UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

Correções Quânticas $1/N$ ao Limite Clássico: Aplicação ao Modelo de Lipkin $SU(2)$

Tese apresentada ao Instituto
de Física da Universidade de São Paulo
para a obtenção do título de
Doutor em Ciências.

Marcelo Trindade dos Santos

Comissão Examinadora:

Profa. Dra. Maria Carolina Nemes - UFMG (Orientadora) M. C. Nemes

Prof. Dr. Caio Lewenkopf - UERJ

Prof. Dr. Alfredo Miguel Ozório de Almeida - CBPF

Prof. Dr. Marcus Aloizio Martinez de Aguiar - UNICAMP

Prof. Dr. Celso Luiz Lima - IFUSP

Sylvio Canuto
Prof. Iberê Luiz Caldas
Presidente da Comissão de Pós-Graduação

SÃO PAULO - BRASIL

JUNHO - 1997

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ex. 1
SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO
2633
INSTITUTO DE FÍSICA

SBI-IFUSP

305M810T2633

17/07/97

530.155352
S337c
D
ex. 1

FICHA CATALOGRÁFICA
Preparada pelo Serviço de Biblioteca e Informação do Instituto de Física da Universidade de São Paulo

Santos, Marcelo Trindade dos
Correções Quânticas 1/N ao Limite Clássico: Aplicação ao Modelo de Lipkin SU(2). São Paulo. 1997.

Tese (Doutoramento) Universidade de São Paulo. Instituto de Física - Departamento de Física Matemática

Área de Concentração: Física Nuclear
Orientador: Profa. Dra. Maria Carolina Nemes

Unitermos: 1. Caos; 2. Tunelamento; 3. Limite Semiclássico.

USP/IF/SBI - 46/97

Dedico este trabalho à memória de minha Mãe.

Agradecimentos

Eu agradeço a Deus pelo Amor que não comporta qualquer medida.

Agradeço a Anna Maria Trindade por ter deixado muito, muito mais do que apenas saudade.

À Ciça pelo companheirismo e amizade, pelo carinho e incentivo que me foram tão importantes ao longo destes últimos doze anos.

À Paula e ao Marcio, por termos conseguido passar juntos por situações das mais adversas, meus agredecimentos. É muito bom saber que vocês estão ai!

À Fernanda, Audrey e Ivone, por terem me recebido em Belo Horizonte, sempre, com carinho tão imenso.

À Sâmya, pelo apoio e incentivo constantes, pelo super alto astral.

À Maisa, pela amizade das mais profundas.

À Carolina pelos muitos anos de orientação.

À FAPESP pelo apoio financeiro.

A mim, por ter encontrado um caminho e lutado para chegar até aqui.

Agradeço também aquelas pessoas, e são muitas, que de alguma maneira participaram da elaboração deste trabalho.

"Light tomorrow with today"

Elizabeth Barrett Browning (1806)

Resumo

Neste trabalho mostramos de que maneira o princípio variacional dependente do tempo pode ser usado para se estudar correções quânticas ao limite clássico, particularmente, no contexto do modelo de Lipkin $SU(2)$. Mostramos que tais correções podem ser colocadas na forma Hamiltoniana, acoplando-se à dinâmica clássica um conjunto de variáveis associadas às flutuações quânticas, nos levando à uma dinâmica efetiva com o número de graus de liberdade dobrado em relação ao sistema clássico. Como consequência o comportamento caótico emerge. Mostramos que este caos *semiquântico* é o mecanismo através do qual o tunelamento se manifesta no espaço de fase. Mostramos que tais correções melhoram sistematicamente o resultado clássico, propondo um critério para quantificar esta melhora.

Abstract

We show how the time dependent variational principle can be used to study quantum corrections to the classical limit, in particular of the $SU(2)$ Lipkin Model. We show how such corrections can be cast in Hamiltonian form, coupling to the classical dynamics a set of variables associated to the quantum fluctuations. This leads to an effective dynamics which has the number of degrees of freedom doubled with respect to the classical system. As a consequence chaotic behavior emerges. We show that this semiquantal chaos is the mechanism through which tunneling is effected, and also, that these corrections systematically improve the classical results and propose some quantitative measure of this improvement.

Conteúdo

1 Introdução **8**

2 O Modelo de Lipkin $SU(2)$ **14**

2.1 Descrição do Modelo 15

2.2 Propriedades do Espectro de Energias 18

3 O Formalismo: Conceitos e Técnicas **23**

3.1 O Princípio Variacional Dependente do Tempo: Aproximações para a Dinâmica Quântica. 25

3.2 A Representação de Estados Coerentes 33

3.3 A Aproximação Gaussiana 38

3.3.1 O Estado e sua Parametrização 38

3.3.2 Os Parâmetros Variacionais e o Princípio de Incerteza 45

3.3.3 A Evolução Temporal no Espaço de Parâmetros 48

4 Aplicação ao Modelo de Lipkin **51**

4.1 Uma Realização Bosônica 52

4.2 Parametrização da Hamiltoniana $< H >$ 55

4.3 A Evolução Temporal dos Parâmetros Gaussianos 60

4.4 A Dinâmica Semiclássica do Modelo de Lipkin $SU(2)$ 63

4.5 Obtenção do Limite Clássico 70

5 Resultados Numéricos **76**

5.1 A Representação Clássica 78

5.2 Aspectos Gerais do Comportamento Semiclássico 83

5.3 A Representação Semiclássica: Indução de Comportamento Caótico . 87

5.4 Evolução Temporal de Valores Esperados: Tempo de Validade da Aproximação Semiclássica 95

5.5 Descrição Semiclássica do Tunelamento 103

6 Conclusões **108**

Capítulo 1

Introdução

Com a criação (ou invenção) da Mecânica Quântica na década de vinte surge o problema de se estabelecer uma relação entre os elementos, que por assim dizer, compõe as soluções de um problema físico, tratado com esta teoria (os estados estacionários e seus autovalores), e com a teoria Clássica (as órbitas no espaço de fase), em particular, no limite em que estas descrevem a mesma fenomenologia. Estabelecer esta conexão, é o principal objetivo do limite semiclássico na Mecânica Quântica. Em geral, não se trata de uma tarefa simples, já que as duas teorias estão construídas sobre estruturas matemáticas completamente diferentes, o que traz uma dificuldade do ponto de vista da linguagem e são, ainda, estanques do ponto de vista conceitual [1].

Nos últimos anos, com a assimilação e desenvolvimento pela Física, da teoria do caos em sistemas dinâmicos (sua construção formal data do início do século), o limite semiclássico passa a ser um instrumento importante também na tentativa de se determinar quais são as relações entre os sistemas clássicos não integráveis e seus análogos quânticos e, mesmo, quais as relações existentes entre os sistemas quânticos que possuem análogos clássicos não integráveis (caos quântico ?). O conceito de movimento caótico, baseado na divergência exponencial de trajetórias com condições iniciais arbitrariamente próximas, bem como sua bem estabelecida estru-

tura formal, não pode ser *transportado* para a Mecânica Quântica. Este problema tem sido abordado também do ponto de vista das matrizes aleatórias, estudando-se as propriedades estatísticas dos espectros de energia (distribuições de primeiros vizinhos, NND, e $\Delta_3(L)$). Veja [2] para uma descrição deste e de outros métodos e resultados.

Um trabalho pioneiro para o desenvolvimento das teorias e métodos semiclássicos é devido à Einstein em 1917 e culmina com as regras de quantização, válidas apenas no caso das dinâmicas clássicas ($\hbar \equiv 0$) integráveis, dos toros invariantes no espaço de fase [3]. Para os casos mais gerais, onde a dinâmica clássica pode também ser caótica, o problema da quantização se torna substancialmente mais complicado. Neste sentido uma contribuição importante foi dada por M. Gutzwiller com a fórmula do traço [4], estabelecendo que os autovalores do sistema quântico podem ser obtidos através de uma soma apropriada sobre as órbitas periódicas instáveis do sistema clássico análogo (Veja também a referência [5]).

Do ponto de vista da conexão entre as trajetórias no espaço de fase (meio este apropriado para o estudo da dinâmica clássica) e os vetores de estado do sistema quântico uma contribuição importante é a função de Wigner [6], capaz de associar a uma dada função de onda um espaço de fase clássico. Entretanto, a função de Wigner não é positiva definida sobre todo o espaço, o que nos impede de associar a ela o conceito de probabilidade. Esta limitação foi suplantada por K. Husimi, através de uma média gaussiana adequada da própria distribuição de Wigner. Um resultado importante obtido de maneira qualitativa, no contexto dos bilhares quânticos, por McDonald e Kaufman [7] em 1984, é o da concentração da densidade de probabilidade, que neste caso depende apenas das coordenadas, sobre as órbitas periódicas clássicas imersas no espaço de fase caótico. O fenômeno, tratado ainda de maneira qualitativa por Heller [8], foi nomeado por ele como cicatrização das órbitas

periódicas.

É neste contexto, o da caologia no limite semiclássico, que surge a motivação para este trabalho.

Uma classe de sistemas de grande inportância na Física é a daqueles cujo espectro de energia admite uma expansão em potências de $1/N$, (onde N é uma medida do número de graus de liberdade do sistema) e o limite $N \to \infty$ coincide com o limite clássico, ou seja, pode-se de maneira unívoca construir um sistema clássico cuja dinâmica seja equivalente à dinâmica quântica no limite $N \to \infty$. São os chamados modelos $1/N$, ou sistemas de Curie-Weiss. Dentre eles, estão o Modelo de Lipkin, o Maser de Dicke e o Modelo de Heisenberg. O limite clássico para tais sistemas pode ser obtido através do princípio variacional dependente do tempo, realizado sobre um particular subconjunto do espaço de Hilbert, o dos estados coerentes. Nesta abordagem a evolução temporal quântica (evolução das médias dos operadores) é representada no espaço de fase em termos das grandezas utilizadas para a parametrização do subconjunto escolhido [9]. A dinâmica assim obtida para tais parâmetros (no caso da escolha dos estados coerentes e para sistemas $1/N$) é a dinâmica clássica análoga, ou seja, é equivalente ao comportamento do sistema quântico no limite $N \to \infty$ [10].

Outro subconjunto particularmente importante no contexto do princípio variacional dependente do tempo é o das funções de onda gaussianas. Trata-se da aproximação gaussiana, ou de estados comprimidos, largamente utilizada no contexto da Teoria Quântica de Campos [11], Física de Muitos Corpos [12] e Cosmologia [13]. Nesta representação além das médias dos operadores quânticos suas variânças também figuram no espaço dos parâmetros variacionais. Este será um resultado essencial para o desenvolvimento do trabalho que apresentaremos aqui.

Recentemente mostrou-se que o comportamento caótico em sistemas hamilto-

nianos pode desempenhar um papel diferente daquele que brevemente descrevemos aqui na conexão entre sistemas quânticos e clássicos: A realização do princípio variacional com a restrição do espaço de Hilber completo a um conjunto de gaussianas nos leva a uma dinâmica efetiva (variacional), hamiltoniana, cujo comportamento é caótico, mesmo para um sistema quântico cujo análogo clássico é integrável. Tal comportamento é fruto da inclusão no espaço de fase das variáveis relacionadas às variânças dos operadores quânticos, naturalmente incorporadas de maneira não linear pela dinâmica efetiva. Dito de outra maneira, a inclusão dos efeitos quânticos através das variáveis de flutuação induzem a dinâmica efetiva à um comportamento caótico. Tal comportamento fora exibido pela primeira vez na literatura (quase simultaneamente) em [14] e [15], e recebeu o nome de caos *semiquântico*. Mostra-se ainda, em [15], que tal comportamento pode ser obtido de maneira equivalente com um tratamento baseado no teorema de Ehrenfest. Neste caso, as variáveis de flutuação são incorporadas através de uma expansão da média do potencial quântico em torno da centróide do pacote de onda. Este comportamento fora estudado explicitamente no caso do oscilador hamônico quártico tanto em [15] como em outros trabalhos mais recentes encontrados em [16] e [17]. Contribuir para uma melhor compreensão do comportamento de caos semiquântico e de suas implicações físicas é o principal objetivo deste trabalho.

Com base no princípio variacional dependente do tempo contruímos (nos moldes dados pelas referências [19] e [20]) a matriz densidade para a realização da aproximação de campo médio mais geral possível para operadores de um corpo. Tal estado inclui, por construção, as médias dos operadores de criação e aniquilação de bosons além das médias de seus bilineares. Com as parametrizações adequadas mostramos que a dinâmica hamiltoniana efetiva que assim obtivemos incorpora as variáveis de flutuação quântica (variânças) ao espaço de fase de variáveis canonicamente conju-

gadas, acopladas às médias de maneira não linear, induzindo o sistema resultante à um comportamento caótico. Realizamos a aproximação gaussiana para o modelo de Lipkin $SU(2)$ (aqui como representante da classe de sistemas $1/N$) largamente utilizado no contexto da Física Nuclear para o estudo de métodos variacionais, e mostramos que:

i - Mesmo tendo o modelo de Lipkin $SU(2)$ o limite clássico sabidamente integrável, a aproximação de campo médio gaussiana resulta em uma dinâmica caótica.

ii - O princípio de incerteza de Heisenberg é respeitado pela dinâmica efetiva (teremos sempre $\Delta q \Delta p \geq \hbar/2$) e se manifesta no espaço de fase através de uma barreira centrífuga para a variança, impedindo que Δq eΔp se anulem simultaneamente.

iii - A dinâmica efetiva, sob certas condições, representa uma expansão semiclássica em torno de $1/N$ (com $N \to \infty$) na qual a ordem zero reproduz o limite clássico (obtido usualmente através da representação de estados coerentes) e apenas os termos de ordens superiores contém a dinâmica das larguras, ou seja, os efeitos quânticos trazidos por estas variáveis entram explicitamente na dinâmica efetiva como correções de ordens superiores na expansão $1/N$.

iv - O resultado exato para a evolução temporal do valor esperado dos operadores quânticos é melhor reproduzido pela descrição semiclássica (gaussiana ou semiquântica) do que pela dinâmica clássica simplesmente. Propomos um critério para quantificar esta melhora e estudamos as escalas de tempo de validade dessas duas aproximações .

v - A quebra de integrabilidade devido à inclusão, na dinâmica, das flutuações quânticas tem implicações físicas importantes. Mostramos que o caos neste caso é o meio através do qual se manifesta o tunelamento quântico no espaço de fase hamiltoniano completo (efetivo).

O trabalho está organizado da seguinte maneira:

Capítulo 2 : Descrevemos o modelo de Lipkin $SU(2)$ e discutimos sua solução exata, como função do número de partículas e do parâmetro de interação.

Capítulo 3 : Descrevemos o formalismo com o qual construiremos a dinâmica semiclássica do modelo.

Capítulo 4 : Obtemos a dinâmica semiclássica para uma realização bosônica do modelo de Lipkin $SU(2)$ mostrando que as flutuações quânticas são incluídas na dinâmica como correções de ordem $1/N$.

Capítulo 5 : Exploramos numericamente o resultado para a dinâmica efetiva estudando as implicações físicas do comportamento caótico, particularmente, a representação semiclássica (gaussiana) do tunelamento quântico.

Capítulo 2

O Modelo de Lipkin $SU(2)$

Neste capítulo apresentamos o Modelo de Lipkin $SU(2)$, que será objeto de nosso estudo no decorrer deste trabalho. Descrevemos sua dinâmica quântica e o comportamento do seu espectro de energias para N grande.

2.1 Descrição do Modelo

Com o propósito de testar as várias técnicas e formalismos disponíveis em sua época para o estudo de sistemas de muitos corpos no contexto da Física Nuclear, H. J. Lipkin, N. Meshkov e A. J. Glick, construiram em 1965 [18] um modelo suficientemente simples para que fosse possível resolvê-lo exatamente e rico o bastante para que sua solução não fosse trivial. Trata-se de um sistema de N partículas (férmions) que ocupam dois níveis separados por um intervalo de energia ϵ, dados por $\sigma\frac{1}{2}\epsilon$ ($\sigma = \pm 1$), e cada um deles com $\Omega = N$ estados degenerados rotulados por um índice p ($p = 1, ..., N$). Desta maneira o operador fermiônico $c^{\dagger}_{\sigma p}$ cria uma partícula no $p-ésimo$ estado do nível que possui energia $\sigma\frac{1}{2}\epsilon$. A Hamiltoniana do sistema é dada por

$$H = \frac{1}{2}\epsilon \sum_{\sigma=\pm 1}\sum_{p=1}^{N} \sigma c^{\dagger}_{p\sigma}c_{p\sigma} + \frac{1}{2}V \sum_{\sigma=\pm 1}\sum_{p=1}^{N}\sum_{p'=1}^{N} c^{\dagger}_{p\sigma}c^{\dagger}_{p'\sigma}c_{p-\sigma}c_{p'-\sigma}$$

$$+\frac{1}{2}W \sum_{\sigma=\pm 1}\sum_{p=1}^{N}\sum_{p'=1}^{N} c^{\dagger}_{p-\sigma}c^{\dagger}_{p'+\sigma}c_{p\sigma}c_{p'-\sigma} \qquad (2.1)$$

onde V e W são os parâmetros das interações de dois corpos que espalham pares de partículas entre os níveis sem mudar o rótulo p. O primeiro termo é responsável pelo espalhamento de pares de partículas que estão no nível $-\sigma\frac{1}{2}\epsilon$ para o nível $\sigma\frac{1}{2}\epsilon$. O segundo termo espalha um par de partículas que já estão em níveis diferentes, uma para o nível em que está a outra. É importante notar que qualquer um dos termos de interação troca apenas o índice relativo ao nível de energia em que está a partícula, levando-a para o estado individual de mesmo rótulo p do nível oposto. Temos sempre $\Omega = N$ estados individuais p com energia $+\sigma$ ou $-\sigma$, portanto, a matriz Hamiltoniana será 2^N dimensional. O problema de autovalores para a

Hamiltoniana escrita acima é bastante simplificado ao identificarmos os operadores fermiônicos bilineares com os geradores do grupo $SU(2)$

$$J_+ = \sum_{p=1}^{N} c_{p+1}^\dagger c_{p-1} \quad , \quad J_- = \sum_{p=1}^{N} c_{p-1}^\dagger c_{p+1}$$

$$J_z = \frac{1}{2}\sum_{p}^{N}(c_{p+1}^\dagger c_{p+1} - c_{p-1}^\dagger c_{p-1}) \quad . \tag{2.2}$$

Os operadores J_+ e J_- trocam uma partícula de nível e o operador J_z nos dá a diferença entre o número de pares do nível superior e o inferior.

As relações de comutação para os operadores acima podem ser diretamente obtidas das relações de anticomutação que definem os operadores de criação e aniquilação de férmions. O anticomutadores

$$[c_{p\sigma}, c_{p'\sigma'}]_+ = 0 \quad , \quad [c_{p\sigma}^\dagger, c_{p'\sigma'}^\dagger]_+ = 0 \quad ,$$

$$[c_{p\sigma}, c_{p'\sigma'}^\dagger]_+ = \delta_{pp'}\delta_{\sigma\sigma'} \quad , \tag{2.3}$$

com as definições de J_+ , J_- e J_z nos levam às relações de comutação do grupo $SU(2)$

$$[J_z, J_\pm] = \pm J_\pm \quad , \quad [J_+, J_-] = 2S_z \quad . \tag{2.4}$$

Em termos dos operadores de quasispin (2.2) a expressão para a Hamiltoniana (2.1) fica

$$H = cJ_z + \frac{V}{2}(J_+^2 + J_-^2) + \frac{W}{2}(J_+J_- + J_-J_+) \tag{2.5}$$

(nos limitaremos neste trabalho ao caso $W = 0$ [21], e isso sem que se traga qualquer prejuízo para os nossos objetivos). Esta representação torna mais simples a solução do problema devido ao fato de que a Hamiltoniana H é um polinômio nos geradores da álgebra e portanto comuta com os operadores de Casimir $J^2 = \frac{1}{2}(J_+J_- + J_-J_+) + J_z^2$, $[J^2, H] = 0$. Por esta razão o espaço dos autoestados de H, 2^N-dimensinal, deve

ter as mesmas simetrias do grupo $SU(2)$, ou seja, está subdividido em multipletos de dimensão $2J+1$ que não se misturam pela atuação de qualquer um dos geradores.

