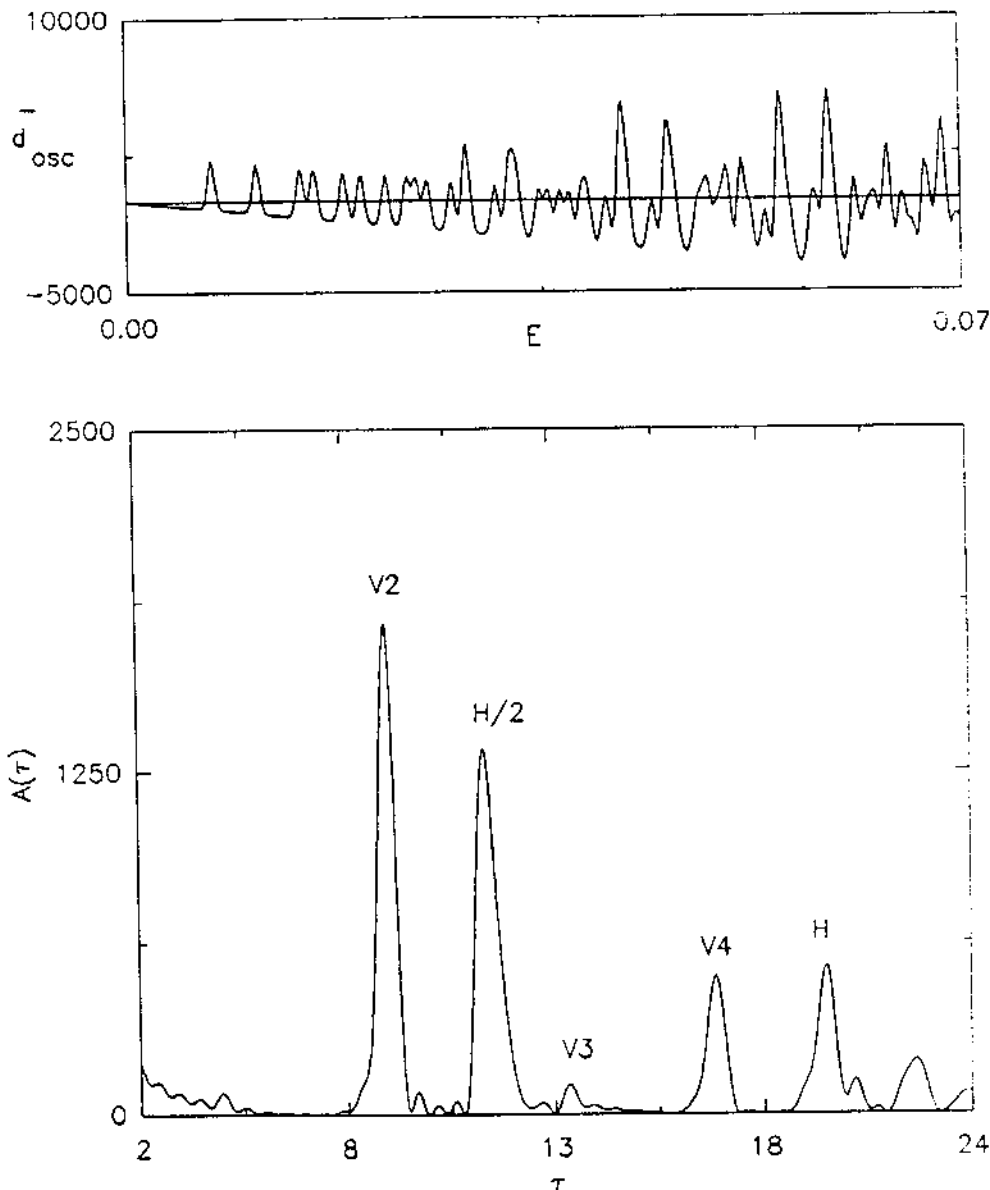


Figura 7.3: Em a) densidade oscilante suavizada dos estados ímpares e em b) Transformada de Fourier de a). Usamos o intervalo $(0.0, 0.07)$ para a energia e $b = 0.0003 \approx 6\bar{s}$ e $\bar{s} = 5 \times 10^{-5}$. As letras V2, V4 referem à duplicação e quadruplicação da família Vertical respectivamente e H/2 refere-se a contribuição da metade das órbitas da família Horizontal H.

