

O objetivo central deste curso é estudar as propriedades semiclássicas de sistemas mecânicos cujos análogos clássicos apresentam caos. Vamos nos referir a este estudo como *caos quântico*, embora essa terminologia não tenha o mesmo sentido que seu análogo *caos clássico*. Um sistema é classicamente caótico quando ele apresenta sensibilidade exponencial às condições iniciais : as soluções são tão instáveis que trajetórias inicialmente vizinhas separam-se exponencialmente rápido umas das outras. Opondo-se aos sistemas caóticos estão os *sistemas integráveis*, onde a existência de tantas constantes de movimento quanto o número de graus de liberdade faz com que o movimento resultante seja bastante simples. De fato, mostra-se que em um sistema Hamiltoniano integrável com L graus de liberdade, trajetórias típicas ocupam regiões de dimensão L com a topologia de toros [1].

A teoria quântica surgiu no começo do século XX para explicar fenômenos microscópicos para os quais a mecânica clássica de Newton não fornecia resultados satisfatórios. Dentre esses fenômenos destacam-se o caráter quantizado de grandezas como energia e momento angular e as propriedades ondulatórias apresentadas por partículas materiais, que levariam a uma revolução de vários conceitos clássicos.

As primeiras idéias que levaram ao desenvolvimento da teoria quântica associavam os estados quânticos com ondas cujo comprimento e frequência estavam associados ao momento e energia da partícula pelas relações $\lambda = h/p$ e $\nu = E/h$. Impostas inicialmente por Planck ao fóton para explicar o comportamento da radiação de corpo negro essas relações foram posteriormente postuladas por De Broglie a valer para qualquer partícula material. O valor numérico da *constante de Planck*, $h = 6.6 \times 10^{-34}$ J.s, leva a comprimentos de onda muito pequenos e altas frequências para partículas macroscópicas, correspondendo de certa forma ao limite da óptica geométrica. Para partículas movendo-se em um grau de liberdade e sujeitas a potenciais confinantes sabemos que as trajetórias são fechadas, ou periódicas, e para que a onda correspondente se *encaixa-se* sobre a trajetória, seria necessário que o comprimento da órbita L fosse um múltiplo inteiro de comprimentos de onda: $L = n \lambda = n h / p$. No caso de uma partícula presa em uma caixa de comprimento L isso leva à $2L = n h / (2mE)^{1/2}$ ou $E = n^2 h^2 / (8 m L^2)$. Para potenciais do tipo oscilador harmônico ou no caso da equação radial de potenciais centrais, a definição de λ fica inviável, pois o momento p não é constante. Como L/p tem dimensão de ação, a *regra de quantização* foi generalizada para

$$S(E) = \oint p(q, E) dq = (n + 1/2) \hbar$$

onde $\hbar = h/(2\pi)$. Para sistemas com apenas um grau de liberdade a aplicação dessa *regra de quantização*, conhecida hoje como regra de Bohr-Sommerfeld [2], fornece ótimos resultados no limite de grande números quânticos, tendo tido grande sucesso também na obtenção das linhas espectrais do átomo de Hidrogênio.

Rapidamente a chamada *velha teoria quântica* com suas regras empíricas deu lugar à Mecânica Quântica nos moldes que a conhecemos hoje em dia, onde as regras de quantização podem ser obtidas como aproximações da teoria completa. Qual o motivo então para que, passados mais de 80 anos de sua formulação precisa, voltemos a nos preocupar com meras aproximações? A resposta a esse pergunta começa também a quase 80 anos: Einstein, e depois Brillouin e Keller [3], generalizaram a fórmula de Bohr e Sommerfeld para tratar sistemas integráveis com mais de um grau de liberdade, obtendo a regra de quantização EBK onde os níveis quânticos deveriam satisfazer

$$\oint_{\gamma_i} p \cdot dq = 2\pi\hbar(n_i + \alpha_i / 4)$$

onde γ_i são circuitos irredutíveis sobre os toros onde o movimento clássico acontece e α_i são fases associadas ao número de cáusticas atravessadas pelo circuito correspondente.

O caso de sistemas não integráveis, onde o espaço de fases *não é folheado por toros invariantes*, chamou a atenção de Einstein, que viu aí uma grande obstrução à quantização. Com a formalização precisa da Mecânica Quântica as regras de quantização tornaram-se desnecessárias e essa questão foi praticamente esquecida por muitos anos. Não havia mais necessidade de se falar em trajetórias clássicas.