Consideraremos para a diagonalização da Hamiltoniana H o maior dos multipletos, o de dimensão $2J+1$. Este subespaço é gerado a partir do estado fundamental não perturbado, ou seja, a partir do estado em que para $V = W = 0$ todas as partículas estão no nível inferior. Para este estado a projeção do operador de quasispin J no eixo de quantização z é a menor possível $J_z|J,-J>= -N/2|J,-J>$ e a ação do operador de Casimir $J^2|J,M>= N/2(N/2+1)|J,M>$ nos permite identificar $J = N/2$.

2.2 Propriedades do Espectro de Energias

Do ponto de vista da Física do modelo contida no espectro de energias, dois são os motivos de nosso interesse por ele aqui. Primeiramente, por se tratar de um sistema cujo espectro pode ser escrito como uma expansão em potências de $\frac{1}{N}$,

$$\frac{1}{N}E_n(\chi, N) = E_n^0(\chi) + \frac{1}{N}E_n^1(\chi) + ... \quad , \tag{2.6}$$

onde $\chi = V(N-1)/\epsilon$ é o parâmetro de interação escalado com N. Assim, à medida que N cresce, o espectro se aproxima cada vez mais de uma curva universal (no sentido de ser praticamente a mesma para qualquer N suficientemente grande) e no limite $N \to \infty$, a energia depende somente do parâmetro de interação χ. Este é o limite clássico do modelo, único e bem definido, no qual não estão presentes quaisquer tipos de correlações ou flutuações quânticas.

O comportamento do espectro para N grande pode ser ilustrado através de um estudo numérico (como em [22]). A atuação dos operadores da dinâmica é dada por

$$J_z|J, M >= M|J, M > \quad \text{e} \quad J_\pm|J, M >= \sqrt{J(J+1) - M(M \pm 1)}|J, M \pm 1 > . \tag{2.7}$$

Podemos construir a matriz hamiltoniana na base $\{|J, M >\}$, e numericamente diagonalizá-la para quaisquer valores do parâmetro de interação χ e do número de partículas presentes no sistema N. O fato de se tratar de um sistema com espaço de Hilbert finito torna esta tarefa tecnicamente muito mais simples, já que a diagonalização pode ser feita sem que seja preciso truncar a base e testar a convergência dos autovalores, o que acontece quando o espaço é (pelo menos em um dos graus de

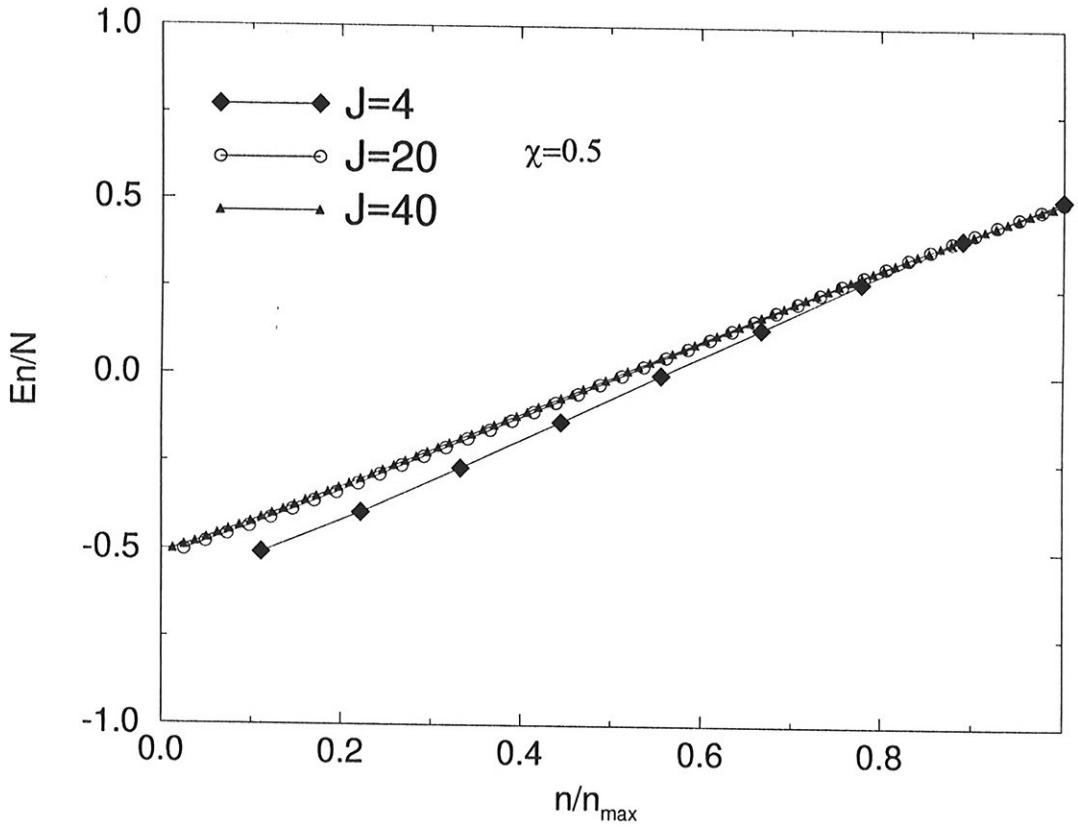

Figura 2.1: Espectro de Energias para vários valores do número de partículas ($J = (N/2) = 4, 20, 40$) e parâmetro de interação $\chi = 0.5$. E_n/N é a energia do n-*ésimo* autoestado dividida por N, e n_{max} é o número de autoestados de H dado por ($n_{max} = 2J + 1$).

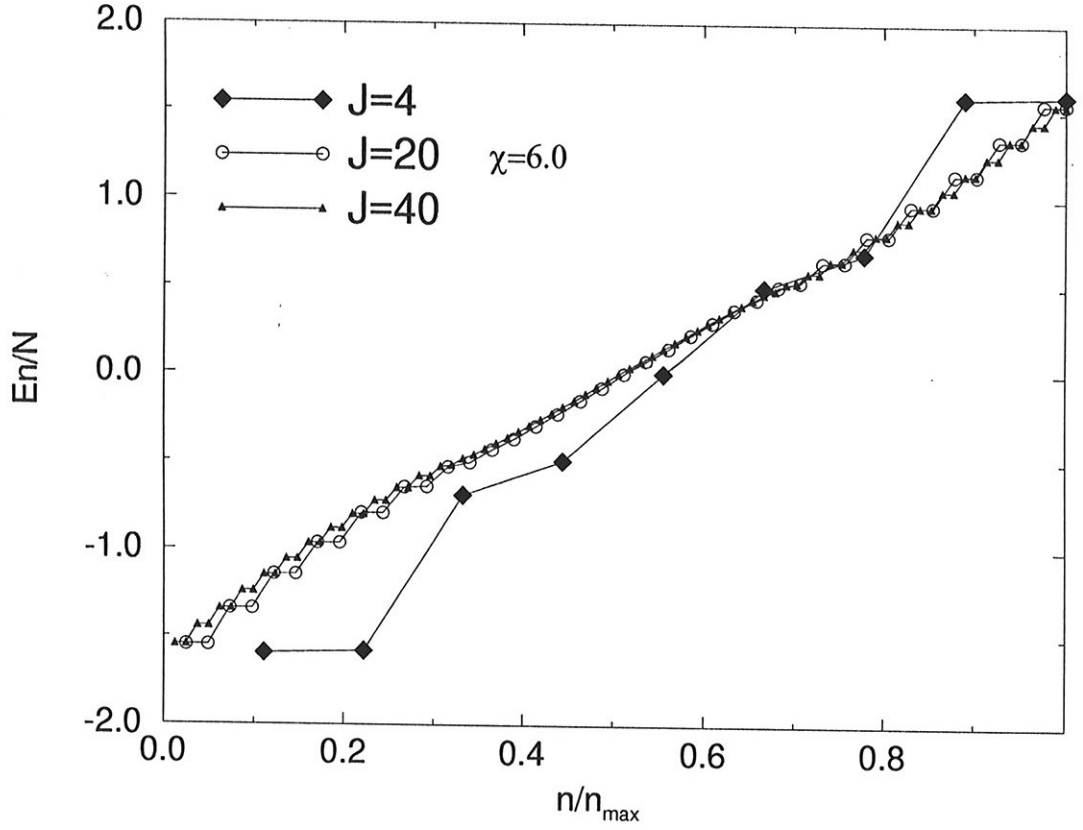

Figura 2.2: Espectro de Energias para vários valores do número de partículas ($J = (N/2) = 4, 20, 40$) e parâmetro de interação $\chi = 6.0$. E_n/N é a energia do *n-ésimo* autoestado dividida por N, e n_{max} é o número de autoestados de H dado por ($n_{max} = 2J + 1$).

liberdade) de dimensão infinita.

O outro ponto que nos desperta interesse diz respeito ao comportamento do modelo em relação ao parâmetro de interação χ. O espectro exibe tanto o caráter *vibracional* quanto o *rotacional* (ou *deformado*) da interação. Chamamos vibracional a situação em que o parâmetro de interação χ é menor do que um certo valor crítico χ_{crit} ($\chi_{crit} = 1.0$), pois é nesta situação que o espectro está mais próximo do caso harmônico. Em particular, quando $\chi \to 0$ (este é o chamado limite *vibracional*), a base dos autovetores de J_z é também a dos autovetores da hamiltoniana H, e os níveis de energia estão igualmente espaçados. Para qualquer valor de χ neste regime os autovalores E_n estarão limitados por $|J|$. Escalando a energia pelo número de partículas teremos sempre $-\frac{1}{2} \leq E_n/N \leq \frac{1}{2}$. A energia do estado fundamental terá, para qualquer valor de N, o limite inferior dado por $E_n/N = -\frac{1}{2}$ e o estado de máxima energia será $E_n/N = \frac{1}{2}$. Na figura 1(a) mostramos o espectro escalado (E_n/N) versus o rótulo n do respectivo autoestado (n_{max} é o número de estados em que o sistema pode ser encontrado) num caso típico de vibração ($\chi = 0.5$), e para vários valores de N. Na figura 1(a) fica explícito também o comportamento do espectro para N grande. A medida que N cresce o gráfico torna-se mais denso (contínuo no limite $N \to \infty$) e passa a ser independente de N.

Para valores de χ maiores que χ_{crit}, onde ao acoplamento é devida a maior parte da energia do sistema (regime *rotacional*), torna-se evidente o caráter não harmônico do espectro. O fato importante neste caso, é que se torna favorável energeticamente, a promoção de partículas para o nível superior, ou seja, a energia (do estado fundamental por exemplo) diminui em relação ao caso $\chi < \chi_{crit}$, com a promoção de pares para o nível superior. Neste regime, o estado fundamental tem as partículas divididas entre os dois níveis e ao contrário do regime *vibracional* sua energia dependerá do parâmetro de interação. Na figura 1(b) mostramos o gráfico de

E_n/N versus n/n_{max} para $\chi = 6.0$. Note que no intervalo $-\frac{1}{2} \leq E_n/N \leq \frac{1}{2}$ o espectro preserva seu carater harmônico, sendo nitidamente não hamônico para $|E_n/N| > \frac{1}{2}$ onde os autovalores da energia aparecem em dubletos. Este comportamento se deve à simetria discreta da Hamiltoniana relacionada à paridade que se expressa por $[H, \exp(i\pi J_z)] = 0$: Estados que no nível superior tenham um número par (ou ímpar) de partículas somente interagem com estados que tenham a mesma paridade. Como consequência desta simetria os autoestados de H escritos na base $\{|J, M>\}$ aparecem divididos em dois grupos. Um destes grupo é expresso em termos de elementos da base com M par e o outro com M ímpar. No limite $N \to \infty$, assim como no caso $\chi < \chi_{crit}$, o espectro tende para uma curva lisa.

Capítulo 3

O Formalismo: Conceitos e Técnicas

O nosso objetivo neste capítulo é descrever os princípios e procedimento dos quais faremos uso para a construção da dinâmica clássica do modelo de Lipkin SU(2) acrescida de suas correções quânticas $(1/N)$.

Na seção 3.1, baseada no trabalho de P. Kramer e M. Saraceno [9], construímos através do pricípio variacional dependente do tempo, realizado sobre um subconjunto do espaço de Hilbert parametrizado convenientemente, um conjunto de equações hamiltonianas onde está representado o sistema quântico. Obtemos uma estrutura simplética para o espaço dos parâmetros variacionais e uma hamiltoniana que descreve a dinâmica neste espaço. Mostramos que a descrição proveniente do princípio variacional dependente do tempo pode, em geral, dar origem à uma dinâmica hamiltoniana caótica no espaço dos parâmetros variacionais, mesmo no caso em que o limite clássico e a dinâmica quântica não exibem tal comportamento. Na seção 3.2 construímos o limite clássico através da representação de estados coerentes. Na seção 3.3, descrevemos as técnicas que utilizaremos para obtenção da dinâmica variacional no caso em que o subconjunto escolhido é mais geral do que o dos estados

coerentes, e se aproxima um pouco mais do espaço de Hilbert verdadeiro. Fazendo uso de uma técnica desenvolvida em outro contexto [19] [20], escolhemos um subconjunto de gaussianas cuja parametrização comporta efeitos de flutuações quânticas. Trata-se da aproximação gaussiana, a mais geral aproximação de um corpo, na qual as variânças são introduzidas como variáveis também canonicamente conjugadas no espaço de fase. Discutimos algumas das consequências gerais desta escolha.

3.1 O Princípio Variacional Dependente do Tempo: Aproximações para a Dinâmica Quântica.

O princípio variacional dependente do tempo, consiste na minimização do funcional de ação S', definido por

$$S' = \int_{t_1}^{t_2} dt \mathrm{L}'(\psi, \bar{\psi}) \quad , \tag{3.1}$$

onde

$$\mathrm{L}' = < \psi(t) | i\frac{\partial}{\partial t} - H | \psi(t) >$$

(a barra indica a conjugação complexa)
é a lagrangiana do sistema, H a hamiltoniana e $|\psi(t) >$ um vetor qualquer do espaço de Hilbert $\mathbf{H}$, com o vínculo de normalização à unidade $< \psi(t)|\psi(t) >= 1$ (nesta seção , ao contrário da seguinte, faremos a demonstração considerando apenas estados puros, isso sem que haja qualquer perda de generalidade em nossos resultados).

Da condição de mínimo (ou de extremo simplesmente) $\delta S' = 0$, resulta então a equação de Schroedinger

$$(i\frac{\partial}{\partial t} - H)|\psi(t) >= 0 \quad . \tag{3.2}$$

Entretanto, nos será útil aqui deixar que a normalização seja feita a posteriori. Para isto definimos, sem o vículo de normalização à unidade $< \psi(t)|\psi(t) >= 1$, a função real

$$\mathrm{L}(\psi(t),\bar{\psi(t)}) = \frac{i}{2}\frac{<\psi(t)|\dot{\psi}(t)> - <\dot{\psi}(t)|\psi(t)>}{<\psi(t)|\psi(t)>} + \tag{3.3}$$

$$-\frac{<\psi(t)|H|\psi(t)>}{<\psi(t)|\psi(t)>}$$

como sendo a lagrangiana do sistema, e o funcional

$$S = \int_{t_1}^{t_2} dt \mathrm{L}(\psi,\bar{\psi}) \quad , \tag{3.4}$$

como sendo a ação.

Deixamos também para ser feita à posteriori, a escolha dos estados $|\psi>$ sobre os quais minimizaremos a ação. Suporemos por enquanto, apenas, que o subconjunto escolhido seja parametrizável em termos de um conjunto de números complexos $\{\bar{z}\}$, ou seja, que um vetor deste subconjunto pode ser escrito como

$$|\psi(t)>=|\psi(\bar{z_1}(t),\bar{z_2}(t),...,\bar{z_L}(t))> \quad , \tag{3.5}$$

e que existam também, a primeira e a segunda derivadas de cada vetor em relação aos parâmetros $\bar{z}_j$ e seus complexos conjugados z_j.

Vale notar aqui, que o subconjunto $\{|\psi(\bar{z})>\}$ não é, em geral, um subespaço de **H** (a soma $\alpha|\psi_a(\bar{z})> + \beta|\psi_b(\bar{z})>$ não pertence necessariamente à $\{|\psi(\bar{z})>\}$). O fato importante é que a equação que descreve a dinâmica quântica está definida sobre um espaço linear, e ao fazermos a parametrização complexa, abrimos mão do princípio da superposição. Desta maneira, é de se esperar que as equações obtidas da minimização da ação, estejam numa forma não linear, como são em geral, as equações dinâmicas e o espaço de fase hamiltoniano.

Substituindo a função de onda parametrizada na definição da lagrangiana $\mathrm{L}(\psi,\dot{\psi})$, obtemos

$$\mathrm{L}(z,\bar{z}) = \frac{i}{2}\sum_j \frac{\dot{\bar{z}}_j < \psi(\bar{z})|\frac{\partial}{\partial \bar{z}_j}\psi(\bar{z}) > - \dot{z}_j < \frac{\partial}{\partial \bar{z}_j}\psi(\bar{z})|\psi(\bar{z}) >}{< \psi(\bar{z})|\psi(\bar{z}) >} - \frac{< \psi(\bar{z})|H|\psi(\bar{z}) >}{< \psi(\bar{z})|\psi(\bar{z}) >}, \tag{3.6}$$

e tratando z_j e $\bar{z}_j$, formalmente como variáveis independentes, podemos escrevê-la como

$$\mathrm{L}(z,\bar{z}) = \frac{i}{2}\sum_j (\dot{\bar{z}}_j \frac{\partial}{\partial \bar{z}_j} - \dot{z}_j \frac{\partial}{\partial z_j}) \ln < \psi(\bar{z})|\psi(\bar{z}) > - \mathcal{H} \quad , \tag{3.7}$$

onde

$$\mathcal{H}(z,\bar{z}) = \frac{< \psi(\bar{z})|H|\psi(\bar{z}) >}{< \psi(\bar{z})|\psi(\bar{z}) >} \quad . \tag{3.8}$$

O próximo passo para obter o extremo da ação é calcular a variação da lagrangiana

$$\delta \mathrm{L}(z,\bar{z}) = \sum_\ell \frac{\partial}{\partial z_\ell}\mathrm{L}\delta z_\ell + \frac{\partial}{\partial \bar{z}_\ell}\mathrm{L}\delta \bar{z}_\ell \tag{3.9}$$

Assim,

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} dt \delta \mathrm{L}(z,\bar{z}) =$$

$$= \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_{\ell j} \{ (\dot{\bar{z}}_j \frac{\partial^2}{\partial z_\ell \partial \bar{z}_j} - \dot{z}_j \frac{\partial^2}{\partial z_\ell \partial z_j}) \ln < \psi(\bar{z})|\psi(\bar{z}) > \delta z_\ell +$$

$$+ (\dot{\bar{z}}_j \frac{\partial^2}{\partial \bar{z}_\ell \partial \bar{z}_j} - \dot{z}_j \frac{\partial^2}{\partial \bar{z}_\ell \partial z_j}) \ln < \psi(\bar{z})|\psi(\bar{z}) > \delta \bar{z}_\ell + \tag{3.10}$$

$$-(\frac{\partial}{\partial z_\ell}\mathcal{H}\delta z_\ell + \frac{\partial}{\partial \bar{z}_\ell}\mathcal{H}\delta\bar{z}_\ell)\} \quad ,$$

mas

$$\dot{z}_j \frac{\partial^2}{\partial z_\ell \partial z_j} \ln < \psi(\bar{z})|\psi(\bar{z}) > = \frac{\partial}{\partial z_\ell}(\frac{d}{dt} - \dot{\bar{z}}_j \frac{\partial}{\partial \bar{z}_j}) \ln < \psi(\bar{z})|\psi(\bar{z}) > \tag{3.11}$$

e

$$\dot{\bar{z}}_j \frac{\partial^2}{\partial \bar{z}_\ell \partial \bar{z}_j} \ln < \psi(\bar{z})|\psi(\bar{z}) > = \frac{\partial}{\partial \bar{z}_\ell}(\frac{d}{dt} - \dot{z}_j \frac{\partial}{\partial z_j}) \ln < \psi(\bar{z})|\psi(\bar{z}) > \quad ,$$

e substituindo as equações acima em (3.10), a integração dos termos que envolvem a derivada total no tempo, nos leva à