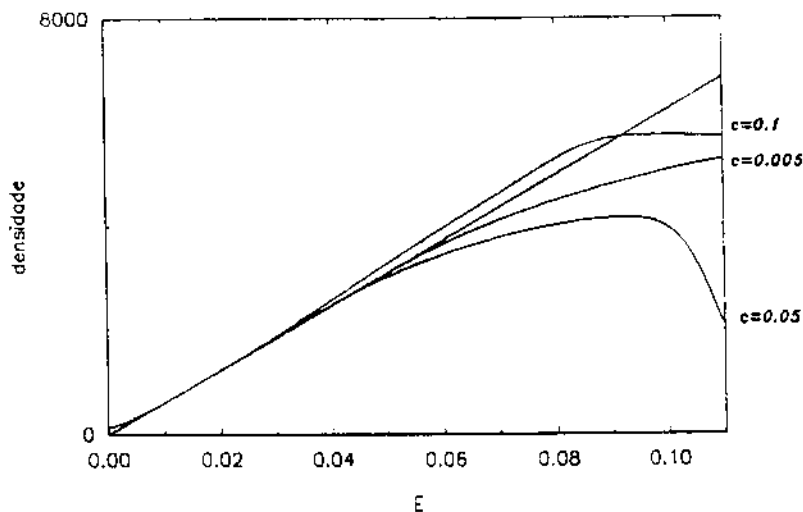


Figura 7.4: A figura mostra a densidade de Weyl teórica (reta) comparada a densidade oscilante suavizada com um pacote de largura grande ($b \approx 70\bar{s}$), no caso em que $c \neq 0$ e $\beta = 0$. A medida que aumentamos c , o intervalo de coincidência do termo de Weyl com o termo suavizado é menor, indicando que a base de osciladores já não é interessante.

base de osciladores não serve mais. Cálculos para $c = 1.0$ deram os primeiros autovalores negativos (absurdo, pois a Hamiltoniana continua sendo positivo-definida), e a medida que aumentamos c , mais autovalores negativos aparecem. Perceba a discrepância, do primeiro autovalor de $c = 1.0$ e $c = 0.1$: $-0.475071444641E+01$ e $0.520501385287E-02$!. Verificamos estes resultados usando base de poço infinito e nos certificamos de que os autovalores realmente continuam positivos e não tão diferentes dos autovalores para $c = 0.1$.

A fig. (7.5a) mostra as famílias V2, V4, H e a metade do período de H. Nesse caso fizemos c bem pequeno ($c = 0.005$) e escolhemos só os estados “pares” do espectro obtido. Nosso resultado indica que para esse valor do parâmetro, c , o sistema ainda não sentiu o efeito da quebra de simetria. Fizemos então $c = 0.02$ e novamente escolhemos só os estados

“pares” do espectro e vemos que ainda assim, a família Horizontal continua contribuindo com a metade de suas órbitas (7.5b). Aumentamos c , repetimos o mesmo procedimento e vemos que o pico de $H/2$ diminui a medida que c aumenta. Isto significa que o sistema começa sentir o efeito de c que é quebrar a simetria $x \rightarrow -x$ (7.5c).

Na fig. (7.6), o cálculo foi feito para todos os autovalores de $c = 0.005$ e identificamos $V3$, $V4$, H nitidamente, enquanto que $V3$ e H aparecem nitidamente na fig. (7.7) onde $c = 0.1$

Uma vez feito $c \neq 0$, fazemos então $\beta = 0.03$, quebrando a simetria de reversão temporal. A quebra de simetria de reversão temporal torna o cálculo dos autovalores bem mais difícil, pois a matriz a ser diagonalizada nesse caso, é complexa e em termos de CPU, gasta três vezes mais que os casos anteriores. Outra dificuldade de menor grau, é que nesse caso, a densidade de Weyl precisa ser calculada numericamente, pois não é possível obter uma expressão analítica para ela.

Não calculamos a densidade de Weyl numericamente, pois conforme a fig. (7.8) para β pequeno ($\beta = 0.03$), a densidade suavizada ainda concorda bem (para baixas energias) com a densidade de Weyl do potencial Nelson original. Contudo, a medida que β aumenta essa comparação já não é possível, ou seja, esse método já não serve para estimar a convergência dos autovalores da matriz truncada.

Na fig. (7.9) nós identificamos V , $V3$ e $V4$ e H na fig. (7.10) vemos V e suas bifurcações para $\beta = 0.1$ e $c = 0.1$. Não vemos V deslocada de seu período original $\tau = 4.44$, ou seja, esse seria um dos efeitos de fazermos β cada vez maior. Infelizmente, não podemos tomar grandes valores de β , para verificarmos isso, primeiramente porque o sistema deixa de ser limitado para $\beta \geq 2$ e em segundo lugar, não podemos controlar a convergência dos autovalores da matriz diagonalizada, uma vez que estamos usando a densidade de Weyl analítica para sabermos até onde há convergência. Como já foi dito anteriormente, o cálculo analítico da Densidade de Weyl só é válido para $\beta = 0$.