Mais recentemente, no final da década de 60, o tratamento semiclássico de sistema não-integráveis voltou à tona com uma perspectiva diferente. Em vez de tentar construir a teoria quântica através da mecânica clássica, colocou-se a questão do *princípio da correspondência*, que diz basicamente que em certas situações limites a teoria quântica deve se reduzir à clássica, pois sabemos, por exemplo, que esta última funciona muito bem no mundo macroscópico. Uma descrição semiclássica de sistemas caóticos deveria então existir e, dentro de alguma aproximação, deveria ser possível determinar os níveis quânticos a partir de informação clássica apenas. Não era claro no entanto como esse vínculo entre as teoria clássica e quântica poderia ser estabelecido no caso de haver caos. A resposta a essa questão só veio com os trabalhos seminais de Gutzwiller [4,5,6,7] que culminaram com a derivação da *Fórmula do Traço*. A partir daí seguiu-se um rápido desenvolvimento do que se convencionou chamar de *Caos Quântico*, estudo que investiga as influências do caos clássico em propriedades quânticas como níveis de energia e funções de onda. Hoje em dia, com o avanço das técnicas de litografia de nanoestruturas, é possível estudar experimentalmente sistemas com análogos clássicos caóticos cujas condições justificam plenamente um tratamento semiclássico. Esse tipo de *approach* é não só muitas vezes mais simples do que resolver a equação de Schrödinger como também traz uma compreensão maior sobre quais características básicas são responsáveis pelo comportamento global do sistema.

Um dos objetivos principais dessas notas é estudar em detalhe o limite semiclássico da Mecânica Quântica e apresentar uma derivação passo a passo da *Fórmula do Traço*. Uma referência bibliográfica fundamental nessa área de pesquisa é o livro de Ozorio de Almeida [8] *Sistemas Hamiltonianos : Caos e Quantização*. Não temos aqui a pretensão aqui de cobrir todos os tópicos abordados nesse livro nem de seguir o rigor que a sua apresentação muitas vezes contém. A idéia aqui é de um curso mais introdutório onde as passagens, as vezes sutis, são discutidas com mais detalhe técnico do que caberia em uma abordagem mais abrangente.

Antes de entrarmos no cálculo semiclássico propriamente dito, vamos rever algumas representações quânticas que são particularmente úteis no estudo semiclássico, como as distribuições de Wigner e Husimi, e discutir alguns exemplos. Estudaremos em seguida o limite semiclássico de sistemas com apenas um grau de liberdade, que, por sua simplicidade, permitirá o cálculo completo do Propagador e da Função de Green, assim como dos níveis de energia e das funções de onda semiclássicas. Além do cálculo explícito, o caso de um grau de liberdade nos trará intuição sobre a interpretação geométrica de várias quantidades clássicas, como a ação das trajetórias, as superfícies Lagrangeanas e os diversos índices de Maslov que permeiam o cálculo semiclássico. Depois desse *aquecimento* trataremos o caso geral de L graus de liberdade, começando com sistemas integráveis para, finalmente, atacar o sistemas caóticos onde deduziremos a famosa *Fórmula do Traço de Gutzwiller*, considerada a pedra fundamental no estudo da caologia quântica.

No restante deste capítulo apresentaremos uma discussão sobre o significado da expressão *caos quântico* e introduziremos os conceitos de propagadores e funções de Green, que terão importância fundamental em toda a análise semiclássica que apresentaremos.

1.1 - Caos Quântico

A definição de caos clássico não pode ser passada diretamente à mecânica quântica por envolver o conceito de trajetória. Como o estado de um sistema quântico é determinado pela sua função de onda, em vez de ser dado por um ponto no espaço de fases, podemos pensar na sensibilidade às condições iniciais no seguinte sentido: dada uma Hamiltoniana \hat{H} com

$$\hat{H}|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle \quad (1)$$

estudamos a separação temporal de dois estados vizinhos dados por

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n C_n |\varphi_n\rangle$$

e

$$|\psi'(0)\rangle = \sum_n (C_n + \delta_n) |\varphi_n\rangle$$

Definindo a distância no instante t , $d(t)$, entre dois estados da maneira usual obtemos

$$d^2(0) \equiv \left\| |\psi'(0)\rangle - |\psi(0)\rangle \right\|^2 = \sum_n |\delta_n|^2$$

É fácil checar que $d(t) = d(0)$ para todo t e todo \hat{H} ! Ou seja, não só a distância entre $|\psi\rangle$ e $|\psi'\rangle$ não aumenta exponencialmente com o tempo como ela fica constante.