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_{\ell j} i\dot{\bar{z}}_j (\frac{\partial^2}{\partial z_\ell \partial \bar{z}_j} \ln < \psi(\bar{z})|\psi(\bar{z}) >)\delta z_\ell + \tag{3.12}$$

$$-i\dot{z}_j (\frac{\partial^2}{\partial \bar{z}_\ell \partial z_j} \ln < \psi(\bar{z})|\psi(\bar{z}) >)\delta\bar{z}_\ell - \delta\mathcal{H}(z,\bar{z}) \quad .$$

Para que a condição de extremo $\delta S = 0$ seja satisfeita, é preciso que

$$\delta\mathcal{H}(z,\bar{z}) = \sum_{\ell j}\Big[i\dot{\bar{z}}_j (\frac{\partial^2}{\partial z_\ell \partial \bar{z}_j} \ln < \psi(\bar{z})|\psi(\bar{z}) >)\delta z_\ell + \tag{3.13}$$

$$-i\dot{z}_j (\frac{\partial^2}{\partial z_\ell \partial z_j} \ln < \psi(\bar{z})|\psi(\bar{z}) >)\delta\bar{z}_\ell\Big] \quad .$$

Lembrando que

$$\delta\mathcal{H} = \sum_i \frac{\partial}{\partial z_i}\mathcal{H}\delta z_i + \frac{\partial}{\partial z_i}\mathcal{H}\delta\bar{z}_i \quad ,$$

a comparação com o lado direito da equação nos permite escrever as equações de movimento

$$i\sum C_{\ell j}\dot{\bar{z}}_j = \frac{\partial}{\partial z_\ell}\mathcal{H}$$

$$-i\sum C_{j\ell}\dot{z}_j = \frac{\partial}{\partial \bar{z}_\ell}\mathcal{H}, \tag{3.14}$$

onde

$$C_{\ell j} = \frac{\partial^2}{\partial z_\ell \partial \bar{z}_j}\ln < \psi(\bar{z})|\psi(\bar{z}) > \quad . \tag{3.15}$$

Nas aplicações que faremos ao longo deste trabalho, a matriz $C_{\ell j}$ será sempre diagonal. Colocando as equações do movimento na forma de matrizes de blocos, ficamos finalmente com

$$i\begin{pmatrix} 0 & C \\ -\bar{C} & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \dot{z} \\ \dot{\bar{z}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial z} \\ \frac{\partial}{\partial \bar{z}} \end{pmatrix}\mathcal{H}(z,\bar{z}) \quad . \tag{3.16}$$

Da forma das equações de movimento, vemos que a matriz C desempenha um papel importante, qual seja, o de caracterizar a geometria do espaço complexo $\{z, \bar{z}\}$.

Supondo que $C(z,\bar{z})$ seja uma matriz inversível (vê-se de sua definição que $C(z,\bar{z})$ é também uma matriz hermitiana ,$C_{\ell j} = C^{\dagger}_{\ell j}$), podemos definir sobre o espaço complexo, uma estrutura simplética, ou um parênteses de Poisson generalizado:

$$\{f,g\}_{(z,\bar{z})} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial z}f & \frac{\partial}{\partial \bar{z}}f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -(C^{-1})^t \\ C^{-1} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial z}g \\ \frac{\partial}{\partial \bar{z}}g \end{pmatrix} \quad , \tag{3.17}$$

que pode ainda ser escrito como

$$\{f,g\}_{(z,\bar{z})} = \sum_{kk'} \frac{\partial}{\partial \bar{z}_k} f C^{-1}_{kk'} \frac{\partial}{\partial \bar{z}'_k} g - \frac{\partial}{\partial z'_k} f (C^{-1})^t_{k'k} \frac{\partial}{\partial \bar{z}_k} \tag{3.18}$$

(nas fórmulas acima o índice t indica transposição).

O ponto importante aqui, é que calculando explicitamente o parênteses de Poisson generalizado de $\mathcal{H}$ com cada uma das variáveis z_j e $\bar{z}_j$,

$$\{\mathcal{H}, z_\ell\} = \sum_{kk'} \frac{\partial}{\partial \bar{z}_k} \mathcal{H} {C^{-1}}_{kk'} \delta'_{\ell k'}$$

e substituindo $\frac{\partial}{\partial \bar{z}_k}\mathcal{H}$ por seu valor em (3.14), verificamos que as equações de movimento podem ser escritas sob a forma

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\bar{z}_\ell &= i\{\mathcal{H}, \bar{z}_\ell\} \\ \frac{d}{dt}z_\ell &= i\{\mathcal{H}, z_\ell\} \ . \end{aligned} \tag{3.19}$$

Este resultado nos diz que sobre uma trajetória no espaço complexo, as translações no tempo, e portanto a dinâmica do sistema, são determinadas pela função $\mathcal{H}(z,\bar{z})$.

De maneira geral, a qualquer operador O_{op} que atua no espaço de Hilbert **H**, podemos associar univocamente uma função analítica no espaço complexo $\{z,\bar{z}\}$,através da relação

$$\mathcal{O}_{(z,\bar{z})} = \frac{< \psi(\bar{z})|O_{op}|\psi(\bar{z}) >}{< \psi(\bar{z})|\psi(\bar{z}) >} \quad , \tag{3.20}$$

e a evolução no tempo desta função é, em termos do parênteses de Poisson generalizado, dada por

$$\frac{d}{dt}\mathcal{O}(z,\bar{z}) = \{\mathcal{O},\mathcal{H}\} \quad . \tag{3.21}$$

Vemos então que através do princípio variacional dependente do tempo e da parametrização complexa, podemos construir uma estrutura "tipicamente clássica" (uma hamiltoniana, responsável pela dinâmica, e uma estrutura simplética que caracteriza o aspecto cinemático) onde está representado aproximadamente o sistema quântico. Entretanto, de um método variacional sempre se obtém algum resultado e a qualidade desta aproximação, em geral, depende exclusivamente da adequação da parametrização complexa.

O ponto essencial, e que justifica a elaboração desta seção, diz respeito a um aspecto qualitativo da dinâmica descrita por $\mathcal{H}$: A não linearidade do espaço complexo $\{z,\bar{z}\}$ se estabelece exclusivamente como consequência da parametrização, a partir do momento em que se escolhe para a variação da ação um subconjunto $\{|\psi(\bar{z})>\}$ que não é, como já foi dito, um subespaço de $\mathbf{H}$. Além disso a parametrização é arbitrária, tanto quanto ao gênero da dependência como ao número de parâmetros. Lembrando ainda que tal dinâmica foi gerada sem qualquer referência ao limite clássico do sistema quântico original (esta conexão, quando existe, é feita à *posteriori*), torna-se natural esperar que as propriedades de integrabilidade, quando existem neste limite, não sejam necessariamente observadas nas equações do movimento (3.19) obtidas variacionalmente, ou seja, para um sistema quântico exatamente solúvel, com análogo clássico regular podemos obter variacionalmente uma dinâmica caótica (o número de graus de liberdade pode ser aumentado sem que necessariamente ocorrra o mesmo com o número de eventuais constantes do movimento presentes no sistema).

Fica assim colocada de maneira transparente a origem do problema recentemente exposto na literatura com o nome de caos semiquântico. Este assunto será discutido

em detalhes num contexto específico mais adiante.

3.2 A Representação de Estados Coerentes

Laurence G. Yaffe [10] discute em que sentido, o limite $N \to \infty$ de várias teorias é equivalente ao limite clássico. Neste trabalho, desenvolve-se um método geral para a construção de teorias clássicas a partir das teorias quânticas com apenas um parâmetro de expansão ($1/N$ ou $\hbar$, por exemplo). O método pressupõe algumas hipóteses (a dinâmica quântica deve ser dada em termos de uma álgebra de Lie) e mostra que no caso de serem satisfeitas pode-se, a partir dos estados coerentes generalizados, construir uma hamiltoniana clássica, um espaço de fase, e mostrar que a dinâmica resultante é equivalente à forma limite da dinâmica quântica original. A demonstração em [10] é construtiva, mas não a abordaremos aqui.

Em particular, sobre sistemas com espaço de Hilbert finito, K. Heep e E. Lieb [23] demonstraram que as equações de Heisenberg para os operadores quânticos, convergem (em qualquer instante t) para um conjunto de equações clássicas que são (ou pelo menos podem ser) construidas com estados coerentes. Nesta referência, trata-se explicitamente do Maser de Dicke que descreve uma interação de dipolo entre a matéria (átomos) e um campo eletromagnético (fótons) Entretanto a validade da demonstração pode ser extendida para toda a classe de sistemas $\frac{1}{N}$. A demonstração está feita passo a passo em [24].

Um tratamento bastante extenso sobre as propriedades gerais dos estados coerentes foi realizado por Perelomov [25] e algumas de suas aplicações importantes são também tratadas em [26]. Discutiremos aqui apenas algumas das propriedades dos estados coerentes de spin $|\omega>$ (estados coerentes do grupo $SU(2)$) conjunto que será do nosso interesse:

i- Os estados coerentes de spin constituem um conjunto completo (geram todo o

espaço de Hilbert) e não são ortonormais. Um estado arbitrário $|\lambda>$ sempre pode ser escrito em termos deles.

ii- Os estados corerentes de spin minimizam a relação de incerteza de Heisenberg $< J_x^2 >< J_y^2 >\geq \frac{1}{4} < J_z >^2$, onde a média $< ... >$ é tomada sobre o autoestado de J_z de menor projeção no eixo de quantização.

Para alguns casos simples, particularmente aqueles em que o limite clássico é integrável (sitemas unidimensionais como o Modelo de Lipkin e o Modelo Simétrico para a Interação de Emparelhamento), é possível estabelecer uma conexão bastante precisa entre o sistema quântico original e sua representação de estados coerentes. Tal conexão pode ser estabelecida em dois níveis, relacionados aos elementos básicos da dinâmica quântica, ou seja, o espectro de energias e as autofunções. Em primeiro lugar, através de uma regra de quantização do tipo Bohr-Sommerfeld, podemos reconstruir o espectro de energias (no limite $N \rightarrow \infty$) a partir unicamente da ação das órbitas clássicas no espaço de fase, colocando assim as energias do espectro em uma correspondência biunívoca com as curvas de nível da superfície de energia clássica. A correspondência entre as órbitas periódicas e as autofunções do sistema quântico pode ser observada através da distribuição de Wigner [6] que associa a uma dada autofunção $|\phi_n>$ um espaço de fase real. A representação de estados coerentes $\{|\omega>\}$ também é bastante útil aqui (por eliminar as singularidades e não analiticidades típicas do limite semiclássico). Com uma média apropriada sobre a função de Wigner pode-se construir uma distribuição positiva definida, probabilística, (a distribuição de Wigner não o é) sobre o espaço de fase. Trata-se da distribuição de Husimi [27], obtida com a projeção de $|\phi_n>$ sobre $\{|\omega>\}$: $h_n = |<\phi_n|\omega>|^2$. Mostra-se que as autofunções assim projetadas sobre o espaço de fase se concentram sobre as órbitas periódicas. Vê-se ainda, analiticamente [28], que esta concentração será tão mais intensa quanto menor for a velocidade do sistema sobre a trajetória,

ou seja, os picos da distribuição de probabilidades quântica ocorrem onde o sistema clássico se desloca mais lentamente e, portanto, onde a probabilidade clássica também é maior. Um estudo detalhado desta conexão, no caso do modelo simétrico para a interação de emparelhamento pode ser encontrado em [29].

Seguiremos agora com a construção do espaço de fase a partir desta representação. Os estados coerentes para a álgebra $SU(2)$ ou estados coerentes de SPIN (não normalizados) são dados por

$$|\omega >= e^{\bar{\omega}J_+}|J,-J> \quad ,$$

$$= \sum_n \frac{(\bar{\omega})^n (J_+)^n}{n!}|J,-J> \tag{3.22}$$

$$= (\bar{\omega})^n \left(\begin{array}{c} 2J \\ n \end{array} \right)^{\frac{1}{2}} |J, n-J>$$

onde ω é um número complexo que o parametriza e $|J,-J>$ é o estado de spin J com a menor projeção no eixo de quantização J_z ($J_z|J,-J>=-J|J,-J>$). Os estados coerentes definidos acima nos serão úteis no cálculo direto do limite clássico do modelo de Lipkin.

A normalização do estado é feita com o produto escalar

$$< \omega|\omega >= \sum_n (\omega\bar{\omega})^n \left(\begin{array}{c} 2J \\ n \end{array} \right) = (1+\omega\bar{\omega})^{2J} \quad , \tag{3.23}$$

que nos permite calcular a matriz $C_{\ell j}$ (eq. (3.15))

$$C_{\ell j} = \frac{\partial^2}{\partial\omega_\ell \partial\bar{\omega}_j} \sum_i 2J_i \ln(1+\omega\bar{\omega}) \quad , \tag{3.24}$$

$$C_{\ell j} = \frac{2J_\ell}{(1+\omega_\ell\bar{\omega}_j)^2}\delta_{\ell j} \tag{3.25}$$

(note que neste caso $\ell = j = 1$), e as equações do movimento (3.14) ficam sob a forma

$$i\frac{2J}{(1+\omega\bar{\omega})^2}\dot{\bar{\omega}}_\ell = \frac{\partial}{\partial\omega_\ell}\mathcal{H}_{cl}(\omega,\bar{\omega}) \quad , \tag{3.26}$$

$$-i\frac{2J}{(1+\omega\bar{\omega})^2}\dot{\omega} = \frac{\partial}{\partial\bar{\omega}}\mathcal{H}_{cl}(\omega,\bar{\omega}) \quad , \tag{3.27}$$

onde a hamiltoniana clássica $\mathcal{H}_{cl}$ é dada por

$$\mathcal{H}_{cl}(\omega,\bar{\omega}) = \frac{<\omega|H|\omega>}{<\omega|\omega>} \quad . \tag{3.28}$$

Tendo já obtido as equações do movimento, que é o essencial, a projeção dos parâmetros complexos $\bar{\omega}$ e ω no espaço de fase real de variáveis canonicamente conjugadas pode ser feita por uma transformação de variáveis simples. Em primeiro lugar, levamos as equações do movimento (3.26) e (3.27) à forma canônica das equações de Hamilton em variáveis complexas. Com

$$\xi = \sqrt{\frac{2J}{(1+\omega\bar{\omega})}}\omega \quad , \tag{3.29}$$

que satisfazem as relações de canonicidade

$$\{\bar{\xi}_\ell, \xi_j\} = \delta_{\ell j}$$

$$\{\bar{\xi}_\ell, \bar{\xi}_j\} = \{\xi_\ell, \xi_j\} = 0 \quad , \tag{3.30}$$

obtemos

$$i\dot{\bar{\xi}} = \frac{\partial}{\partial\xi}\mathcal{H}_{cl} \tag{3.31}$$

$$-i\dot{\xi} = \frac{\partial}{\partial\bar{\xi}}\mathcal{H}_{cl} \quad . \tag{3.32}$$

Seguimos agora, com a projeção do espaço de complexo $\{\xi, \bar{\xi}\}$ sobre o espaço de fase real $\{I, \theta\}$ de coordenadas polares. Fazemos

$$\xi = \sqrt{J + I} e^{i\theta} \quad , \tag{3.33}$$

que quando invertida nos dá

$$I = \xi\bar{\xi} - J \tag{3.34}$$

e

$$\theta = -i \ln \sqrt{\frac{\xi}{\bar{\xi}}} \quad . \tag{3.35}$$

Os limites do movimento no espaço de fase, em termos das variáveis reais ficam

$$-J \leq I \leq J \qquad \text{e} \qquad -\pi \leq \theta \leq \pi \quad . \tag{3.36}$$

Finalmente as equações do movimento são obtidas simplesmente substituindo-se as variáveis I e θ (eq. (3.33) e complexo conjugado) em (3.31) e (3.32). Comparando as partes reais e imaginárias obtemos

$$\dot{I} = -\frac{\partial}{\partial\theta}\mathcal{H}_{cl} \qquad \text{e} \qquad \dot{\theta} = \frac{\partial}{\partial I}\mathcal{H}_{cl} \quad . \tag{3.37}$$

Podemos ainda, alternativamente, escrever a dinâmica no espaço cartesiano $\{q, p\}$ através de

$$\xi = \frac{1}{\sqrt{2}}(p + iq) \qquad \text{e} \qquad \bar{\xi} = \frac{1}{\sqrt{2}}(p - iq) \quad . \tag{3.38}$$

Estes resultados para a dinâmica clássica nos serão extremamente importantes, nos servindo como uma referência (termo de comparação) para o resultado que obteremos da aproximação gaussiana descrita na seção seguinte.

3.3 A Aproximação Gaussiana

3.3.1 O Estado e sua Parametrização

Como vimos na seção 2.1, a qualidade da aproximação depende da escolha do subconjunto para a minimização da ação, e deve ser tão melhor quanto melhor este for capaz de representar o espaço de Hilbert completo. Considerando que da restrição ao conjunto de estados coerentes resulta o limite clássico, nos pareceu natural a idéia de *generalizar* esta escolha para obtermos correções quânticas para este limite. Uma possível realização desta proposição é aproximação gaussiana, utilizada largamente em várias áreas da Física como a Teoria Quântica de Campos, Física de Muitos Corpos, Cosmologia e Óptica Quântica. Nesta aproximação os estados variacionais estão restritos à um conjunto de gaussianas sem a condição de incerteza mínima como no caso do limite clássico.

O termo "*generalização*" empregado acima tem um significado preciso. Nas teorias quânticas que comportam o limite de N grande os produtos bilineares se fatoram. Para quaisquer operadores $\mathcal{O}_1$ e $\mathcal{O}_2$ podemos escrever o produto como

$$< \mathcal{O}_1\mathcal{O}_2 >=< \mathcal{O}_1 >< \mathcal{O}_2 > +O(1/N) + ... \tag{3.39}$$

e portanto

$$\lim_{N\to\infty} < \mathcal{O}_1\mathcal{O}_2 >=< \mathcal{O}_1 >< \mathcal{O}_2 > \quad . \tag{3.40}$$

É o caso da representação de estados coerentes. Os produtos, para bosons por exemplo, são dados por

$$< \alpha|aa|\alpha >=< \alpha|a|\alpha >< \alpha|a|\alpha > \quad , \tag{3.41}$$

onde $|\alpha >= \exp(-|\alpha|^2/2)\exp(\alpha a^\dagger)|0>$. Há apenas um parâmetro variacional complexo α para cada grau de liberdade do sistema. A dinâmica quântica original é representada apenas pelos valores médios $< \alpha|a|\alpha >= \alpha$ e $< \alpha|a^\dagger|\alpha >= \alpha^*$ (o asterisco indica conjugação complexa). No caso da aproximação gaussiana, além das médias dos operadores bosônicos os seus produtos bilineares entram também como parâmetros complexos e são, como veremos, introduzidos como as correções quânticas $O(1/N)$ da expressão (3.39). As quantidades que precisam ser especificadas neste caso são $< a^\dagger >$, $< a^\dagger a^\dagger >$, $< a^\dagger a >$ e seus complexos conjugados. Como veremos, a introdução destes novos parâmetros pode ser feita sem que se perca o caráter Hamiltoniano do sistema, o que nos permitirá fazer uso de toda a estrutura formal dos sistemas hamiltonianos, mesmo sem estarmos tratando de um sistema clássico de fato. Esta é uma das motivações para o uso do formalismo que descreveremos a seguir.