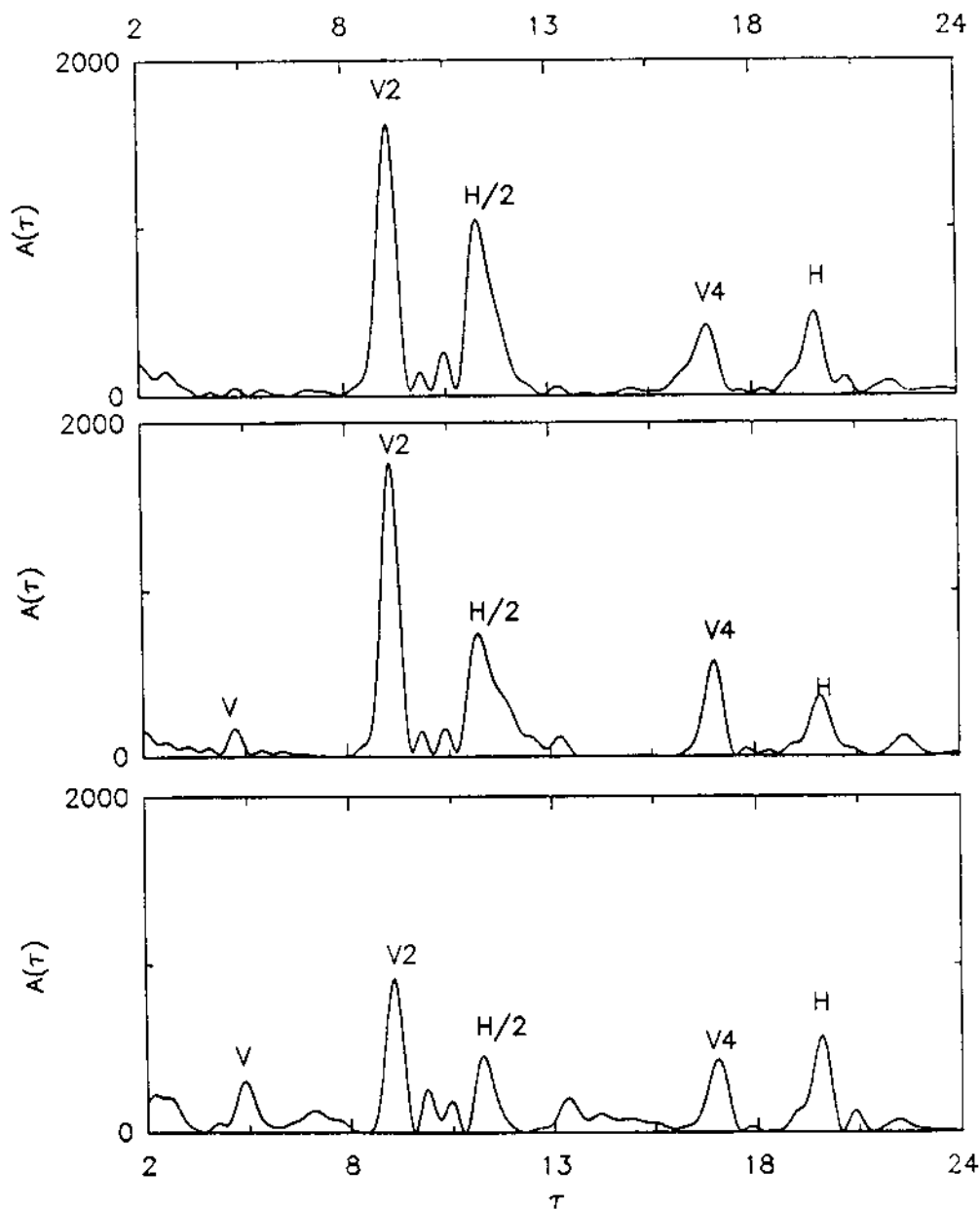


Figura 7.5: Transformada de Fourier do espectro suavizado dos estados pseudo-pares. Em a) $c = 0.005$, b) $c = 0.02$ e c) $c = 0.07$. Usamos $b = 3 \times 10^{-4}$ ($\approx 6\bar{s}$) e E no intervalo $(0, 0.07)$ para todos os casos.