Uma outra maneira de ver esse problema é a seguinte: definimos os coeficientes dependente do tempo

$$C_n(t) = C_n e^{-iE_n t/\hbar}$$

de forma que

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n C_n(t) |\varphi_n\rangle.$$

Substituindo na equação de Schrödinger dependente do tempo vemos que os C_n 's devem obedecer à equação linear

$$\dot{C}_n = \frac{-i}{\hbar} E_n C_n.$$

Separando C_n em parte real e imaginária, $C_n = Q_n + i P_n$, vemos que Q_n e P_n satisfazem as equações de um oscilador harmônico com frequência $\omega_n = E_n / \hbar$:

$$\dot{P}_n = -\omega_n Q_n \quad ; \quad \dot{Q}_n = \omega_n P_n \quad n=1,2,\dots$$

Esse conjunto de equações pode ser obtido através da Hamiltoniana clássica auxiliar

$$\mathbf{H} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\omega_n^2}{2} (P_n^2 + Q_n^2)$$

que é integrável. As trajetórias $Q_n(t)$, $P_n(t)$ cobrem toros de dimensão infinita e nenhum caos é esperado.

Portanto, não há caos quântico, mas certamente há caos clássico. Como fica então o Princípio da Correspondência? Esse princípio, formulado por Bohr em 1923 [9,10] por ser resumido na frase: “A teoria quântica deve se aproximar da clássica assintoticamente no limite dos grandes números quânticos (ou, formalmente, no limite $\hbar \rightarrow 0$)”.

O ponto central dessa aparente inconsistência é discutido por Berry [11] e reside na não-analiticidade do limite $\hbar \rightarrow 0$. Como exemplo, Berry toma a interferência entre duas fontes de luz equidistantes do observador q :

$$\text{✻} \text{-----} q \text{-----} \text{✻}$$

A intensidade é dada pela superposição de duas ondas com momentos $+p$ e $-p$,

$$I = \left| e^{i p q / \hbar} + e^{-i p q / \hbar} \right|^2 = 4 \cos^2 p q / \hbar.$$

Já aqui o limite semiclássico é patológico devido à existência de uma singularidade essencial. O limite clássico correto, onde a intensidade de duas fontes é o dobro da intensidade de uma única fonte, só é obtida fazendo-se uma média sobre um intervalo Δq finito, correspondendo à impossibilidade de medidas com precisão total:

$$\begin{aligned} I_{\text{clássica}} &= \lim_{\Delta q \rightarrow 0} \lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta q} \int_{q-\Delta q/2}^{q+\Delta q/2} 4 \cos^2 \left(\frac{p q'}{\hbar} \right) dq' = \\ &= \lim_{\Delta q \rightarrow 0} \lim_{\hbar \rightarrow 0} \left[2 + \frac{2\hbar}{p\Delta q} \sin \left(\frac{p\Delta q}{2\hbar} \right) \cos \left(\frac{p q}{\hbar} \right) \right] = 2 \end{aligned}$$

Note que os limites $\hbar \rightarrow 0$ e $\Delta q \rightarrow 0$ não comutam. Um outro caso muito importante é a não comutatividade dos limites $\hbar \rightarrow 0$ e $t \rightarrow \infty$. O estudo do espectro de energias está ligado aos estados estacionários e, nesse caso, o limite $t \rightarrow \infty$ é inevitável, como veremos a seguir. Por outro lado, caos clássico implica em ergodicidade e mixing, propriedades que só podem ser verificadas num intervalo infinito de tempo. Aí parece residir a não-trivialidade do princípio de correspondência, pois para fazer aflorar o caos clássico a partir da dinâmica quântica, ambos os limites devem ser tomados. Voltaremos a essa questão nos capítulos seguintes.

A discussão acima sugere que *caos quântico* deve ser encarado como um estudo do limite semiclássico de sistemas cujos análogos clássicos sejam caóticos. Em particular, deve-se buscar propriedades que sejam típicas de sistemas caóticos e que não ocorram em sistemas integráveis. Uma dessas propriedades é fornecida

pela distribuição estatística dos níveis de energia. Apesar dessa propriedade estatística ser de grande importância na caracterização do *caos quântico*, não abordaremos esse tópico aqui. O leitor deve consultar o livro de Ozorio de Almeida para uma introdução e referências básicas sobre o assunto.