Nesta seção mostraremos as técnicas que nos serviram para a realização da aproximação gaussiana, e que estão descritas, num contexto mais geral em [19] e [20], onde se vai além do tratamento de campo médio e através da técnica dos operadores de projeção se constrói um conjunto de equações cinéticas para a evolução de correlações.

Os estados quânticos de um sistema bosônico ($[a, a^\dagger] = 1$) em geral são representados por um operador densidade F e o valor esperado de um operador qualquer neste estado é dado em termos do traço

$$< O >= Tr(OF) \quad , \tag{3.42}$$

e a matriz F tem traço unitário $Tr(F) = 1$.

A dinâmica é obtida através da equação de Liouville-von Neumann

$$i\dot{F} = [H, F] \quad , \tag{3.43}$$

onde H é a hamiltoniana que descreve o sistema. Os resultados obtido na seção 2.1 através do princípio variacional dependente do tempo realizado com os estados puros $\{|\psi(z(t))>\}$ são os mesmo se construirmos o espaço variacional não mais com estes mas sim com uma uma mistura estatística F (veja uma dedução em [30]), ou seja, também para uma mistura estatística podemos obter uma estrutura hamiltoniana para a dinâmica dos parâmetros variacionais. Como função tentativa para uma aproximação ao estado F escolheremos um subconjunto de gaussianas F_0, com a forma mais geral possível em se tratando da aproximação de um corpo.

Entendemos por operador de um corpo, todo e qualquer operador que possa ser escrito como uma combinação bilinear dos operadores que atuam sobre um mesmo subespaço :

$$O_{1corpo} = \sum_{i,j} c_{ij} C_i C_j$$

onde os c_{ij} são os coeficientes e os C_i e C_j são os operadores da dinâmica (a , $a^\dagger$ e a unidade, no nosso caso). A aproximação mais geral é aquela que leva em conta todo e qualquer efeito produzido por um operador de um corpo ($\mathbf{1}$, $a^\dagger$ $a^\dagger a$, $a^\dagger a^\dagger$ e seus conjugados hermitianos), e representa através deles próprios os efeitos dinâmicos produzidos por operadores de dois ou mais corpos. Dito de outra maneira, F_0 é a projeção gaussiana da densidade total F (a forma explícita da matriz densidade F_0 assim construída será apresentada logo adiante). Em geral a matriz F pode ser dividida em dois termos [31]

$$F = F_0 + F' \quad . \tag{3.44}$$

F_0, como já dissemos, responsável pela dinâmica de campo médio (unitária) e F' $(Tr(F') = 0)$ responsável unicamente pela evolução temporal das correlações (dinâmica não unitária). Este último termo, mesmo nos casos mais simples, não pode ser tratado sem aproximações. A decomposição (3.44) pode ser implementada com o auxilio da técnica dos operadores de projeção $\mathcal{P}(t)$ tais que $F_0 = \mathcal{P}(t)F$ (a forma explícita para o operador $\mathcal{P}(t)$ pode ser encontrada nas referências [19] e [20]), com a qual se pode escrever F' como uma função da história de F_0, $F'(t) = F'[F_0(t' < t)]$.

De nosso interesse neste trabalho será a evolução temporal dada pela projeção gaussiana de F, F_0. A parametrização das médias $< a >$ e $< a^\dagger >$ no estado F_0 é feita como no caso dos estados coerentes, teremos

$$< a^\dagger >= Tr(a^\dagger F_0) = \sqrt{\frac{\mu_0}{2}}(q - i\frac{p}{\mu_0}) \quad , \tag{3.45}$$

onde μ_0 é um parâmetro de escala (colocamos $\mu_0 = 1$), q e p são números reais no espaço cartesiano. Para as médias dos operadores quadráticos faremos uso da transformação de Bogoliubov

$$\begin{pmatrix} \tilde{\eta} \\ \tilde{\eta}^\dagger \end{pmatrix} = \mathbf{X}^\dagger \begin{pmatrix} \tilde{a} \\ \tilde{a}^\dagger \end{pmatrix} \quad , \tag{3.46}$$

onde $\tilde{\eta} = \eta - < \eta >$, $\tilde{a} = a - < a >$ e $\mathbf{X}$ é a matriz que define a transformação

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} x^* & y \\ y^* & x \end{pmatrix} \quad , \tag{3.47}$$

(x e y são números complexos) satisfazendo a condição de normalização

$$\mathbf{X}^\dagger \mathbf{G} \mathbf{X} = \mathbf{G} \tag{3.48}$$

onde

$$\mathbf{G} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad , \quad \mathbf{G^2} = \mathbf{1} \quad . \tag{3.49}$$

A transformação dos bilinares (de $< \tilde{a}\tilde{a} >$, $< \tilde{a}^\dagger\tilde{a}^\dagger >$ e $< \tilde{a}^\dagger\tilde{a} >$ para $< \tilde{\eta}\tilde{\eta} >$, $< \tilde{\eta}^\dagger\tilde{\eta}^\dagger >$ e $< \tilde{\eta}^\dagger\tilde{\eta} >$) é feita através da equação

$$\mathbf{N} = \mathbf{X}^\dagger \mathbf{R} \mathbf{X} \quad , \tag{3.50}$$

onde

$$\mathbf{N} = \begin{pmatrix} < \tilde{\eta}^\dagger\tilde{\eta} > & < \tilde{\eta}\tilde{\eta} > \\ < \tilde{\eta}^\dagger\tilde{\eta}^\dagger > & < \tilde{\eta}\tilde{\eta}^\dagger > \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \nu & 0 \\ 0 & 1+\nu \end{pmatrix} \tag{3.51}$$

e

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} < \tilde{a}^\dagger\tilde{a} > & < \tilde{a}\tilde{a} > \\ < \tilde{a}^\dagger\tilde{a}^\dagger > & < \tilde{a}\tilde{a}^\dagger > \end{pmatrix} \quad . \tag{3.52}$$

Para que a transformação de Bogoliubov (3.46) seja canônica, ou seja, preserve as relações de comutação entre bosons ($[a, a^\dagger] = 1 \Rightarrow [\eta, \eta^\dagger] = 1$) é preciso que o vínculo $|x|^2 - |y|^2 = 1$ seja satisfeito. Esta condição é garantida pela equação (3.48).

Seguimos agora com a definição da matriz densidade gaussiana:

$$F_0 = \frac{1}{1+\nu}\left(\frac{\nu}{1+\nu}\right)^{\tilde{\eta}^\dagger\tilde{\eta}} \tag{3.53}$$

$$= \sum_g |g> \frac{1}{1+\nu}\left(\frac{\nu}{1+\nu}\right)^g < g| \quad .$$

O parâmetro ν nas equações acima é a ocupação dos bosons de Bogoliubov (quasibosons) deslocados $Tr(\tilde{\eta}^\dagger\tilde{\eta}F_0) =< \tilde{\eta}^\dagger\tilde{\eta} >= \nu$ e o estado $|g>$ contém toda (e somente) informação sobre os operadores relevantes (1-corpo). No caso $\nu = 0$ a matriz densidade F_0 terá a forma

$$F_0 = |0><0| \quad , \tag{3.54}$$

ou seja, será um estado puro. Neste caso o estado $|g = 0>$ é equivalente à gaussiana parametrizada por Jackiw e Kerman em [11]. Lê-se

$$|\Psi, t>= (2\pi\hbar G)^{-\frac{1}{4}}\exp[-\frac{1}{2\hbar}(\hat{q}-q)^2(\frac{1}{2}G^{-1}-2i\Pi)+\frac{i}{\hbar}p(\hat{q}-q)] \ , \qquad (3.55)$$

onde $q =< \hat{q} >$ e $p =< \hat{p} >$ são as médias dos operadores de posição e momento, e a parametrização das dispersões se dá através de G e Π, definidos adiante.

Como consequência direta da transformação (3.46) e da escolha da matriz densidade F_0 obtemos

$$Tr(F_0\tilde{\eta}^\dagger\tilde{\eta}^\dagger) =< \tilde{\eta}^\dagger\tilde{\eta}^\dagger >= 0 \qquad \text{e} \qquad Tr(F_0\tilde{\eta}\tilde{\eta}) =< \tilde{\eta}\tilde{\eta} >= 0 \ ; \qquad (3.56)$$

e

$$Tr(F_0\tilde{\eta}^\dagger) =< \tilde{\eta}^\dagger >= 0 \qquad \text{e} \qquad Tr(F_0\tilde{\eta}) =< \tilde{\eta} >= 0 \ , \qquad (3.57)$$

o que nos facilitará em muito o cálculo dos traços necessários para a obtenção da dinâmica dos parâmetros variacionais.

A matriz F_0 pode ainda ser reescrita sob a forma exponencial. Fazendo

$$\frac{\nu}{1+\nu} = e^m \qquad (3.58)$$

com $m < 0$, obtemos

$$F_0 = \frac{1}{K}e^{m\tilde{\eta}^\dagger\tilde{\eta}} \qquad , \qquad K = Tr(F_0) \qquad (3.59)$$

onde

$$Tr(F_0) = \sum_{n=0}^{\infty}[e^m]^n = \frac{1}{(1-e^m)} = 1+\nu \ . \qquad (3.60)$$

Note que o operador $\tilde{\eta}^\dagger\tilde{\eta}$ que aparece na exponencial (3.59) é de fato uma combinação linear de todos os operadores relevantes da dinâmica. Da equação (3.46) obtemos

$$\tilde{\eta}^{\dagger}\tilde{\eta} = x_a^* x_a a^{\dagger}a + y_a^* y_a a a^{\dagger} + x_a y_a^* a^{\dagger}a^{\dagger} + y_a x_a^* a a + \tag{3.61}$$

$$-(x_a^* a + y_a^* a^{\dagger}) < \eta^{\dagger} > -(x_a a^{\dagger} + y_a a) < \eta > + < \eta^{\dagger} >< \eta > \quad ,$$

e de (3.45), invertendo a trasformação de Bogoliubov podemos ver que $< \eta^{\dagger} >$ é uma função de p, q, x e y

$$< \eta^{\dagger} >= \sqrt{\frac{1}{2}}[q(x+y) - ip(x-y)] \quad . \tag{3.62}$$

Assim o estado F_0 será completamente identificado por um conjunto de cinco parâmetros: q, p, x, y e ν, e portanto, a evolução temporal da média de qualquer operador neste estado será expressa apenas (e completamente) em termos destas quantidades.

3.3.2 Os Parâmetros Variacionais e o Princípio de Incerteza

Os parâmetros variacionais introduzidos através da transformação de Bogoliubov exercem um papel fundamental na dinâmica resultante da aproximação de campo médio. Eles estão associados diretamente à dispersões Δq^2 e Δp^2 que serão escritas, portanto, em função de x, y e ν. Temos (veja referência [32])

$$\Delta q^2 = \frac{1}{2\mu_0}[< (a^\dagger + a) >^2 - (< a >^* + < a >)^2] =$$

$$= \frac{1}{2\mu_0}[1 + 2|y|^2 - (x^*y + y^*x)](1 + 2\nu) \quad , \tag{3.63}$$

$$\Delta p^2 = -2\mu_0[< (a^\dagger - a)^2 > - (< a >^* - < a >)^2] =$$

$$= 2\mu_0[1 + 2|y|^2 + (x^*y + y^*x)](1 + 2\nu) \quad . \tag{3.64}$$

O parâmetro ν é por construção uma constante, já que se trata de uma aproximação de campo médio, e a evolução temporal deve ser unitária (os autovalores da matriz densidade não evoluem no tempo). Este é um resultado direto da equação de Liouville-von Neumann para $\tilde{\eta}^\dagger\tilde{\eta}$

$$i\frac{d}{dt} < \tilde{\eta}^\dagger\tilde{\eta} >= Tr[\tilde{\eta}^\dagger\tilde{\eta}, H]F_0 = TrH[F_0, \tilde{\eta}^\dagger\tilde{\eta}] = 0 \tag{3.65}$$

(note que de (3.53) vem $[F_0, \tilde{\eta}^\dagger\tilde{\eta}] = 0$). A ocupação ν entrará na dinâmica como um parâmetro livre que nos fornece uma medida da pureza do estado F_0. Com efeito a quantidade

$$\delta = Tr(F_0) - Tr(F_0^2) \tag{3.66}$$

é uma função apenas de ν:

$$\delta = 1 - \frac{1}{(1-e^m)^2}\sum_{n=0}^{\infty}[e^{2m}]^n = \frac{2\nu}{1+2\nu} \quad .$$

Assim, para $\nu \to 0$ teremos $\delta = 0$ e portanto F_0 é um estado puro, caso que será de nosso interesse nas aplicações do formalismo.

Um passo importante é a projeção dos parâmetros de Bogoliubov x e y no espaço cartesiano - o mesmo em que estão escritas as médias dos operadores de criação e aniquilação de bosons (veja equação (3.45)) - de forma a obter um par de variáveis reais canonicamente conjugadas (a canonicidade será verificada *a posteriori*). Definimos [32] as variáveis σ e τ através da transformação

$$x = \cosh\sigma + i\frac{\tau}{2} \quad , \tag{3.67}$$

$$y = \sinh\sigma + i\frac{\tau}{2} \quad , \tag{3.68}$$

e depois uma segunda transformação

$$P = \sqrt{\frac{(1+2\nu)}{2}}\ \tau \quad , \tag{3.69}$$

$$Q = \sqrt{\frac{(1+2\nu)}{2}}\ e^{-\sigma} \quad , \tag{3.70}$$

nos permite escrever as dispersões (3.63) e (3.64) como

$$\Delta q^2 = Q^2 \quad , \tag{3.71}$$

$$\Delta p^2 = P^2 + \frac{(1+2\nu)^2}{4Q^2} \quad . \tag{3.72}$$

Nas equações acima reside a natureza quântica do novo grau de liberdade (Q, P): O Princípio de Incerteza se manifesta no espaço de fase através de uma barreira centrífuga

$$\frac{(1+2\nu)^2}{4Q^2}, \tag{3.73}$$

impedindo que as larguras se anulem. A obtenção deste termo é completamente independente da expressão para a hamiltoniana H, sua ocorrência é decorrente apenas da própria escolha para a parametrização, ou seja, do fato de estarmos levando em conta as médias dos operadores quadráticos (a correlação de pares). Trata-se da cinemática quântica representada no espaço dos parâmetros variacionais (espaço de fase). O mesmo se pode concluir da relação de incerteza de Heisenberg

$$\Delta q \Delta p = \sqrt{\frac{(1+2\nu)}{4} + P^2 Q^2} \;\geq\; \frac{(1+2\nu)}{2} \quad . \tag{3.74}$$

A condição de incerteza mínima é obtida fazendo-se

$$Q = \sqrt{\frac{(1+2\nu)^2}{2}} \qquad ; \qquad P = 0 \quad . \tag{3.75}$$

Particularmente, tomando-se o limite $\nu \to 0$ nas equações acima, obtemos para as dispersões $\Delta q = \Delta p = \sqrt{\frac{1}{2}}$. Neste caso a condição de incerteza mínima leva a densidade F_0 a um estado puro.

As variáveis Q eP se relacionam àquelas utilizadas em [11], G e Π através de uma transformação de variáveis simples. Encontramos (no caso ν=0)

$$G = Q^2 \qquad \text{e} \qquad \Pi = \frac{P}{2Q} \quad . \tag{3.76}$$

3.3.3 A Evolução Temporal no Espaço de Parâmetros

A evolução temporal para todo o conjunto de variáveis provenientes da aproximação gaussiana é obtida da equação de Liouville

$$i\frac{d}{dt} < O >= Tr(F_0[O, H]) \quad , \tag{3.77}$$

onde O é qualquer um dos operadores dos que julgamos relevantes. Mostraremos agora como calcular o lado esquerdo desta equação escrevendo-o em termos das derivadas temporais de q, p, Q e P. O lado direito deve ser calculado diretamente com a forma explícita do operador H.

Com a parametrização $< a^\dagger >= \sqrt{\frac{1}{2}}(q - ip)$ (3.45) e a transformação (3.46) inversa

$$a = x\eta - y^*\eta^\dagger \quad , \tag{3.78}$$

a equação dinâmica em termos de $\dot{q}$ e $\dot{p}$ fica

$$i\frac{d}{dt} < a >= xTr[\eta, H]F_0 - y^*Tr[\eta^\dagger, H]F_0 \quad , \tag{3.79}$$

$$i\sqrt{\frac{1}{2}}(\dot{q} + i\dot{p}) = xTr[\eta, H]F_0 - y^*Tr[\eta^\dagger, H]F_0 \quad . \tag{3.80}$$

A equação para $< a^\dagger >$ se obtém de maneira idêntica e é necessária para isolar as derivadas temporais de q e p.

A transformação de Bogoliubov leva, linearmente, os operadores a e $a^\dagger$ em η e $\eta^\dagger$, e será usada também para incorporação das médias dos operadores quadráticos $< \tilde{\eta}^\dagger\tilde{\eta}^\dagger >$ agora relacionados às variáveis de dispersão (Q, P).

A diagonalização da matriz $\mathbf{R}$ (eq. (3.52)) pode ser implementada através do problema de autovalores

$$\mathbf{GRX} = \mathbf{XGN} \quad , \tag{3.81}$$

juntamente com seu conjugado hermitiano

$$\mathbf{RGX'} = \mathbf{X'GN} \quad , \tag{3.82}$$

onde $\mathbf{X}$, $\mathbf{G}$ e $\mathbf{N}$ são dados respectivamente pelas equações (3.47), (3.49) e (3.51). Comparando as equações acima obtemos

$$\mathbf{X'} = \mathbf{GX} \qquad \text{e} \qquad \mathbf{X} = \mathbf{GX'} \quad , \tag{3.83}$$

e a própria condição de normalização $\mathbf{X'^{\dagger}X} = \mathbf{X^{\dagger}GX} = \mathbf{G}$.

Para obtermos a evolução temporal dos parâmetros envolvidos na transformação (x e y), calculamos explicitamente a derivada temporal de $\mathbf{N}$ (3.50)

$$\dot{\mathbf{N}} = \frac{\mathbf{d}}{\mathbf{dt}}\mathbf{X^{\dagger}RX} \quad ,$$

$$\mathbf{X^{\dagger}\dot{R}X} = \dot{\mathbf{N}} - \dot{\mathbf{X}}^{\dagger}\mathbf{RX} - \mathbf{X^{\dagger}R}\dot{\mathbf{X}} \tag{3.84}$$

e com o auxilio de (3.81) e (3.82),

$$\mathbf{X^{\dagger}\dot{R}X} = \dot{\mathbf{N}} - \dot{\mathbf{X}}^{\dagger}\mathbf{GXGN} - \mathbf{NGX^{\dagger}G}\dot{\mathbf{X}} \quad . \tag{3.85}$$

Escrevendo explicitamente as matrizes na equação acima e comparando o lado esquerdo ao direito, elemento a elemento, chegamos à equação para as derivadas de x e y

$$i\frac{d}{dt} < \tilde{\eta}^{\dagger}\tilde{\eta}^{\dagger} >= i(\dot{x}y - x\dot{y})(1+2\nu) \quad , \tag{3.86}$$

que com o auxílio de (3.67), (3.68), (3.69) e (3.70) fica, em termos de Q, P e ν

$$i\frac{d}{dt} < \tilde{\eta}^{\dagger}\tilde{\eta}^{\dagger} >= \dot{P}Q - \dot{Q}P + i\frac{\dot{Q}}{Q}(1+2\nu) \quad . \tag{3.87}$$

A equação para a derivada temporal de $< \tilde{\eta}^{\dagger}\tilde{\eta} >$ está dada em (3.65)

Como mostraremos logo a seguir este procedimento nos levará a uma dinâmica hamiltoniana para todos os graus de liberdade do sistema obtidos da parametrização. A hamiltoniana efetiva definida como

$$\mathcal{H}_{ef} = Tr(HF_0) = \mathcal{H}(q,p,Q,P) \tag{3.88}$$

determinará a evolução "clássica" (formalmente clássica) através das equações de Hamilton

$$\dot{q} = \frac{\partial}{\partial p}\mathcal{H} \qquad ; \qquad \dot{p} = -\frac{\partial}{\partial q}\mathcal{H} \quad \text{e} \tag{3.89}$$

$$\dot{Q} = \frac{\partial}{\partial P}\mathcal{H} \qquad ; \qquad \dot{P} = -\frac{\partial}{\partial Q}\mathcal{H} \quad . \tag{3.90}$$

Entretanto, será preciso primeiro calcular a evolução temporal segundo o método variacional. É o que faremos no capítulo seguinte.