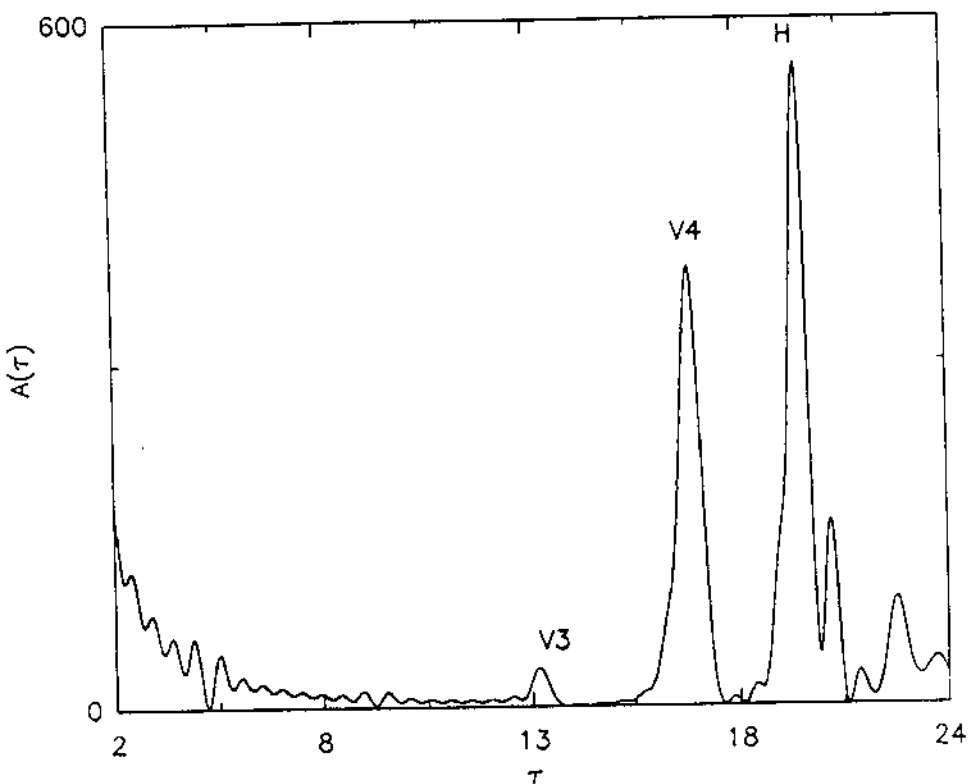


Figura 7.6: Transformada de Fourier do espectro suavizado para $c = 0.005$ para $b = 0.0003 \approx 5 \times 10^{-5}$, no intervalo de energia $(0.0, 0.07)$. Identificamos V3, V4 e H.

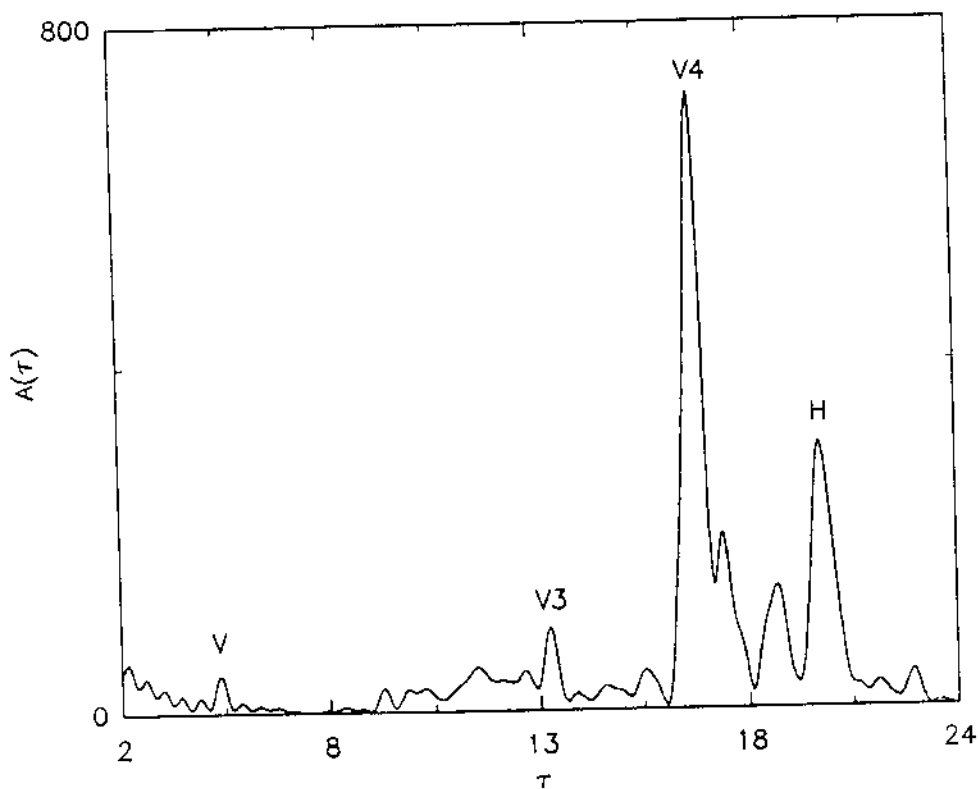


Figura 7.7: Transformada de Fourier do espectro suavizado para $c = 0.1$ para $b = 0.0003 \approx 6\bar{3}$ no intervalo de energia $(0.0, 0.07)$. Identificamos **V4** e **H**.