1.2 - A Função de Green e o Propagador

Os principais objetos de interesse neste curso serão funções de onda, níveis de energia, evolução temporal de estados iniciais e propriedades estatísticas do espectro. Uma quantidade muito útil nesse estudo é a *densidade local de níveis*, ou *Função de Green*, definida como

$$G^+(q'', q', E) \equiv \sum_n \frac{\phi_n^*(q') \phi_n(q'')}{E - E_n + i\epsilon} = \langle q'' | \frac{1}{E - H + i\epsilon} | q' \rangle \quad (2)$$

onde, por razões técnicas que veremos adiante, devemos tomar o limite $\epsilon \rightarrow 0$ e onde $\phi_n(q) = \langle q | \phi_n \rangle$ são as autofunções de H com autovalor E_n , Eq.(1). Estaremos sempre assumindo que H tem espectro discreto. A Função de Green tem polos nos níveis de energia. Dos resíduos pode-se extrair as autofunções. Se conseguíssemos uma aproximação semiclássica para $G(q'', q', E)$ poderíamos associar aos seus polos os níveis de energia semiclássicos e aos seus resíduos as funções semiclássicas. Ocorre que aproximações para a Eq.(2) não são fáceis de se obter diretamente. A idéia então é fazer uma transformada de Fourier e escrever G em termos do *propagador* $K^+(q'', q', t)$:

$$G^+(q'', q', E) = \frac{1}{i\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} K^+(q'', q', t) e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\epsilon)t} dt \quad (3)$$

Aqui o propagador é definido como

$$K^+(q'', q', t) = \langle q'' | \hat{K}^+(t) | q' \rangle \quad (4)$$

e

$$K^+(t) = \begin{cases} 0 & \text{se } t < 0 \\ e^{-i\hat{H}t/\hbar} & \text{se } t \geq 0 \end{cases} \quad (5)$$

O operador $\hat{K}^+(t)$ é a solução da equação

$$i\hbar \frac{\partial \hat{K}}{\partial t} - \hat{H} \hat{K} = i\hbar \delta(t) \hat{1} \quad , \quad (6)$$

ou seja, é a função de Green temporal da equação de Schrödinger. Usando a representação de coordenadas podemos re-escrever (6) como

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} K(q'', q', t) - \hat{H} K(q'', q', t) = i\hbar \delta(t) \delta(q'' - q') \quad (6.b)$$

onde \hat{H} atua na variável q'' e q' é tratado como um parâmetro fixo. Dada uma condição inicial $|\psi(0)\rangle$ qualquer, então

$$|\psi(t)\rangle = \hat{K}^+(t)|\psi(0)\rangle, \quad (7.a)$$

ou

$$\psi(q,t) = \int K^+(q,q',t) \psi(q',0) dq' \quad (7.b)$$

Para ver que as equações (2) e (3) correspondem à mesma definição de G , inserimos (5) em (3) e fazemos a integração:

$$\begin{aligned} G(q'',q',E) &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^{\infty} \langle q'' | e^{-i\hat{H}t/\hbar} | q' \rangle e^{\frac{i}{\hbar}(E+i\varepsilon)t} dt \\ &= \sum_n \frac{1}{i\hbar} \varphi_n^*(q') \varphi_n(q'') \int_0^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(E-E_n+i\varepsilon)t} dt \end{aligned}$$

Fazendo a integral e tomando o limite $\varepsilon \rightarrow 0$ obtemos

$$\begin{aligned} G^+(q'',q',E) &= \sum_n \frac{1}{i\hbar} \varphi_n^*(q') \varphi_n(q'') \left. \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(E-E_n)t - \frac{\varepsilon t}{\hbar}}}{\frac{i}{\hbar}(E-E_n+i\varepsilon)} \right|_0^{\infty} \\ &= \sum_n \frac{\varphi_n^*(q') \varphi_n(q'')}{E-E_n+i\varepsilon} \end{aligned} \quad (8)$$

onde deixamos ε para indicar o processo que foi executado. Da mesma forma definimos

$$K^-(t) = \begin{cases} -e^{-i\hat{H}t/\hbar} & \text{se } t \leq 0 \\ 0 & \text{se } t > 0 \end{cases} \quad (9)$$

e

$$G^-(q'',q',E) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^0 \frac{i}{\hbar} \langle q'' | e^{-i\hat{H}t/\hbar} | q' \rangle e^{i(E-i\varepsilon)t/\hbar} dt \quad (10)$$

$$= \sum_n \frac{\varphi_n^*(q') \varphi_n(q'')}{E-E_n-i\varepsilon} \quad (11)$$