Capítulo 4

Aplicação ao Modelo de Lipkin

Neste capítulo, realizamos a aproximação gaussiana sobre o Modelo de Lipkin $SU(2)$, e mostramos que é possível escrevê-la como uma dinâmica semiclássica (dinâmica clássica mais correções quânticas). A aplicação é feita sobre uma realização bosônica do Modelo. Mostramos que as correções quânticas assim obtidas podem ser escritas em termos de uma expansão em $1/N$ e que o limite clássico está contido nesta aproximação (o limite $N \to \infty$ pode ser dela obtido). As variáveis de flutuação quântica Δq e Δp são introduzidas na dinâmica através de um novo par canônico no espaço de fase, espaço este que terá o seu número de graus de liberdade duplicado, e suas propriedades dinâmicas profundamente alteradas.

4.1 Uma Realização Bosônica

A formalismo descrito na segunda seção do capítulo anterior foi desenvolvido para sistemas bosônicos, entretando, o nosso objeto de estudo, o modelo de Lipkin $SU(2)$, tem sua dinâmica escrita em termos dos operadores de criação e aniquilação fermiônicos (2.1) (ou em função dos operadores de quasispin (2.5)). Por esta razão se faz necessário um mapeamento da dinâmica do modelo num espaço de bosons. Precisamos levar a álgebra dos operadores de quasispin J_z e $J_\pm = J_x \pm iJ_y$ (veja equação 2.4)

$$[J_z, J_\pm] = \pm J_\pm \quad , \quad [J_+, J_-] = 2S_z \quad ,$$

e o espaço de Hilbert $\{|J, M>\}$ (autovetores de J_z), num espaço bosônico dado pelo vácuo $b|0>^{boson}= 0$ e pelos operadores b e $b^\dagger$ tais que $[b, b^\dagger] = 1$ e $[b, b] = 0$.

Num mapeamento deste tipo é preciso em primeiro lugar que as regras algébricas para os cálculos (relações de comutação) sejam sempre preservadas. É preciso também que haja uma correspondência biunívoca entre os estados escritos nas bases diferentes $|J, M> \rightarrow |k>^{boson}$ (onde $|k>^{boson}= 1/\sqrt{k!}(b^\dagger)^k|0>^{boson}$). Uma maneira de se realizar este mapeamento é a representação de Schwinger [33] que leva os quasispins em um espaço formado por dois tipos de bosons

$$\begin{aligned} J_+ &\rightarrow (J_+)^{boson} = b^\dagger a \\ J_- &\rightarrow (J_-)^{boson} = a^\dagger b \\ J_z &\rightarrow (J_z)^{boson} = \frac{1}{2}(b^\dagger b - a^\dagger a) \quad . \end{aligned} \tag{4.1}$$

Substituindo as expressões acima nas relações de comutação do grupo $SU(2)$ obtemos imediatamente

$$[a, a^\dagger] = 1 \quad , \quad [b, b^\dagger] = 1 \quad , \tag{4.2}$$

$$[a, b] = 0 \quad , \quad [a, b^\dagger] = 0 \quad ,$$

$$[a^\dagger, a^\dagger] = 0 \quad \text{e} \quad [b^\dagger, b^\dagger] = 0 \quad .$$

Os operadores a e b atuam no espaço bidimensional

$$|k_a, k_b >^{boson} = \frac{(a^\dagger)^{k_a}(b^\dagger)^{k_b}}{\sqrt{k_a! k_b!}} |0>^{boson_a} \otimes |0>^{boson_b} \quad . \tag{4.3}$$

Os autovetores de J_z neste espaço são dados por

$$|J, M >= [(J-M)!(J+M)!]^{-\frac{1}{2}} (b^\dagger)^{(J+M)} (a^\dagger)^{(J-M)} |0, 0>^{boson} \quad . \tag{4.4}$$

Nesta representação o número total de partículas presentes no sistema é dado por $N = a^\dagger a + b^\dagger b = 2J$ e se verifica que N, também em termos dos bosons, é uma das constantes do movimento $[a^\dagger a + b^\dagger b, H] = 0$. O mapeamento descrito acima preserva as propriedades dinâmicas do modelo. O espectro de energias será o mesmo e as simetrias rotacionais da hamiltoniana são todas preservadas.

A hamiltoniana do modelo de Lipkin escrita nesta representação fica

$$H = \epsilon (J_z)^{boson} + \frac{V}{2} \{ [(J_+)^{boson}]^2 + [(J_-)^{boson}]^2 \} \quad , \tag{4.5}$$

ou ainda

$$H = \frac{1}{2} \epsilon (b^\dagger b - a^\dagger a) + \frac{V}{2} \{ b^\dagger b^\dagger a a + a^\dagger a^\dagger b b \} \quad , \tag{4.6}$$

que é uma forma mais adequada para a aplicação do formalismo da aproximação gaussiana.

4.2 Parametrização da Hamiltoniana $< H >$

Através da representação de Schwinger descrita na seção anterior escrevemos a hamiltoniana do modelo de Lipkin em termos de operadores bosônicos a e b que atuam sobre subespaços distintos. O espaço de Hilbert $\{|J, M>\}$, nesta representação tem a forma $|k_a> \otimes |k_b>$. Para obtermos a aproximação de campo médio gaussiana definimos a matriz densidade como

$$F_0 = F_{0\alpha} \otimes F_{0\beta} \tag{4.7}$$

$$F_{0\alpha} = \frac{1}{1+\nu_a}\left(\frac{\nu_a}{1+\nu_a}\right)^{\tilde{\alpha}^\dagger\tilde{\alpha}} \qquad F_{0\beta} = \frac{1}{1+\nu_b}\left(\frac{\nu_b}{1+\nu_b}\right)^{\tilde{\beta}^\dagger\tilde{\beta}} \tag{4.8}$$

onde $\nu_a =< \tilde{\alpha}^\dagger\tilde{\alpha} >$, $\nu_b =< \tilde{\beta}^\dagger\tilde{\beta} >$ (para qualquer operador O o til denota o deslocamento) $\tilde{O} = O - < O >$) e α e β são respectivamente os operadores de quasibosons obtidos pela transformação de Bogoliubov (3.46) de a e b

$$\alpha = x_a^* a + y_a^* a^\dagger \quad , \quad \beta = x_b^* b + y_b^* b^\dagger$$

$$\alpha^\dagger = x_a a^\dagger + y_a a \quad , \quad \beta^\dagger = x_b b^\dagger + y_b b \quad , \tag{4.9}$$

sempre preservando as relações de comutação bosônicas, e portanto tendo a relação $|x_i|^2 - |y_i|^2 = 1$, $i = a, b$ sempre satisfeita. Desta maneira o número de parâmetros variacionais aparece duplicado e teremos então um espaço de fase de oito dimensões $\{q_i, p_i, Q_i, P_i\}$ com $i = a, b$.

Invertendo a transformação de Bogoliubov dada acima, escrevemos

$$a^\dagger = x_a^*(\tilde{\alpha}^\dagger + < \alpha^\dagger >) - y_a(\tilde{\alpha} + < \alpha >)$$

$$b^\dagger = x_b^*(\tilde{\beta}^\dagger + <\beta^\dagger>) - y_b(\tilde{\beta} + <\beta>) \quad , \tag{4.10}$$

e substituindo na hamiltoniana (4.6) obtemos H em função dos operadores de Bogoliubov deslocados $\tilde{\alpha}$ e $\tilde{\beta}$, de seus bilineares $\tilde{\alpha}^\dagger\tilde{\alpha}^\dagger$, $\tilde{\alpha}\tilde{\alpha}$, $\tilde{\alpha}^\dagger\tilde{\alpha}$, $\tilde{\beta}^\dagger\tilde{\beta}^\dagger$, $\tilde{\beta}\tilde{\beta}$, $\tilde{\beta}^\dagger\tilde{\beta}$ e das médias $<\alpha>$ e $<\beta>$, o que nos leva a

$$H = \frac{1}{2}\epsilon(H_{0b} - H_{0a}) + \frac{V}{2}(H_{1a}H_{1b}^\dagger + H_{1b}H_{1a}^\dagger) \quad , \tag{4.11}$$

onde

$$H_{0a} = x_a^* x_a(\tilde{\alpha}^\dagger + <\alpha^\dagger>)(\tilde{\alpha} + <\alpha>) + y_a^* y_a(\tilde{\alpha} + <\alpha>)(\tilde{\alpha}^\dagger + <\alpha^\dagger>) +$$

$$-x_a^* y_a^*(\tilde{\alpha}^\dagger + <\alpha^\dagger>)^2 - x_a y_a(\tilde{\alpha} + <\alpha>)^2$$

$$H_{0b} = x_b^* x_b(\tilde{\beta}^\dagger + <\beta^\dagger>)(\tilde{\beta} + <\beta>) + y_b^* y_b(\tilde{\beta} + <\beta>)(\tilde{\beta}^\dagger + <\beta^\dagger>) +$$

$$-x_b^* y_b^*(\tilde{\beta}^\dagger + <\beta^\dagger>)^2 - x_b y_b(\tilde{\beta} + <\beta>)^2$$

$$H_{1a} = [x_a^*(\tilde{\alpha}^\dagger + <\alpha^\dagger>) - y_a(\tilde{\alpha} + <\alpha>)] *$$

$$*[x_a^*(\tilde{\alpha}^\dagger + <\alpha^\dagger>) - y_a(\tilde{\alpha} + <\alpha>)]$$

$$H_{1b} = [x_b^*(\tilde{\beta}^\dagger + <\beta^\dagger>) - y_b(\tilde{\beta} + <\beta>)] *$$

$$*[x_b^*(\tilde{\beta}^\dagger + <\beta^\dagger>) - y_b(\tilde{\beta} + <\beta>)]$$

as médias dos operadores de Bogoliubov não deslocados $<\beta>$, $<\alpha>$ e c.c., devem ser parametrizadas de maneira consistente com (3.45) e (4.9), e é através destas médias que se introduz a dependência nas variáveis (q_i, p_i),

$$< \alpha^{\dagger} >= \sqrt{\frac{1}{2}}[q_a(x_a + y_a) - ip_a(x_a - y_a)] \quad , \tag{4.12}$$

$$< \beta^{\dagger} >= \sqrt{\frac{1}{2}}[q_b(x_b + y_b) - ip_b(x_b - y_b)] \quad . \tag{4.13}$$

Levando as parametrizações acima na expressão (4.11) podemos calcular o traço de H com a matriz densidade F_0 dada pela equação (4.8) e expressá-lo apenas em termos de q_i, p_i, x_i, y_i e ν_i . Obtemos assim a hamiltoniana efetiva $< H >= Tr(HF_0) = \mathcal{H}_{ef}(q_i, p_i, x_i, y_i; \nu_i)$ (veja equação (3.20))

$$\mathcal{H}_{ef} = \frac{1}{2}\epsilon(< H_{0b} > - < H_{0a} >) + \frac{V}{2}(< H_{1a}H_{1b}^{\dagger} > + < H_{1b}H_{1a}^{\dagger} >) \quad , \tag{4.14}$$

onde as médias do lado direito da equação acima são dadas por

$$< H_{0a} >= x_a^* x_a \left\{\nu_a + \left[\frac{1}{2}q_a^2(x_a^* + y_a^*)(x_a + y_a) + \frac{1}{2}p_a^2(x_a^* - y_a^*)(x_a - y_a)\right]\right\} +$$

$$+y_a^* y_a \left\{(1 + \nu_a) + \left[\frac{1}{2}q_a^2(x_a^* + y_a^*)(x_a + y_a) + \frac{1}{2}p_a^2(x_a^* - y_a^*)(x_a - y_a)\right]\right\} +$$

$$-x_a^* y_a^* \left[\frac{1}{2}q_a^2(x_a + y_a)^2 - \frac{1}{2}p_a^2(x_a - y_a)^2 - iq_a p_a(x_a + y_a)(x_a - y_a)\right]$$

$$-x_a y_a \left[\frac{1}{2}q_a^2(x_a^* + y_a^*)^2 - \frac{1}{2}p_a^2(x_a^* - y_a^*)^2 + iq_a p_a(x_a^* + y_a^*)(x_a^* - y_a^*)\right] \quad ,$$

$$< H_{0b} >= x_b^* x_b \left\{\nu_b + \left[\frac{1}{2}q_b^2(x_b^* + y_b^*)(x_b + y_b) + \frac{1}{2}p_b^2(x_b^* - y_b^*)(x_b - y_b)\right]\right\} +$$

$$+y_b^* y_b \left\{(1 + \nu_b) + \left[\frac{1}{2}q_b^2(x_b^* + y_b^*)(x_b + y_b) + \frac{1}{2}p_b^2(x_b^* - y_b^*)(x_b - y_b)\right]\right\} +$$

$$-x_b^* y_b^* \left[\frac{1}{2}q_b^2(x_b+y_b)^2 - \frac{1}{2}p_b^2(x_b-y_b)^2 - iq_b p_b(x_b+y_b)(x_b-y_b)\right]$$

$$-x_b y_b \left[\frac{1}{2}q_b^2(x_b^*+y_b^*)^2 - \frac{1}{2}p_b^2(x_b^*-y_b^*)^2 + iq_b p_b(x_b^*+y_b^*)(x_b^*-y_b^*)\right] \quad ,$$

$$< H_{1a} H_{1b}^\dagger >=$$

$$= \left\{-x_a^* y_a(1+2\nu_a) + \left[x_a^*\sqrt{\frac{1}{2}}[q_a(x_a+y_a) - ip_a(x_a-y_a)] + \right.\right.$$

$$- \left.\left. y_a\sqrt{\frac{1}{2}}[q_a(x_a^*+y_a^*) + ip_a(x_a^*-y_a^*)]\right]^2\right\} *$$

$$* \left\{-x_b y_b^*(1+2\nu_b) + \left[x_b\sqrt{\frac{1}{2}}[q_b(x_b^*+y_b^*) + ip_b(x_b^*-y_b^*)] + \right.\right.$$

$$- \left.\left. y_b^*\sqrt{\frac{1}{2}}[q_b(x_b+y_b) - ip_b(x_b-y_b)]\right]^2\right\} \qquad \text{e}$$

$$< H_{1b} H_{1a}^\dagger >=$$

$$= \left\{-x_b^* y_b(1+2\nu_b) + \left[x_b^*\sqrt{\frac{1}{2}}[q_b(x_b+y_b) - ip_b(x_b-y_b)] + \right.\right.$$

$$- \left.\left. y_b\sqrt{\frac{1}{2}}[q_b(x_b^*+y_b^*) + ip_b(x_b^*-y_b^*)]\right]^2\right\} *$$

$$
\begin{aligned}
* \quad & \left\{ -x_a y_a^* (1+2\nu_a) + \left[x_a \sqrt{\frac{1}{2}} [q_a (x_a^* + y_a^*) + i p_a (x_a^* - y_a^*)] + \right. \right. \\
- \quad & \left. \left. y_a^* \sqrt{\frac{1}{2}} [q_a (x_a + y_a) - i p_a (x_a - y_a)] \right]^2 \right\} \quad .
\end{aligned}
$$

Nosso próximo passo será calcular as equações para a evolução temporal do parâmetros variacionais.

4.3 A Evolução Temporal dos Parâmetros Gaussianos

Como descrito na seção 3.3 (subseção 3), para o cálculo da evolução temporal no espaço de parâmetros o ponto de partida será a equação de Liouville quântica (3.77)

$$i\frac{d}{dt} < O >= TrF[O, H] \quad . \tag{4.15}$$

Trataremos separadamente o aspecto cinemático (lado esquerdo) e o dinâmico (lado direito). Já havíamos calculado o lado esquerdo em (3.80) e (3.86) que com os dois graus de liberdade a e b, ficam

$$i\frac{d}{dt} < \tilde{\alpha}^\dagger\tilde{\alpha}^\dagger >= i(\dot{x}_a y_a - x_a\dot{y}_a)(1+2\nu_a) = Tr[\tilde{\alpha}^\dagger\tilde{\alpha}^\dagger, H]F_0 \quad , \tag{4.16}$$

$$i\frac{d}{dt} < \tilde{\beta}^\dagger\tilde{\beta}^\dagger >= i(\dot{x}_b y_b - x_b\dot{y}_b)(1+2\nu_b) = Tr[\tilde{\beta}^\dagger\tilde{\beta}^\dagger, H]F_0 \quad , \tag{4.17}$$

$$i\frac{d}{dt} < \tilde{\alpha}^\dagger\tilde{\alpha} >= Tr[\tilde{\alpha}^\dagger\tilde{\alpha}, H]F_0 = 0 \quad \Rightarrow \quad \nu_a = 0 \quad , \tag{4.18}$$

$$i\frac{d}{dt} < \tilde{\beta}^\dagger\tilde{\beta} >= Tr[\tilde{\beta}^\dagger\tilde{\beta}, H]F_0 = 0 \quad \Rightarrow \quad \nu_b = 0 \quad , \tag{4.19}$$

para os operadores quadráticos, e

$$i\frac{d}{dt} < a >= \sqrt{\frac{1}{2}}(\dot{q}_a + i\dot{p}_a) = x_a Tr[\alpha, H]F_0 - y_a^* Tr[\alpha^\dagger, H]F_0 \quad , \tag{4.20}$$

$$i\frac{d}{dt} < b >= \sqrt{\frac{1}{2}}(\dot{q}_b + i\dot{p}_b) = x_b Tr[\beta, H]F_0 - y_b^* Tr[\beta^\dagger, H]F_0 \quad , \tag{4.21}$$

para os condensados.