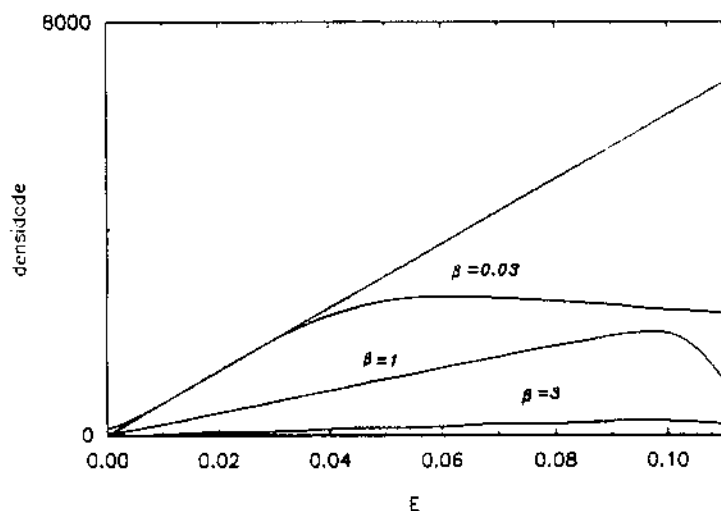


Figura 7.8: Densidade de Weyl analítica para $\beta \neq 0$ e densidade de Weyl calculada através de um pacote gaussiano de largura grande. Para $\beta = 0.03$ a comparação entre as duas permite estimar o intervalo de convergência dos autovalores, mas à medida que o parâmetro β é aumentado essa comparação torna-se inviável.

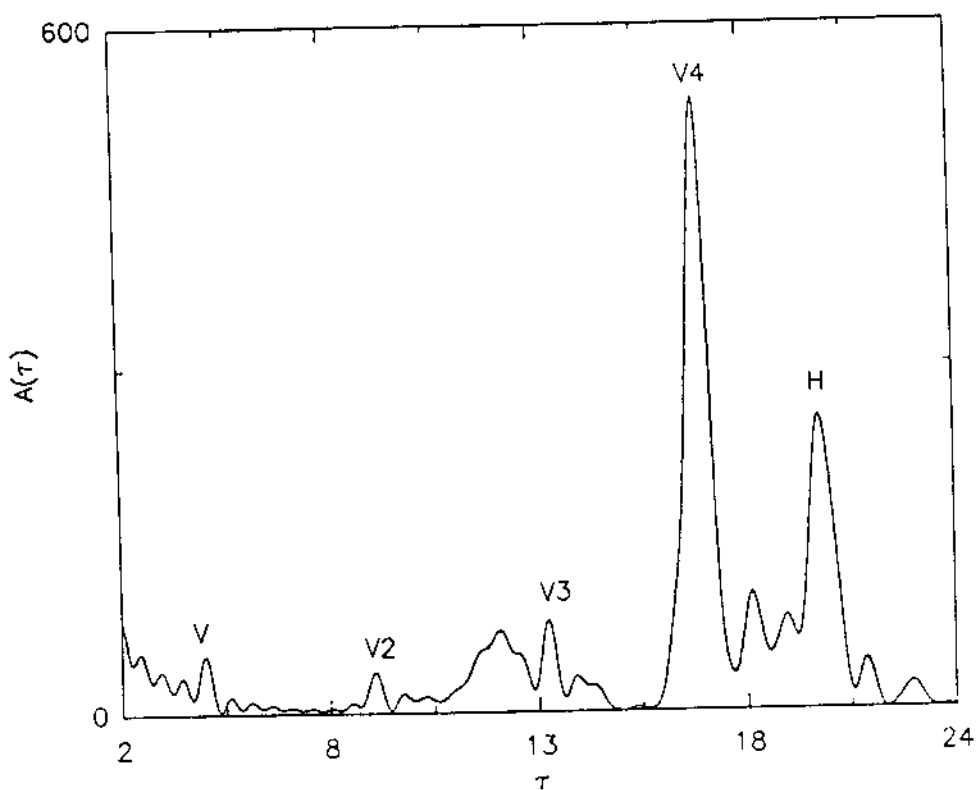


Figura 7.9: Transformada de Fourier do espectro suavizado para $c = 0.1$ e $\beta = 0.03$. A família Vertical está com seu período original 4.44. Usamos E no intervalo $(0.0, 0.07)$ e $b = 0.0003$