Podemos ainda re-escrever G^\pm em termos do seu valor principal de Cauchy. Como

$$\frac{1}{E - E_n \pm i\varepsilon} = \frac{(E - E_n)}{(E - E_n)^2 + \varepsilon^2} \mp \frac{i\varepsilon}{(E - E_n)^2 + \varepsilon^2}$$

então se $E \neq E_n$ o limite $\varepsilon \rightarrow 0$ no segundo termo se anula e no primeiro fornece $\frac{1}{E - E_n}$, que indicamos por

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{E - E_n}{(E - E_n)^2 + \varepsilon^2} = P \left(\frac{1}{E - E_n} \right)$$

onde P representa a “parte principal”, sem o polo. Se $E = E_n$, esse primeiro termo se anula e o segundo termo diverge. Então,

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\varepsilon}{(E - E_n)^2 + \varepsilon^2} = A \delta(E - E_n) .$$

Para determinar o valor da constante A integramos de $-\infty$ a $+\infty$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\varepsilon dE}{(E - E_n)^2 + \varepsilon^2} = A$$

fazendo $(E - E_n) = \varepsilon \operatorname{tg}\theta$ a integral pode ser calculada e obtemos $A = \pi$. Assim,

$$\frac{1}{E - E_n \pm i\varepsilon} = P \left(\frac{1}{E - E_n} \right) \mp i\pi \delta(E - E_n) \quad (12)$$

Dessa forma, re-escreveremos as Eq. (8) e (11)

$$G^\pm(q'', q', E) = P \left[\sum_n \frac{\varphi_n^*(q') \varphi_n(q'')}{E - E_n} \right] \mp i\pi \sum_n \varphi_n^*(q') \varphi_n(q'') \delta(E - E_n) \quad (13)$$

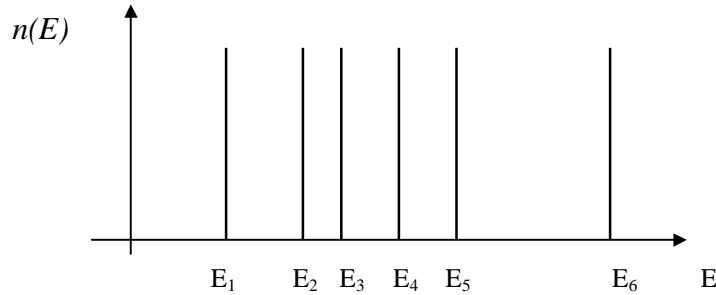
Podemos simplificar um pouco essa expressão se estivermos interessados apenas nos autovalores e não nas auto-funções. Para isso tomamos o traço de G^\pm e obtemos a *função resposta*:

$$\begin{aligned} G^\pm(E) &\equiv \operatorname{tr} [G^\pm(q'', q', E)] = \int dq G^\pm(q, q, E) \\ &\equiv P \left[\sum_n \frac{1}{E - E_n} \right] \mp i\pi \sum_n \delta(E - E_n) \end{aligned} \quad (14)$$

A densidade de níveis $n(E)$ é definida como

$$\begin{aligned}
 n(E) &\equiv \mp \frac{1}{\pi} \operatorname{Im}(G^{\pm}(E)) = -\frac{1}{2\pi i} (G^+(E) - G^-(E)) \\
 &= \sum_n \delta(E - E_n)
 \end{aligned}
 \tag{15}$$

e tem uma singularidade do tipo delta em cada nível de energia:



As equações (13) e (15) e sua conexão com o propagador via transformada de Fourier, Eq. (3) serão fundamentais na análise que faremos nos próximos capítulos. A idéia central é a obtenção do limite semiclássico de $K(q'', q', t)$ em termos da formulação de Feynman de integrais de trajetória e, em seguida, obter aproximações semiclássicas para $G(q'', q', E)$ e $n(E)$. Aqui é importante notar que a passagem de $G \rightarrow K$ implica na integração (3) sobre todo o tempo. Temos aí o problema dos limites $\hbar \rightarrow 0$ e $t \rightarrow \infty$ aparecendo explicitamente.