Os traços necessários para o cálculo do lado direito das equações dinâmicas são dados por

$$TrF_0[\tilde{\alpha}^\dagger\tilde{\alpha}, H] = 0 \ , \tag{4.22}$$

$$TrF_0[\tilde{\beta}^\dagger\tilde{\beta}, H] = 0 \ , \tag{4.23}$$

$$TrF_0[\tilde{\alpha}^\dagger\tilde{\alpha}^\dagger, H] = -\epsilon x_a y_a(2\nu_a + 1) + \tag{4.24}$$

$$-Vx_a^2(2\nu_a+1)[x_b^{*2} < \beta^\dagger >^2 + y_b^2 < \beta >^2 - x_b^* y_b(2\nu_b + 2 < \beta^\dagger >< \beta > +1)] +$$

$$-Vy_a^2(2\nu_a+1)[x_b^2 < \beta >^2 + y_b^{*2} < \beta^\dagger >^2 - x_b y_b^*(2\nu_b + 2 < \beta^\dagger >< \beta > +1)] \ ,$$

$$TrF_0[\tilde{\alpha}\tilde{\alpha}, H] = -TrF_0[\tilde{\alpha}^\dagger\tilde{\alpha}^\dagger, H] \ , \tag{4.25}$$

$$TrF_0[\tilde{\beta}^\dagger\tilde{\beta}^\dagger, H] = -\epsilon x_b y_b(2\nu_b + 1) + \tag{4.26}$$

$$-Vx_b^2(2\nu_b+1)[x_a^{*2} < \alpha^\dagger >^2 + y_a^2 < \alpha >^2 - x_a^* y_a(2\nu_a + 2 < \alpha^\dagger >< \alpha > +1)] +$$

$$-Vy_b^2(2\nu_b+1)[x_a^2 < \alpha >^2 + y_a^{*2} < \alpha^\dagger >^2 - x_a y_a^*(2\nu_a + 2 < \alpha^\dagger >< \alpha > +1)] \ ,$$

$$TrF_0[\tilde{\beta}\tilde{\beta}, H] = -TrF_0[\tilde{\beta}^\dagger\tilde{\beta}^\dagger, H] \ , \tag{4.27}$$

$$TrF_0[\alpha^\dagger, H] = -\frac{1}{2}\epsilon[2x_a y_a < \alpha > -(x_a^* x_a + y_a^* y_a) < \alpha^\dagger >] + \tag{4.28}$$

$$-V(y_a^2 < \alpha > -y_a x_a^* < \alpha^\dagger >)*$$

$$*[x_b^2 < \beta >^2 + y_b^{*2} < \beta^\dagger >^2 - x_b y_b^* (2\nu_b + 2 < \beta^\dagger >< \beta > +1]$$

$$-V(x_a^2 < \alpha > -x_a y_a^* < \alpha^\dagger >)*$$

$$*[x_b^{*2} < \beta^\dagger >^2 + y_b^2 < \beta >^2 - x_b^* y_b (2\nu_b + 2 < \beta^\dagger >< \beta > +1)] \ ,$$

$$TrF_0[\alpha, H] = -TrF_0[\alpha^\dagger, H] \ , \tag{4.29}$$

$$TrF_0[\beta^\dagger, H] = -\frac{1}{2}\epsilon[2x_b y_b < \beta > -(x_b^* x_b + y_b^* y_b) < \alpha^\dagger >] + \tag{4.30}$$

$$-V(x_b^2 < \beta > -x_b y_b^* < \beta^\dagger >)*$$

$$*[x_a^{*2} < \alpha^\dagger >^2 + y_a^2 < \alpha >^2 - x_a^* y_a (2\nu_a + 2 < \alpha^\dagger >< \alpha > +1)]$$

$$-V(y_b^2 < \beta > -x_b^* y_b < \beta^\dagger >)*$$

$$*[x_a^2 < \alpha >^2 + y_a^{*2} < \alpha^\dagger >^2 - x_a y_a^* (2\nu_a + 2 < \alpha^\dagger >< \alpha > +1)] \ ,$$

e

$$TrF_0[\beta, H] = -TrF_0[\beta^\dagger, H] \ . \tag{4.31}$$

onde a parametrização das médias de α e β é dada pelas equações (4.12) e (4.13).

Na próxima seção definimos o limite clássico e mostramos o resultado da projeção destas equações dinâmicas num espaço de variáveis canônicamente conjugadas.

4.4 A Dinâmica Semiclássica do Modelo de Lipkin $SU(2)$

Para os sistemas que admitem uma expansão do tipo $1/N$ e envolvem a álgebra do grupo $SU(2)$, o limite clássico pode ser definido formalmente, escalando-se os geradores da álgebra J_x ,J_y e J_z [34]

$$[\mathcal{J}_i, \mathcal{J}_j] = \frac{i\hbar}{J}\epsilon_{ijk}\mathcal{J}_k \ , \tag{4.32}$$

onde $\mathcal{J}_i = J_i/J$ and $J = N/2$, e tomando-se o limite

$$\lim_{J\to\infty} \frac{J}{i\hbar}[\mathcal{J}_i, \mathcal{J}_j] = \epsilon_{ijk}\mathcal{J}_k \ . \tag{4.33}$$

para valores finitos do parâmetro de expansão J os autovalores dos operadores $\mathcal{J}_i$'s estão mapeados sobre o intervalo $[-1, 1]$. O espectro de energias se torna cada vez mais denso à medida que o parâmetro J cresce (denso no limite $J \to \infty$). Para a representação de Schwinger este procedimento implica, para os operadores bosônicos, em [35]

$$a^{(\dagger)} \to \frac{a^{(\dagger)}}{\sqrt{J}} \tag{4.34}$$

$$b^{(\dagger)} \to \frac{b^{(\dagger)}}{\sqrt{J}} \ , \tag{4.35}$$

o que nos leva a reescrever as variáveis que parametrizam as médias $< \alpha >$ e $< \beta >$ como

$$q_i' = q_i/\sqrt{J} \qquad \text{e} \qquad p_i' = p_i/\sqrt{J} \tag{4.36}$$

$(i = a, b)$. Com as médias acima devidamente escaladas, a projeção de toda dinâmica no espaço de fase $\{q'_i, p'_i, Q_i, P_i\}$ é feita simplesmente através das transformações de variáveis dadas por (3.67), (3.68), (3.69) e (3.70), que levam x_i, y_i e ν_i em Q_i, P_i e ν_i. Finalmente escrevemos

$$\mathcal{H}_{ef}(q'_i, p'_i, Q_i, P_i; \nu_i) = \mathcal{H}_{cl}(q'_i, p'_i) + \\ + \frac{1}{J}\mathcal{H}^{(1)}(q'_i, p'_i, Q_i, P_i; \nu_i) + \frac{1}{J^2}\mathcal{H}^{(2)}(Q_i, P_i; \nu_i) \quad , \tag{4.37}$$

onde

$$\mathcal{H}_{cl}(q'_i, p'_i) = \frac{1}{2}\epsilon\left\{\frac{1}{2}(q_b'^2 + p_b'^2) - \frac{1}{2}(q_a'^2 + p_a'^2)\right\} + \\ \chi\left\{\left[\frac{1}{2}(q_a'^2 - p_a'^2)\frac{1}{2}(q_b'^2 - p_b'^2)\right] + q'_b p'_b q'_a p'_a\right\} \quad , \tag{4.38}$$

$$\mathcal{H}^{(1)}(q'_i, p'_i, Q_i, P_i) = \tag{4.39}$$
$$= \frac{1}{2}\epsilon\left\{\frac{1}{2}(Q_b^2 + P_b^2) - \frac{1}{2}(Q_a^2 + P_a^2) + \frac{(1+2\nu_b)^2}{8Q_b^2} - \frac{(1+2\nu_a)^2}{8Q_a^2}\right\} + \\ -\chi\left\{\frac{1}{2}(q_b'^2 - p_b'^2)\left[\frac{(1+2\nu_a)^2}{8Q_a^2} - \frac{1}{2}(Q_a^2 - P_a^2)\right] + q'_b p'_b Q_a P_a\right\} + \\ -\chi\left\{\frac{1}{2}(q_a'^2 - p_a'^2)\left[\frac{(1+2\nu_b)^2}{8Q_b^2} - \frac{1}{2}(Q_b^2 - P_b^2)\right] + q'_a p'_a Q_b P_b\right\} \quad ,$$

$$\mathcal{H}^{(2)}(Q_i, P_i) = \chi(Q_b P_b Q_a P_a) + \tag{4.40}$$
$$+\chi\left\{\left[\frac{(1+2\nu_b)^2}{8Q_b^2} - \frac{1}{2}(Q_b^2 - P_b^2)\right]\left[\frac{(1+2\nu_a)^2}{8Q_a^2} - \frac{1}{2}(Q_a^2 - P_a^2)\right]\right\} \quad .$$

Nas equações acima χ é o parâmetro de interação escalado.

As mesmas transformações (3.67)-(3.70), usamos nas equações (4.16), (4.17), (4.20), (4.21) (lado esquerdo) e (4.24)-(4.31) (lado direito). Comparando suas partes reais e imaginárias isolamos as derivadas temporais de primeira ordem e assim

obtemos as equações do movimento (por uma questão de conveniência na notação omitiremos o sinal (') nas variáveis q_i e p_i).

$$\dot{q}_a = -\frac{\epsilon}{2}p_a + \chi[q_a(\frac{Q_bP_b}{J} + q_bp_b) - p_a\frac{1}{2}(q_b^2 - p_b^2)]+ \\ +\chi p_a[\frac{(1+2\nu_b)^2}{8JQ_b^2} - \frac{1}{2J}(Q_b^2 - P_b^2)] \ , \tag{4.41}$$

$$\dot{p}_a = \frac{\epsilon}{2}q_a - \chi[p_a(\frac{Q_bP_b}{J} + q_bp_b) + q_a\frac{1}{2}(q_b^2 - p_b^2)]+ \\ +\chi q_a[\frac{(1+2\nu_b)^2}{8JQ_b^2} - \frac{1}{2J}(Q_b^2 - P_b^2)] \ , \tag{4.42}$$

$$\dot{q}_b = \frac{\epsilon}{2}p_b + \chi[q_b(\frac{Q_aP_a}{J} + q_ap_a) - p_b\frac{1}{2}(q_a^2 - p_a^2)]+ \\ +\chi p_b[\frac{(1+2\nu_a)^2}{8JQ_a^2} - \frac{1}{2J}(Q_a^2 - P_a^2)] \ , \tag{4.43}$$

$$\dot{p}_b = -\frac{\epsilon}{2}q_b - \chi[p_b(\frac{Q_aP_a}{J} + q_ap_a) + q_b\frac{1}{2}(q_a^2 - p_a^2)]+ \\ +\chi q_b[\frac{(1+2\nu_a)^2}{8JQ_a^2} - \frac{1}{2J}(Q_a^2 - P_a^2)] \ , \tag{4.44}$$

$$\dot{Q}_a = -\frac{\epsilon}{2J}P_a + \chi\frac{P_a}{J^2}[\frac{(1+2\nu_b)^2}{8Q_b^2} - \frac{1}{2}(Q_b^2 - P_b^2)]+ \\ +\chi[\frac{Q_a}{J}(\frac{Q_bP_b}{J} + q_bp_b) - \frac{P_a}{J}\frac{1}{2}(q_b^2 - p_b^2)] \ , \tag{4.45}$$

$$\dot{P}_a = \frac{\epsilon}{2J}(Q_a - \frac{(1+2\nu_a)^2}{4Q_a^3})+ \\ +\chi\{\frac{1}{J^2}[\frac{(1+2\nu_a)^2}{4Q_a^3} + Q_a][\frac{(1+2\nu_b)^2}{8Q_b^2} - \frac{1}{2}(Q_b^2 - P_b^2)]+ \tag{4.46}$$

$$-\frac{1}{2J}(q_b^2-p_b^2)[\frac{(1+2\nu_a)^2}{4Q_a^3}+Q_a]-\frac{P_a}{J}(\frac{Q_bP_b}{J}+q_bp_b)\}\ ,$$

$$\dot{Q}_b=+\frac{\epsilon}{2J}P_b+\chi\frac{P_b}{J^2}[\frac{(1+2\nu_a)^2}{8Q_a^2}-\frac{1}{2}(Q_a^2-P_a^2)]+ \tag{4.47}$$
$$+\chi[\frac{Q_b}{J}(\frac{Q_aP_a}{J}+q_ap_a)-\frac{P_b}{J}\frac{1}{2}(q_a^2-p_a^2)] \qquad \text{e}$$

$$\dot{P}_b=\frac{\epsilon}{2J}(\frac{(1+2\nu_b)^2}{4Q_b^3}-Q_b)+ \tag{4.48}$$
$$+\chi\{\frac{1}{J^2}[\frac{(1+2\nu_b)^2}{4Q_b^3}+Q_b][\frac{(1+2\nu_a)^2}{8Q_a^2}-\frac{1}{2}(Q_a^2-P_a^2)]+$$
$$-\frac{1}{2J}(q_a^2-p_a^2)[\frac{(1+2\nu_b)^2}{4Q_b^3}+Q_b]-\frac{P_b}{J}(\frac{Q_aP_a}{J}+q_ap_a)\}\ .$$

Como já havíamos discutido na seção 2.1, os métodos variacionais como a aproximação gaussiana são, em geral, obtidos sem que se faça qualquer tipo de referência ao limite clássico do modelo em questão. Em relação a este ponto a expressão (4.37) contém um resultado importante, central para este trabalho. No caso do modelo de Lipkin, aqui como representante dos modelos $1/N$, a dinâmica dos parâmetros variacionais gaussianos (ou dinâmica efetiva) escrita num espaço de variáveis canônicas resulta na dinâmica clássica $\mathcal{H}_{cl}(q_i,p_i)$ (4.38) usualmente obtida com a representação de estados coerentes [36] (note que $\mathcal{H}_{cl}(q_i,p_i)$ depende apenas das médias). A esta dinâmica somam-se termos que dependem de potências de $1/N$, funções também das médias, mas acopladas às variáveis de flutuação (Q_i,P_i). A correção de primeira ordem é dada pelo termo $\mathcal{H}^{(1)}(q_i,p_i,Q_i,P_i)$. O termo $\mathcal{H}^{(2)}$, de segunda ordem em $1/N$, é função apenas das variáveis de flutuação e para o caso em que $(Q_i(t=0),P_i(t=0))$ são escolhidos de maneira a representar um pacote com incerteza mínima (veja eq. (3.75)) $\mathcal{H}^{(2)}$ em nada contribui para a dinâmica (em $t=0$), tanto para a expressão da energia total quanto para as equações do movimento. Neste caso o termo $\mathcal{H}^{(1)}$

também se anula na expressão para $\mathcal{H}_{ef}$ e pode-se escrever para esta condição inicial $\mathcal{H}_{cl}(q_i(0), p_i(0)) = \mathcal{H}_{ef}(q_i(0), p_i(0), Q_i(0), P_i(0))$. Entretanto, a contribuição do termo linear não é nula nas equações do movimento e nos assegura, apenas, que uma vez escolhida a condição de incerteza mínima para $(Q_i(t=0), P(_it=0))$, e uma condição inicial qualquer para $(q_i(t=0), p_i(t=0))$, $\mathcal{H}_{cl}$ e $\mathcal{H}_{ef}$ terão o mesmo valor (mas é claro, não descreverão a mesma dinâmica).

Vale ainda notar que a barreira centrífuga através da qual se manifesta o Princípio de Incerteza (3.73) está presente também na hamiltoniana efetiva (4.37).

A canonicidade das variáveis que compõem o espaço de fase pode agora ser verificada de maneira simples. Definimos o parênteses de Poison

$$\{f(q_i,p_i,Q_i,P_i), g(q_i,p_i,Q_i,P_i)\}_{(q_i,p_i,Q_i,P_i)} = \tag{4.49}$$
$$= \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial q_i}\frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial g}{\partial q_i}\frac{\partial f}{\partial p_i} \right) + \sum_i \left(\frac{\partial f}{\partial Q_i}\frac{\partial g}{\partial P_i} - \frac{\partial g}{\partial Q_i}\frac{\partial f}{\partial P_i} \right) \quad ,$$

onde f e g são quaisquer funções diferenciáveis de q_i, p_i, Q_i e P_i. As equações do movimento (4.41)-(4.48) podem ser obtidas através de

$$\dot{q}_i = \{q_i, \mathcal{H}_{ef}\}_{(q_i,p_i,Q_i,P_i)} \quad , \tag{4.50}$$

$$\dot{p}_i = \{p_i, \mathcal{H}_{ef}\}_{(q_i,p_i,Q_i,P_i)} \quad , \tag{4.51}$$

$$\dot{Q}_i = \{Q_i, \mathcal{H}_{ef}\}_{(q_i,p_i,Q_i,P_i)} \quad , \tag{4.52}$$

$$\dot{P}_i = \{P_i, \mathcal{H}_{ef}\}_{(q_i,p_i,Q_i,P_i)} \quad . \tag{4.53}$$

Alternativamente, basta verificar que as equações do movimento (4.41)-(4.48) possuem a forma das equações de Hamilton

$$\dot{q}_i = \frac{\partial}{\partial p_i}\mathcal{H}_{ef} \quad , \tag{4.54}$$

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial}{\partial q_i}\mathcal{H}_{ef} \quad , \tag{4.55}$$

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial}{\partial P_i}\mathcal{H}_{ef} \quad , \tag{4.56}$$

$$\dot{P}_i = -\frac{\partial}{\partial Q_i}\mathcal{H}_{ef} \quad . \tag{4.57}$$

(nas equações do movimento, a ocupação ν_i entra como um parâmetro livre) Utilizamos o parênteses de Poisson (4.4) também para mostrar que a média do número de partículas

$$\mathcal{N} = Tr[(a^\dagger a + b^\dagger b)F]/J = \mathcal{N}_a + \mathcal{N}_b \quad ,$$

$$\mathcal{N}(q_i, p_i, Q_i, P_i) = \frac{1}{2}(q_b'^2 + p_b'^2) + \frac{1}{2}(q_a'^2 + p_a'^2) + \tag{4.58}$$

$$+\frac{1}{J}\left[\frac{(1+2\nu_b)^2}{8Q_b^2} + \frac{1}{2}(Q_b^2 + P_b^2)\right] + \frac{1}{J}\left[\frac{(1+2\nu_a)^2}{8Q_a^2} + \frac{1}{2}(Q_a^2 + P_a^2)\right] \quad ,$$

somente será uma constante do movimento no limite $J \to \infty$. De fato, algebricamente podemos verificar que

$$\frac{d}{dt}\mathcal{N} = \{\mathcal{H}_{ef}, \mathcal{N}\} = \frac{\chi(J-1)}{4J^2Q_a^2Q_b^2}\{p_a q_a Q_a^2 + p_b q_b Q_b^2 + \tag{4.59}$$

$$+4p_a q_a P_b^2 Q_a^2 Q_b^2 - 4p_b^2 P_a Q_a^3 Q_b^2 + 4p_b q_b P_a^2 Q_a^2 Q_b^2 - 4p_b q_b Q_a^4 Q_b^2 +$$

$$+4q_b^2 P_a Q_a^3 Q_b^2 - 4p_a^2 P_b Q_a^2 Q_b^3 + 4q_a^2 P_b Q_a^2 Q_b^3 - 4p_a q_a Q_a^2 Q_b^4\} \quad .$$

No limite clássico o parênteses de Poison escrito acima se anula e temos $\mathcal{N}$, além da própria energia, como uma constante do movimento. Este resultado nos será útil

para que no limite $J \to \infty$ possamos eliminar um dos graus de liberdade (a ou b) e escrever a dinâmica do modelo em apenas uma dimensão, como usualmente.

Há ainda um ponto bastante importante que precisa ser esclarecido. A aproximação gaussiana que estamos realizando aqui é feita com uma mistura estatística (F_0) e não simplesmente com um estado puro, entretanto para que possamos comparar este resultado com o limite clássico (obtido via estados coerentes) e mesmo com a solução exata do problema quântico definiremos a dinâmica semiclássica do modelo de Lipkin como o limite $\nu_i \to 0$ (limite este em que (F_0) é um estado puro) da dinâmica gaussiana efetiva $\mathcal{H}_{ef}$ (4.37)

$$\mathcal{H}_{sc} = \lim_{\nu_i \to 0} \mathcal{H}_{ef} \quad , \tag{4.60}$$

$$\mathcal{H}_{sc} = \lim_{\nu_i \to 0} \left(\mathcal{H}_{cl} + \frac{1}{J}\mathcal{H}^{(1)} + \frac{1}{J^2}\mathcal{H}^{(2)} \right) \quad . \tag{4.61}$$

4.5 Obtenção do Limite Clássico

Nesta seção mostramos que de fato a aproximação feita nas seções anteriores nos leva ao limite clássico correto quando $J \to \infty$. Utilizaremos a constante do movimento N para escrever a dinâmica do modelo em apenas uma dimensão. Para tanto faremos uso da transformação de variáveis cartesianas (q_i, p_i) para as polares e também canônicas (I_i, θ_i) $(i = a, b)$, previamente definidas nas equações (3.34) e (3.35),

$$q_i = \sqrt{2(J + I_i)} \sin \theta_i \quad , \tag{4.62}$$

$$p_i = \sqrt{2(J + I_i)} \cos \theta_i \quad . \tag{4.63}$$

A tranformação acima quando invertida nos dá

$$I_i = \frac{1}{2}(q_i^2 + p_i^2) - J \qquad \text{e} \tag{4.64}$$

$$\theta_i = \ln \sqrt{\frac{\xi_i}{\bar{\xi}_i}} \tag{4.65}$$

onde $\xi_i = \frac{1}{\sqrt{2}}(p + iq)$ e $\bar{\xi}_i = \frac{1}{\sqrt{2}}(p - iq)$.