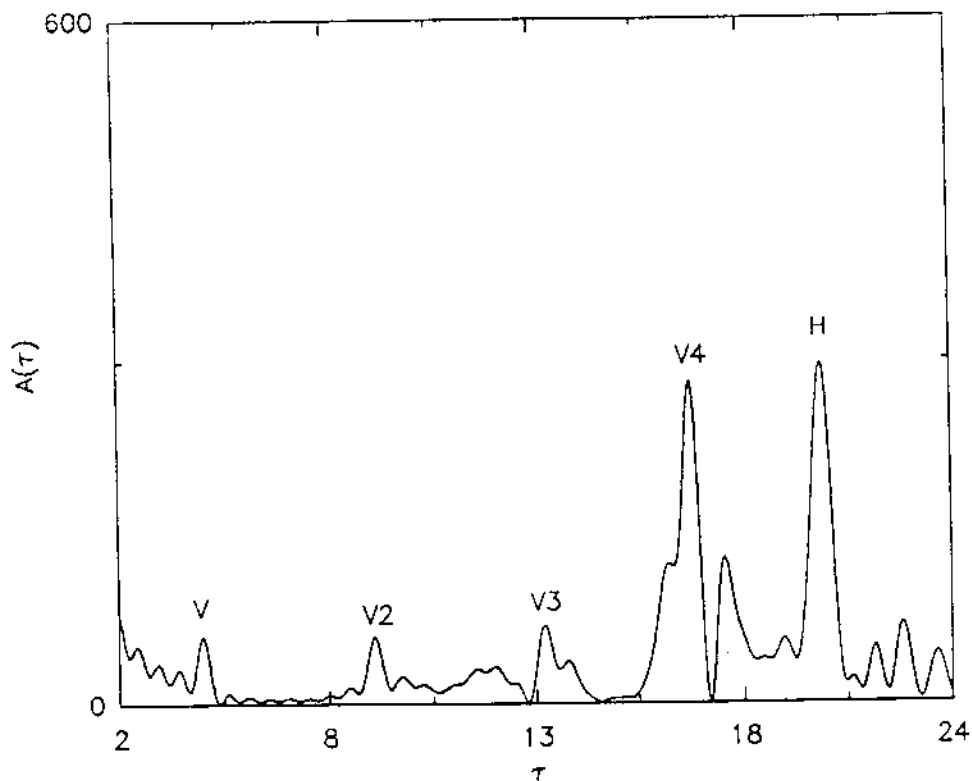


Figura 7.10: Transformada de Fourier do espectro suavizado para $c = 0.1$ e $\beta = 0.1$. Nesse caso, a família Vertical continua situada no seu período original ≈ 4.44 . Usamos E no intervalo $(0.0, 0.07)$ sendo $b = 6 \times 10^{-5} \approx 6\bar{5}$.

Tivemos então, uma ampla visão de como as famílias de órbitas periódicas, contribuem para o espectro semiclássico de um sistema quântico, cujo análogo clássico é caótico. Apesar dos parâmetros c e β , introduzirem dificuldades (ou melhor, trabalho árduo) nas expansões em base de osciladores: introduzirem também um consumo bem maior de CPU na diagonalização das matrizes (caso onde ligamos β) e ainda, levarem o sistema para um regime caótico mais depressa (Capítulo 5), percebemos que os resultados das Transformadas de Fourier do espectro suavizado, correspondem às nossas expectativas. Fisicamente, variamos os parâmetros modificando qualitativamente as famílias de órbitas periódicas do sistema clássico e vimos essas novas famílias contribuindo para o espectro quântico do sistema generalizado.

Capítulo 8

Conclusões

Tendo em vista que sistemas com certas propriedades especiais, por exemplos, simetrias, são importantes em Física e que esses tais sistemas não são estruturalmente estáveis, no sentido que alguma pequena perturbação arbitrária podem destruir essa propriedade nos propomos a estudar numericamente quais seriam os efeitos clássicos e quânticos ao submetermos uma partícula carregada sob a ação de um campo magnético. Usamos um potencial simétrico em relação a x , inventado por Baranger e já bastante estudado (o potencial Nelson). Embora inventado esse potencial é de interesse prático no campo da Física Nuclear.

Quebramos primeiramente a simetria de reflexão espacial do potencial e em seguida a simetria de reversão temporal do sistema e de fato, verificamos classicamente através das seções de Poincaré que as famílias de órbitas periódicas tornaram-se instáveis mais rapidamente e que novas bifurcações apareceram. As famílias de órbitas periódicas ficaram sujeitas a um novo padrão de bifurcações, ou seja, houve uma alteração qualitativa nas bifurcações dessas famílias.

A importância deste tipo de cálculo está no fato de acentuar o conceito de como reage os sistemas não-lineares, ou sistemas caóticos à uma pequena perturbação. Esse nosso sistema, o potencial Nelson, como já foi dito várias vezes, não é um sistema fortemente caótico, ele apresenta um caos leve, conhecido com "soft chaos" e aí está a importância de se estudar esse tipo de sistema. A natureza parece favorecê-los, ou seja, são a maioria na natureza.