Substituindo (4.62) e (4.63) na hamiltonia $\mathcal{H}_{cl}$ (4.38) (veja também a equação (4.37)),

$$\mathcal{H}_{cl} = \lim_{J \to \infty} \mathcal{H}_{ef}, \tag{4.66}$$

dada por

$$\mathcal{H}_{cl}(q_i,p_i) = \frac{1}{2}\epsilon\left\{\frac{1}{2}(q_b^2+p_b^2) - \frac{1}{2}(q_a^2+p_a^2)\right\} + \tag{4.67}$$
$$+\chi\left\{\left[\frac{1}{2}(q_a'^2 - p_a^2)\frac{1}{2}(q_b^2-p_b^2)\right] + q_b p_b q_a p_a\right\} \quad .$$

Obtemos

$$\mathcal{H}_{cl}(I_i,\theta_i) = \frac{1}{2}\epsilon[(I_b+J)-(I_a+J)]+$$

$$+\chi\{\frac{1}{2}\left[2(I_b+J)(\sin^2\theta_b - \cos^2\theta_b)\right]\frac{1}{2}\left[2(I_a+J)(\sin^2\theta_a-\cos^2\theta_a)\right]\}+$$

$$\chi\left[2(I_b+J)\sin\theta_b\cos\theta_b)\right]\left[2(I_a+J)\sin\theta_a\cos\theta_a)\right] \quad ,$$

que pode ser reescrita como

$$\mathcal{H}_{cl}(I_i,\theta_i) = \frac{1}{2}\epsilon(I_b-I_a) + \frac{\chi}{2}(I_b+J)(I_a+J)\cos[2(\theta_b-\theta_a)] \quad . \tag{4.68}$$

Para eliminarmos um dos graus de liberdade na expressão acima faremos uso na constante do movimento $\mathcal{N}$ (equação (4.58)) escrita no limite $J \to \infty$

$$\mathcal{N} = \frac{1}{2}(q_a^2+p_a^2) + \frac{1}{2}(q_b^2+p_b^2) \quad , \tag{4.69}$$

que com a ajuda da equação (4.64) fica

$$\mathcal{N} = I_b + J + I_a + J \quad . \tag{4.70}$$

Como neste limite temos $\dot{\mathcal{N}} = 0$ e sabemos que $\mathcal{N}/J = 2$, para que a equação acima seja satisfeita devemos escrever

$$I_a + I_b = 0 \quad . \tag{4.71}$$

Com este vínculo e em função das variáveis polares escaladas com J

$$\eta_i = \frac{I_i}{J} \quad , \tag{4.72}$$

obtemos finalmente a expressão para a hamiltoniana clássica (também escalada com J) em uma dimensão

$$\mathcal{H}_{cl} = \epsilon\,\eta + \frac{\chi}{2}(1-\eta^2)\cos 2\theta \quad , \tag{4.73}$$

onde usamos a coordenada relativa $\theta = \theta_b - \theta_a$. Os limites do espaço de fase são dados por

$$-1 \leq \eta \leq 1 \qquad \text{e} \qquad -\pi \leq \theta \leq \pi \quad . \tag{4.74}$$

Esta é a uma das formas usuais da hamiltoniana clássica do modelo de Lipkin SU(2), também obtida através da representação de estados coerentes [37] [36] descrita no capítulo anterior (veja equação (3.28)). Em [37], particularmente, se estuda a influência de temperaturas finitas sobre a dinâmica dada por

$$\mathcal{H}_{cl} = \frac{<\omega|H|\omega>}{<\omega|\omega>} \quad , \tag{4.75}$$

onde $|\omega>$ é parametrizado pelas equações (3.29) e (3.33).

Este resultado é equivalente ao obtido através do método de Hartree-Fock. Em [33], num exemplo didático, a energia de Hartree-Fock para o modelo de Lipkin é escrita como

$$\frac{E_{H-F}}{J} = -\epsilon\cos(2\alpha) - \frac{1}{2}\chi\sin^2(2\alpha)\cos(2\phi) \tag{4.76}$$

A equivalência entre as expressões (4.73) e (4.76) pode ser verificada através de uma transformação de variáveis não canônica simples. Fazemos

$$\eta = \cos 2\alpha \qquad \text{e} \qquad \theta = \phi \ . \tag{4.77}$$

As equações do movimento para esta dinâmica (4.73) são dadas por ($\epsilon = 1$)

$$\dot{\eta} = -\frac{\partial}{\partial\theta}\mathcal{H}_{cl} = \chi(1-\eta^2)\sin(2\theta) \quad , \tag{4.78}$$

$$\dot{\theta} = \frac{\partial}{\partial\eta}\mathcal{H}_{cl} = 1 - \chi\eta\cos(2\theta) \quad . \tag{4.79}$$

Impondo-lhes as condições de equilíbrio $\dot{\eta} = \dot{\theta} = 0$ encontramos os pontos fixos

$$PS\pm = (\eta_0, \theta_0) = (1, \pm\frac{1}{2}\arccos(\frac{1}{\chi}) \ , \tag{4.80}$$

$$Ps\pm = (\eta_0, \theta_0) = (-1, \pm\frac{1}{2}\arccos(\frac{1}{\chi}) \ , \tag{4.81}$$

$$PM = (\eta_0, \theta_0) = (\frac{1}{\chi}, \frac{n\pi}{2}) \quad \text{e} \tag{4.82}$$

$$Pm = (\eta_0, \theta_0) = (-\frac{1}{\chi}, \frac{n\pi}{2}) \quad , \tag{4.83}$$

onde n é um inteiro, cuja existência somete é permitida se $\chi > \chi_{crit} = 1$, ou seja, no regime rotacional. PM e Pm são, respectivamente, pontos de máximo e mínimo na energia, PS e Ps são os pontos fixos hiperbólicos das separatrizes do espaço de fase.

A análise do limite clássico será feita com detalhes no capítulo seguinte com o sistema escrito em termos de dois graus de liberdade nas variáveis cartesianas (q_i, p_i).

Ainda em termos das variáveis de ação e ângulo (η, θ), podemos estabelecer de maneira simples a conexão entre as órbitas clássicas e o espectro quântico para

N grande. Em se tratando de um sistema hamiltoniano com apenas um grau de liberdade, a quantização das órbitas periódicas pode sempre ser feita por uma regra de quantização do tipo Bohr-Sommerfeld ([36]). No nosso caso, teremos

$$S = 2J \int_{\eta_{min}}^{\eta_{max}} \theta(\eta) d\eta = 2\pi n \tag{4.84}$$

onde S é a ação das órbitas clássicas (a integração é feita sobre um período) , e n é o rótulo do estado quântico. A expressão para $\theta(\eta)$ pode ser obtida diretamente de (4.73)

$$\theta(\eta) = \pm \arccos \sqrt{\frac{2}{\chi}\left(\frac{\mathcal{H}_{cl} - \eta}{1 - \eta^2}\right)} \quad , \tag{4.85}$$

e os limites de integração podem ser obtidos em função de χ e $\mathcal{H}_{cl}$.

As soluções numéricas da integral acima, são apresentadas no gráfico da energia em função de $\mathcal{S} = S/2J$, $\mathcal{H}_{cl} \times \mathcal{S}/2\pi$ (figura 4.1). Comparando com o espectro quântico para o mesmo valor de χ, vemos que de fato esta é a curva para a qual este é levado no limite $N \to \infty$.

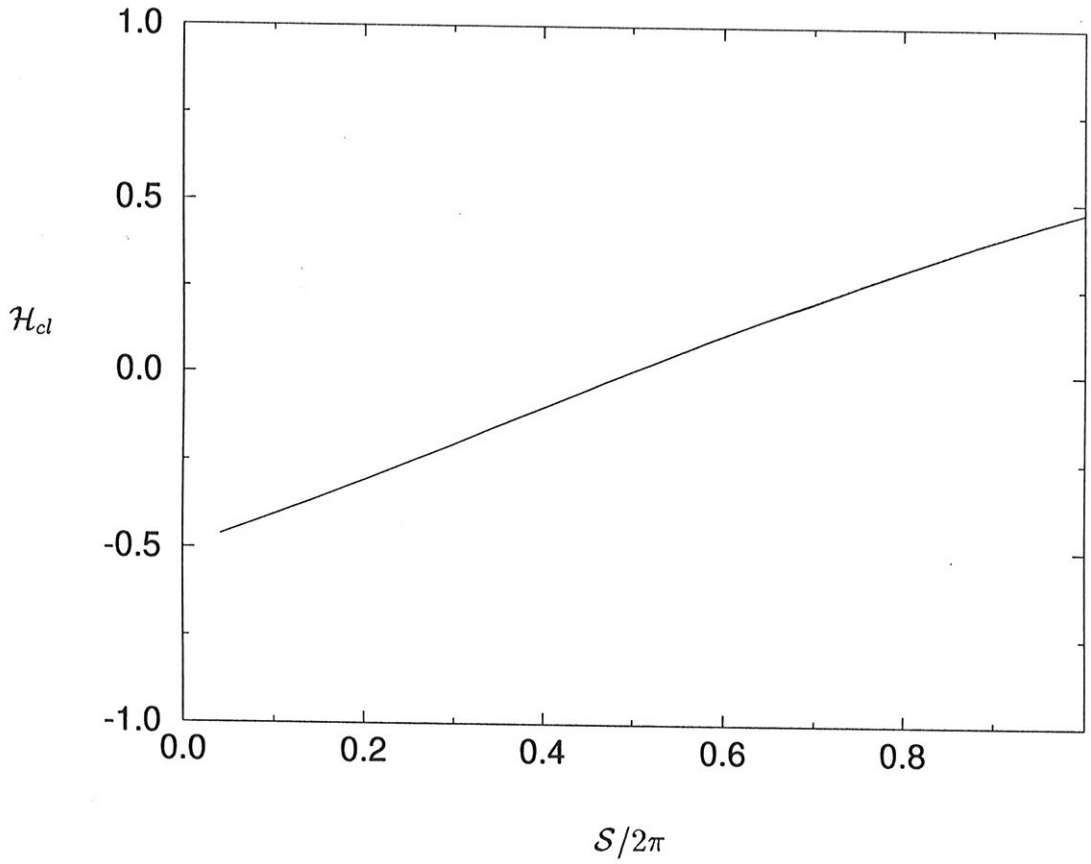

Figura 4.1: Energia versus ação (ambas devidamente escaladas) das trajetórias clássicas no espaço de fase (η, θ). O parâmetro de interação é $\chi = 0.5$

Capítulo 5

Resultados Numéricos

Neste capítulo nos dedicamos a estudar quais são, efetivamente, do ponto de vista qualitativo e quantitativo, as consequências da introdução das variáveis de flutuação acopladas às médias no espaço de fase construído variacionalmente. Mostramos que mesmo tendo o modelo de Lipkin uma dinâmica quântica exatamente solúvel e uma dinâmica clássica integrável as correções quânticas obtidas com os novos graus de liberdade nos levam à uma dinâmica caótica. Este é o comportamente denominado caos semiquântico descrito recentemente em [14], [15] e [16]. Mostramos que mesmo exibindo um comportamento caótico a aproximação semiclássica reproduz melhor os resultados para a evolução temporal do valor esperado dos operadores quânticos. Propomos um critério para quantificar tal propriedade e estimar a escala de tempo de validade de ambas as aproximações (clássica e semiclássica comparadas ao resultado exato). Verificamos que as duas escalas apresentam a mesma forma. Mostramos ainda que a destruição da estrutura geométrica dos toros invariantes permite que para uma dada condição inicial classicamente confinada por uma barreira de energia seja possível observar no espaço de fase a ocorrência de tunelamento quântico. É através do comportamento caótico que este efeito quântico se manifesta no espaço de fase. Caracterizamos o fenômeno em termos do parâmetro de expansão $1/J$ e da energia da trajetória semiclássica $\mathcal{H}_{sc}$, mostrando numericamente que as transições

através da barreira se tornam cada vez mais raras a medida que o limite clássico vai sendo atingido ($J \to \infty$) e não ocorrem neste limite.

5.1 A Representação Clássica

A análise da dinâmica clássica do modelo de Lipkin é mais simples quando feita com o sistema escrito em apenas uma dimensão (veja a referência [37]), entretanto, nosso objetivo aqui não é estudar o limite clássico do modelo, apenas, mas sim compará-lo com a solução semiclássica que inclui as variáveis de flutuação. Por esta razão escolhemos a forma dada pela equação (4.38). A análise que faremos aqui é completamente equivalente à apresentada na referência ([9]). Dada então a hamiltoniana clássica

$$\mathcal{H}_{cl}(q_i,p_i) = \frac{1}{2}\epsilon\left\{\frac{1}{2}(q_b^2+p_b^2) - \frac{1}{2}(q_a^2+p_a^2)\right\} + \tag{5.1}$$
$$+\chi\left\{\left[\frac{1}{2}(q_a^2-p_a^2)\frac{1}{2}(q_b^2-p_b^2)\right] + q_b p_b q_a p_a\right\} \quad ,$$

e suas equações do movimento

$$\dot{q}_a = -\frac{\epsilon}{2}p_a + \chi[q_a q_b p_b - \frac{1}{2}p_a(q_b^2-p_b^2)] \quad , \tag{5.2}$$

$$\dot{p}_a = \frac{\epsilon}{2}q_a - \chi[p_a q_b p_b + \frac{1}{2}q_a(q_b^2-p_b^2)] \quad , \tag{5.3}$$

$$\dot{q}_b = \frac{\epsilon}{2}p_b + \chi[q_b q_a p_a - \frac{1}{2}p_b(q_a^2-p_a^2)] \quad , \tag{5.4}$$

$$\dot{p}_b = -\frac{\epsilon}{2}q_b - \chi[p_b q_a p_a + q_b\frac{1}{2}(q_a^2-p_a^2)] \quad , \tag{5.5}$$

verificamos que além da conservação da energia, há ainda o vínculo em $\mathcal{N} =< N >$, $\dot{\mathcal{N}} = 0$, (veja equação (4.59)) que deve ser respeitado. Sem qualquer perda de

generalidade podemos fixar esta constante do movimento em $\mathcal{N} =< N > /J = 2$. Desta forma existirá no espaço de fase uma e apenas uma trajetória que satisfaça este vínculo e que tenha simultaneamente uma dada energia $\mathcal{H}_{cl}$. A existência destas duas constantes do movimento nos permitirá mostrar numa única seção de Poincaré as trajetórias para qualquer energia a que o sistema tenha acesso considerando-se um dado valor do parâmetro de interação χ. Usualmente as seções de Poincaré são utilizadas para o estudo de um fluxo no R^n, constituindo uma aplicação difeomórfica no R^{n-1}. O fato de termos outra constante do movimento (além da energia) é que confere às seções que exibiremos na análise clássica uma particularidade: a cada toro encontrado na seção , corresponde biunivocamente uma curva de nível do sistema escrito em uma dimensão.

Todas as seções de Poincaré que exibiremos na análise clássica foram construídas na superfície Σ $(q_b = 0)$ com o sentido das trajetórias dado por $p_b > 0$.
Nas figuras 5.1 e 5.2 mostramos duas seções para valores típicos do parâmetro de interação. Em 5.1 temos $\chi = -0.5 < \chi_{crit}$. Neste caso ($|\chi| < |\chi_{crit}|$) os toros invariantes são todos do mesmo tipo e classicamente representam o aspecto *vibracional* da interação. No limite $\chi \to 0$ os toros aparecem como círculos concêntricos na seção de Poincaré. Neste regime, bem como para qualquer $|\chi| < |\chi_{crit}|$, a energia do sistema clássico está restrita ao intervalo $|\mathcal{H}_{cl}| < 1.0$ independentemente do valor atribuído ao parâmetro de interação χ. Estas trajetórias clássicas estão em uma correspondência biunívoca com as energias do espectro quântico calculado no limite $N \to \infty$. Como mostramos no capítulo anterior (veja também a referência [38]) esta correspondência pode ser verificada numericamente através de uma regra de quantização do tipo Bohr-Sommerfeld. Na figura 5.1 a energia dos toros cresce da borda ($\mathcal{H}_{cl} = -1.0$) para o centro ($\mathcal{H}_{cl} = 1.0$) da seção de Poincaré (veja o espectro quântico calculado neste mesmo regime exibido na figura 2.1). Mais interessante é o

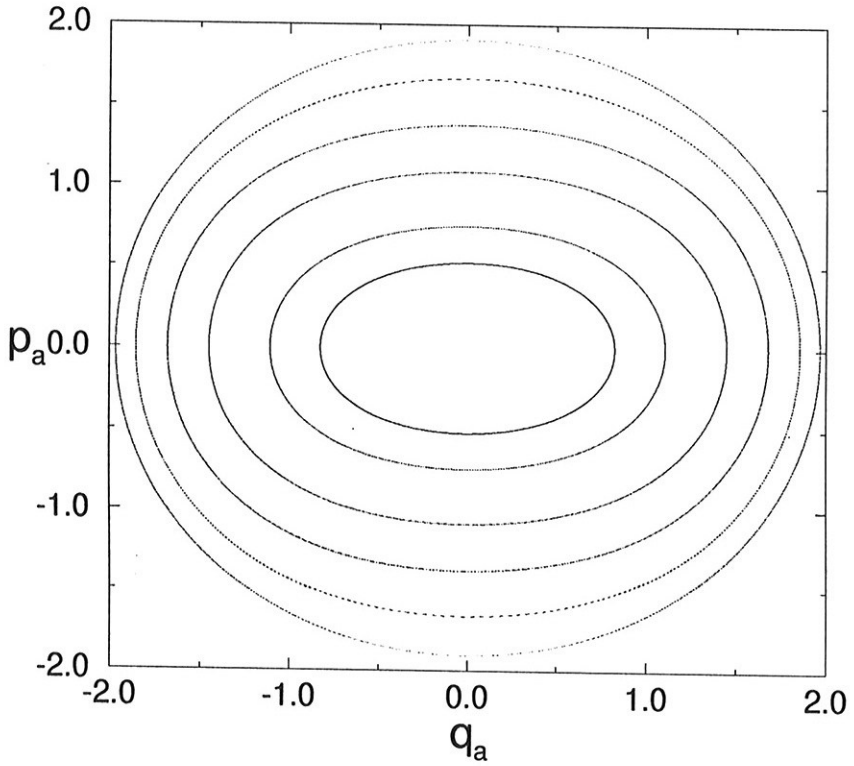

Figura 5.1: Seção de Poincaré do sistema clássico construída na superfície $q_b = 0$ com o sentido das trajetórias dado por $p_b > 0$ para $\chi = -0.5 < |\chi_{crit}|$. A energia dos toros apresentados cresce dos limites externos $\mathcal{H}_{cl} = -1.0$ para o centro $\mathcal{H}_{cl} = 1.0$

comportamento do sitema no regime $|\chi| > |\chi_{crit}|$, (veja figura 5.2) onde estão presentes ainda os toros chamados *vibracionais* ($|\mathcal{H}_{cl}| < 1.0$) mas há também a ocorrência de outro tipo de toros, os *rotacionais* (ou *deformados*). Neste regime o intervalo de energia acessível pelo sistema é dado por $|\mathcal{H}_{cl}| < (1 + \chi^2)/(2\chi)$ e, portanto, agora depende do valor dado ao parâmetro de interação . Na figura 5.2 a região da seção ocupada pelos toros *vibracionais* é rotulada por E_{vib}. E_{min} e E_{max} são, respectivamente, os rótulos das regiões onde estão as trajetórias com energias abaixo do regime *vibracional* $-(1+\chi^2)/(2\chi) < \mathcal{H}_{cl} < -1$, e acima dele $1 < \mathcal{H}_{cl} < (1+\chi^2)/(2\chi)$. Ainda na figura 5.2 estão representados os toros com energias no limite entre as re-

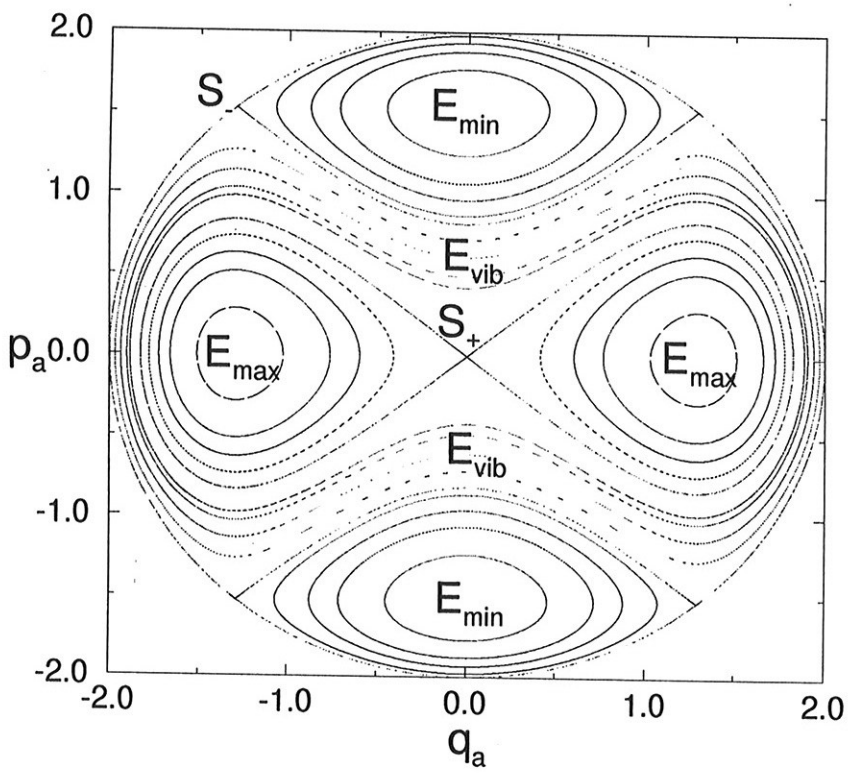

Figura 5.2: Seção de Poincaré do sistema clássico construída na superfície $q_b = 0$ com o sentido das trajetórias dado por $p_b > 0$ para $\chi = -6.0 > |\chi_{crit}|$. Os detalhes da figura estão descritos no texto

giões descritas acima. Trata-se das separatrizes S_+ ($\mathcal{H}_{cl} = 1$) e S_- ($\mathcal{H}_{cl} = -1$) que delimitam estas regiões na seção de Poincaré. S_-, particularmente, define o topo da barreira que separa as regiões de mínimo de energia. Mais uma vez, a associação com espectro quântico é clara. As duas regiões rotuladas por E_{min} (ou E_{max}) que são simétricas por uma reflexão no eixo $p_a = 0$ (ou $q_a = 0$) são o análogo clássico dos dubletos que o espectro exibe para $\chi > \chi_{crit}$ (veja a figura 2.2 e a discussão correspondente no texto).