Tivemos a oportunidade de ver através das seções de Poincaré, que pequenos parâmetros de perturbação introduzidos nesses sistemas, podem levá-los a um comportamento difícil de ser entendido, e ainda mais, que a presença de certas simetrias podem acentuar essa complexidade.

Outros resultados de nosso trabalho se referem ao tratamento quântico deste potencial, vimos que a presença da simetria de reflexão espacial acarreta contribuições adicionais na densidade semiclássica, mais especificamente, a metade da órbita periódica que tem essa simetria também contribui para a densidade semiclássica. Nesse caso, a função de Green pode ser escrita como uma soma da função de Green dos estados pares e da função de Green dos estados ímpares, ou em outras palavras, a matriz da expansão da Hamiltoniana em base de osciladores se separa em dois blocos distintos, os pares e os ímpares. Ficou claro neste trabalho que a quebra dessa simetria destrói essa propriedade.

Um fato que não pode ser observado foi a alteração da família Vertical, insensível ao parâmetro c (o parâmetro que torna o potencial assimétrico), com a variação de β (o parâmetro que introduz o campo magnético). Para conseguirmos verificar esse efeito nos resultados numéricos, o parâmetro β deve que ser relativamente grande, o que não é interessante, pois se β é "grande", não podemos considerá-lo como perturbação. Além disso, poderíamos mudar a própria natureza do sistema, tornando-o integrável.

Outros efeitos da quebra de simetrias que poderiam ser estudados se referem as propriedades estatísticas dos níveis de energia. Sabemos que os sistemas classicamente integráveis obedecem à distribuição de Poisson enquanto que sistemas classicamente caóticos obedecem à distribuição GOE ou GUE (Ortogonal Ensemble Gaussian ou Unitary Ensemble Gaussian) dependendo da simetria do sistema. Ao quebrarmos uma a uma as simetrias do potencial Nelson é de se esperar que passamos de GOE para GUE. Tal estudo requer um bom número de autovalores e um intervalo de energia relativamente maior ao que conseguimos, além de uma nova base para a expansão da matriz Hamiltoniana.

Bibliografia

- [1] M. C. Gutzwiller. *J. Math. Phys.*, (12):343, 1971.
- [2] A. M. Ozorio de Almeida and M. A. M. de Aguiar. Periodic librations and their effect on the quantum energy spectrum. *Physica*, (D30):391-402, 1990.
- [3] M. A. M. de Aguiar, C. P. Malta, M. Baranger, and K. T. Davies. Bifurcations of periodic trajectories in non-integrable hamiltonian systems with two degrees of freedom: Numerical and analytical results. *Annals of Physics*, (180):167-205, 1987.
- [4] M. Baranger and K. T. Davies. Periodic trajectories for a two-dimensional nonintegrable hamiltonian. *Annals of Physics*, (177):330-358, 1987.
- [5] A. M. Ozorio de Almeida. *Sistemas Hamiltonianos: Caos e Quantização*. UNICAMP, Campinas, 1987.
- [6] Marcus A. M. de Aguiar. *Caos em Sistemas Hamiltonianos*. Setor de Publicações UNICAMP, Campinas, 1992.
- [7] M. V. Berry. Regular and irregular motion. *Topics in Nonlinear Dynamics*, ed. S. Jorna AIP Conf. Proc., (46):16, 1978.
- [8] *Chaotic Behaviour of Deterministic Systems (Les Houches)*. Gerard Iooss, Robert H. G. Helleman, Raymond Stora., North-Holle Publishing Company Amsterdam - New York - Oxford - Tokyo., 1981.
- [9] Pierre Bergé, Yves Pomeau, and Christian Vidal. *Order with Chaos*. Hermann. Paris. 1984.

- [10] Martin C. Gutzwiller. Quantum chaos. *Scientific American*, (Janeiro 1992):26-32.
- [11] R. L. Devaney. *An Introduction to Chaotic Dynamical Systems*. Addison-Wesley, Boston, 1989.
- [12] Hao Bai-Lin. Chaos. *The Institute of Theoretical Physics, Beijing*, (abril 1986).
- [13] James Gleick. *Caos. A criação de uma nova ciência*. Ed. Campus 3ª edição, Rio de Janeiro, 1990.
- [14] Herbert Goldstein. *Classical Mechanics*. Addison-Wesley Series in the Physics, 1981-segunda edição.
- [15] L. Markus and K. R. Meyer. *Mem. Am. Math. Soc.*, (144), 1974.
- [16] J. Moser. *Nachr. Akad. Wiss. Goetingen*, (IIA):87, 1955.
- [17] J. Moser. *Astron. J.*, (63):439, 1958.
- [18] G. Casati and J. Ford. *Phys. Rev. A*, (12):1702, 1975.
- [19] C. Froeschlé and J. P. Scheidecker. *Phys. Rev. A*, (12), 1975.
- [20] G. Benettin, L. Galgani, and J. M. Streleyn. *Meccanica*, (março-1980):9.
- [21] J. H. Van Vleck. *Proc. Natl. Ac. Sc.*, (14):178, 1928.
- [22] C. Morette. *Phys. Rev.*, (81):848, 1951.
- [23] P. Choquard. *Helv. Phys. Acta.*, (28):89, 1955.
- [24] A. Einstein. *Verh. Dtsch. Phys. Ges.*, (19):82, 1917.
- [25] J. B. Keller. *Ann. Phys. (New York)*, (4):180, 1958.
- [26] J. B. Keller and S. I. Rubinov. *Ann. Phys. (New York)*, (9):24, 1960.
- [27] V. P. Maslov. *Théorie des perturbations et Méthodes Asymptotiques*. Dunod, Paris, 1972.
- [28] R. Balian and C. Bloch. *Ann. Phys. (New York)*, (60):401, 1970.

- [29] R. Balian and C. Bloch. *Ann. Phys. (New York)*, (**63**):592, 1971.
- [30] R. Balian and C. Bloch. *Ann. Phys. (New York)*, (**64**):271, 1971.
- [31] R. Balian and C. Bloch. *Ann. Phys. (New York)*, (**69**):76, 1972.
- [32] R. Balian and C. Bloch. *Ann. Phys. (New York)*, (**85**):514, 1974.
- [33] M. Morse. *The Calculus of Variations in the Large*. Am. Math. Soc., Providence, R. I., 1935.
- [34] D. Wintgen and B. Eckardt. Symbolic description of the periodic orbits for the quadratic zeeman effect. *J. Phys.B: At. Mol. Opt. Phys.*, (**23**):355, 1990.
- [35] M. C. Gutzwiller. *J. Math. Phys.*, (**11**):791, 1970.
- [36] W. M. Miller. *J. Chem. Phys.*, (**63**):996, 1975.
- [37] D. Wintgen. Semiclassical path-integral quantization of nonintegrable hamiltonian systems. *Phys. Review Letters*, (**61**):16, 1988.
- [38] M. C. Gutzwiller. *J. Math. Phys.*, (**8**):1979, 1967.
- [39] M. C. Gutzwiller. *J. Math. Phys.*, (**10**):1004, 1969.
- [40] G. M. Zaslavskii. *Sov. Phys. JETP*, (**6**):46, 1977.
- [41] D. Wintgen. *Phys. Review Letters*, (**58**):1589, 1987.
- [42] D. Wintgen. *Phys. Review Letters*, (**67**):18, 1991.
- [43] Eric J. Heller. *Phys. Rev. Let.*, (**53**):1515, 1984.
- [44] C. P. Malta, M. A. M. de Aguiar, and A. M. Ozorio Almeida. Quantum signature of a periodic-doubling bifurcation and scars of periodic orbits. novembro de 1991- a ser publicado.
- [45] K. Furuya, M. A. M. de Aguiar, C. H. Lewenkopf, and M. C. Nemes. Husimi distributions of a spin-boson system and the signature of its classical dynamics. *Ann. Phys.*, aceito para publicação em fevereiro de 1992.

- [46] R. E. de Carvalho and M. A. M. de Aguiar. Quantum and semiclassical husimi distribution for a one-dimensional resonant system. *Phys. Rev. A*, aceito para publicação em abril de 1992.
- [47] M. Baranger, K. T. Davies, and J. H. Mahoney. The calculation of periodic trajectories. *Annals of Physics*, (186):111-140, 1988.
- [48] M. A. M. de Aguiar and C. P. Malta. Isochronous and period doubling bifurcations of periodic solutions of non-integrable hamiltonian systems with reflexion symmetries. *Physica*, (D30):413, 1988.
- [49] V. A. Yakubovich and V. M. Starzhinskii. *Linear Differential Equations with Periodic Coefficients Cap. II and III*. Keter Publishing House, Jerusalem, 1975.
- [50] K. R. Meyer. *Trans. Amer. Math. Soc.*, (149):95, 1970.
- [51] Bruno Eckardt, Gabriel Hose, and Eli Pollak. *Phys Rev A*, (39):3776, 1989.
- [52] C. P. Malta, M. A. M. de Aguiar, and A. M. Ozorio de Almeida. Quantum signature of a periodic-doubling bifurcation and scars of periodic orbits. *a ser publicado*, novembro 1991.
- [53] *Chaotic Behaviour of Deterministic Systems (Les Houches)*. G Ioss, R. G. Helleman and R. Stora, Amsterdam: North-Holle, 1981.