Os pontos fixos do mapa de Poincaré que correspondem às trajetórias de mínima energia, $P^{min}(q_a^{min}, p_a^{min}, q_b^{min}, p_b^{min})$, e máxima energia,

$P^{max}(q_a^{max}, p_a^{max}, q_b^{max}, p_b^{max})$, são dados respectivamente por:

$$P^{max} = \left(0, \pm\sqrt{(1-\frac{1}{\chi})}, 0, \sqrt{(1+\frac{1}{\chi})}\right) \quad , \tag{5.6}$$

com

$$\mathcal{H}_{cl}^{max} = -\frac{1}{2}\left(\frac{1+\chi^2}{\chi}\right) \quad , \tag{5.7}$$

e

$$P^{min} = \left(\pm\sqrt{(1+\frac{1}{\chi})}, 0, 0, \sqrt{(1-\frac{1}{\chi})}\right) \quad , \tag{5.8}$$

com energia dada por

$$\mathcal{H}_{cl}^{min} = \frac{1}{2}\left(\frac{1+\chi^2}{\chi}\right) \quad . \tag{5.9}$$

Assim como os dubletos que observamos no espectro quântico, podemos ver imediatamente das expressões acima que estas trajetórias somente existirão para o caso $|\chi| > |\chi_{crit}|$.

Esta análise pode ser feita de maneira completamente equivalente através da repesentação de estados coerentes, entretanto, há uma diferença formal entre tal descrição e a que obtivemos tomando o limite $J \to \infty$ da dinâmica semiclássica $\mathcal{H}_{sc}$. Neste último caso a informação de que as larguras não evoluem no tempo está contida nas próprias equações do movimento. Temos

$$\lim_{J\to\infty} \dot{Q}_a = \lim_{J\to\infty} \dot{Q}_b = 0 \qquad \text{e} \tag{5.10}$$

$$\lim_{J\to\infty} \dot{P}_b = \lim_{J\to\infty} \dot{P}_b = 0 \quad . \tag{5.11}$$

5.2 Aspectos Gerais do Comportamento Semiclássico

Antes de estudarmos a dinâmica semiclássica propriamente dita vejamos como se divide ao longo do tempo, e em função do parâmetro de expansão, a energia total da hamiltoniana semiclássica entre os diferentes termos que a compõem. Para o caso em que as condições iniciais são escolhidas de maneira a minimizar a relação de incerteza, $Q_i(0) = \sqrt{\frac{1}{2}}$ e $P_i(0) = 0$ (veja equação (3.75)) podemos escrever

$$\mathcal{H}_{cl}(q_i(0), p_i(0)) = \mathcal{H}_{sc}(q_i(0), p_i(0), Q_i(0), P_i(0)) \quad . \tag{5.12}$$

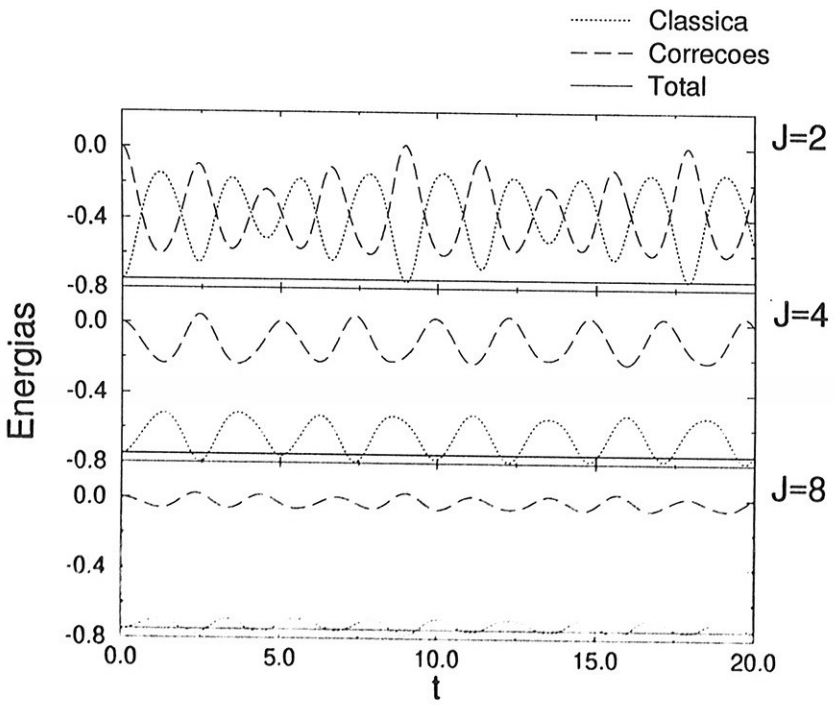

Figura 5.3: Evolução temporal de $\mathcal{H}_{cl}$ (Energia Clássica) e $\mathcal{H}^{(1)}$ (Correção) para a condição inicial de incerteza mínima $(Q_i(0), P_i(0)) = (\sqrt{\frac{1}{2}}, 0)$ considerando vários valores para o parâmetro de expansão J.

Na figura 5.3 temos a evolução temporal de $\mathcal{H}_{cl}$ graficada separamente da evolução da correção de primeira ordem $\mathcal{H}^{(1)}$. Para crescentes valores de J as oscilações em ambos os termos vão diminuindo na amplitude, com $\mathcal{H}^{(1)} \to 0$ e $\mathcal{H}_{cl} \to \mathcal{H}_{sc}$.

Para a evolução do produto de incertezas encontramos um resultado qualitativamente equivalente. Na figura 5.4 mostramos a evolução temporal para o produto $\Delta q \Delta p$ para $J = 2, 4, 8$. A condição inicial $(Q_i(0), P_i(0))$ é a de incerteza mínima.

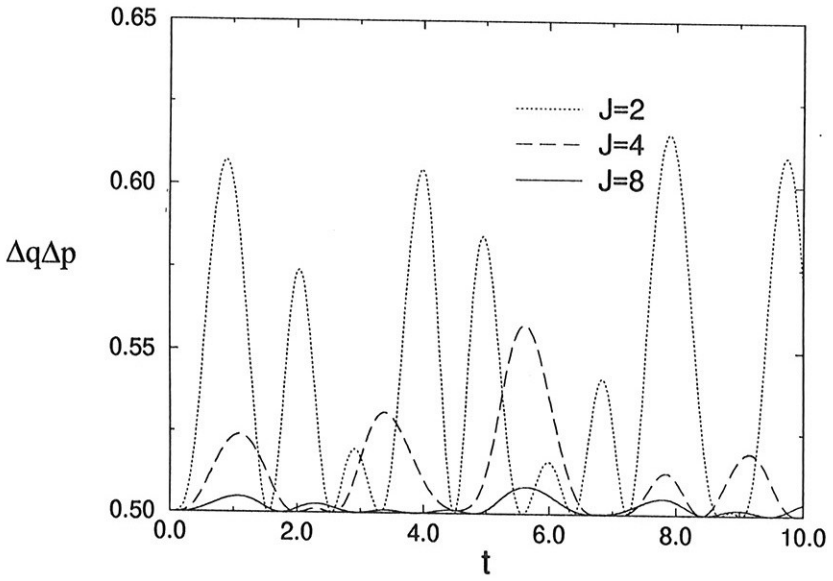

Figura 5.4: Evolução temporal do produto de incertezas $\Delta q_a \Delta p_a$ para diferentes valores do parâmetro de expansão J. A condição inicial para as variaças é a de mínima incerteza. A integração numérica das equações do movimento é feita com o parâmetro de interação $\chi = 6.0$

Vemos aqui também que a amplitude das oscilações diminui para valores de J crescentes, mas sempre o princípio de incerteza é respeitado. Para $J \to \infty$, $\Delta q \Delta p \to \frac{1}{2}$ (constante), ou seja, no limite clássico a evolução temporal para uma gaussiana com incerteza mínima é dada apenas pelas médias, ou seja, a evolução de um estado coerente neste limite é coerente (leva um estado coerente à outro). Resultado interessante obtemos também para uma condição inicial $(Q_i(0), P_i(0))$ tal que $\Delta q \Delta p > \frac{1}{2}$.

Na figura 5.5 mostramos a evolução temporal do produto de incertezas neste caso. Além de podermos verificar que a relação de incertezas também é satisfeita (e será para qualquer condição inicial), notamos que o comportamento para $J \to \infty$ é sensivelmente diferente do caso anterior.

Na figura 5.5(a) vemos que para valores crescentes de J o produto $\Delta q \Delta p$ não tende para o seu mínimo valor, mas sim para o seu valor inicial. Vemos também que esta tendência fica nítida apenas para valores de J maiores, nos mostrando que a condição de incerteza mínima é de fato a situação mais adequada para uma representação do limite clássico. Em 5.5(b), com uma escala de tempo vinte e cinco vezes ampliada vemos que há, para J grande, um comportamento oscilatório global que não é amortecido neste limite, mas o ciclo desta oscilação tem um comprimento cada vez maior a medida que cresce J. Sendo assim, na escala de tempo em que estas aproximações são válidas (este assunto será discutido em detalhes mais adiante), vemos apenas a tendência do produto permanecer constante no seu valor inicial.

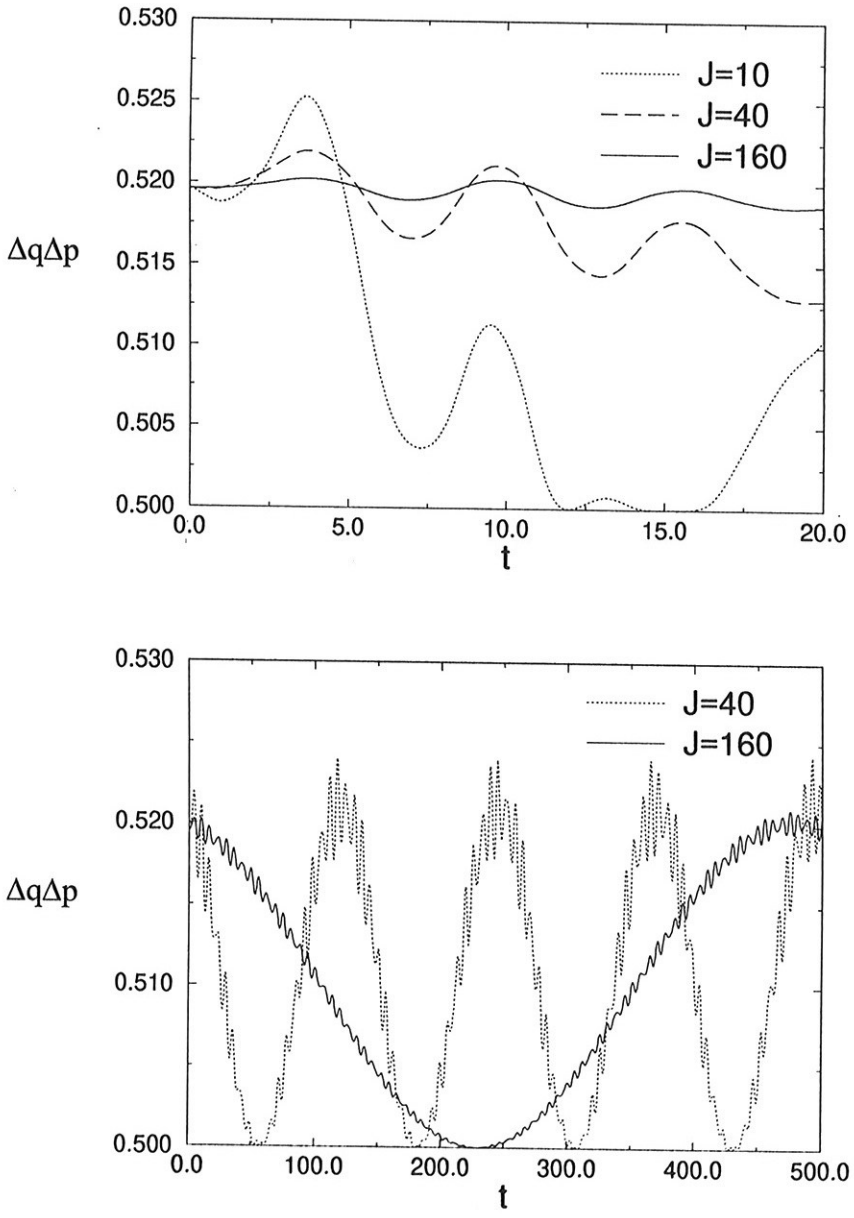

Figura 5.5: Evolução temporal do produto de incertezas $\Delta q_a \Delta p_a$ para diferentes valores do parâmetro de expansão J. A condição inicial para as variáveis de flutuação $(Q_i(0), P_i(0))$ está fora da condição de incerteza mínima, temos $\Delta q_a \Delta p_a > \frac{1}{2}$. Em (a) e (b) temos $\chi = -6.0$. A evolução temporal na última figura é feita em uma escala de tempo maior. As unidades de tempo são sempre arbitrárias

5.3 A Representação Semiclássica: Indução de Comportamento Caótico

Discutiremos nesta seção com uma abordagem qualitativa, apenas, o efeito primeiro da duplicação das dimensões do espaço de fase devido à inclusão das variáveis de flutuação quântica Q_i e P_i (veja equações (3.71) e (3.72)): ao considerarmos a dinâmica semiclássica dada pela hamiltoniana (4.37) com as equações do movimento (4.41)-(4.48) (lembrando sempre que fizemos $\nu_i = 0$), a estrutura dos toros invariantes encontrada nas seções de Poincaré clássicas, características de sua integrabilidade, é destruída e o sistema dinâmico passa a exibir um comportamento caótico. Esta integrabilidade é recuperada à medida que o parâmetro de expansão J vai sendo levado ao infinito.

As seções de Poincaré que construímos aqui tem também uma particularidade. O fato de estarmos tratando de um sistema com oito dimensões e apenas uma constante do movimento (a média do número de partículas $\mathcal{N}$ não é conservada para valores de J finitos) nos impõe uma grande limitação na análise da dinâmica completa. O procedimento que adotamos foi escolher uma superfície Σ ($q_b = 0$), uma orientação ($p_b > 0$) e tomar para a seção no plano (q_a, p_a) os pontos que interceptam esta superfície sem que se tenha imposto qualquer restrição aos graus de liberdade (Q_i, P_i). Além do fato de que a dinâmica das variânças respeita intrinsecamente o princípio de incerteza, não temos na seção qualquer informação a respeito delas. Este procedimento nos é útil para efeito de comparação com a dinâmica clássica discutida na primeira seção deste capítulo.

Nas figuras 5.6, 5.7 e 5.8 mostramos o comportamento da dinâmica semiclássica através das seções de Poincaré construídas para $J = 2$, $J = 8$ e $J = 12$.

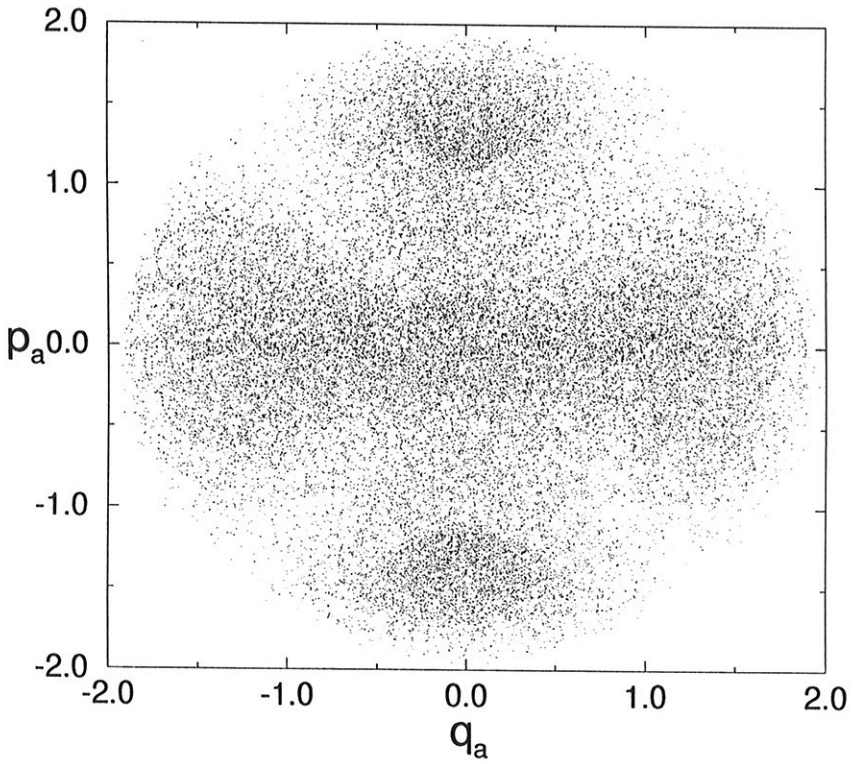

Figura 5.6: Seção de Poincaré sobre o plano (q_a, p_a) construída na superfície $q_b = 0$ com $p_b > 0$ para a evolução semiclássica ($\chi = -6.0 > \chi_{crit}$). As condições iniciais para as variáveis Q_i e P_i são as de incerteza mínima. Para as médias $(q_i(0), p_i(0))$ as condições iniciais são as mesmas escolhidas para a seção de Poincaré clássica construída para o mesmo valor de χ (figura 5.2). Para o inverso do parâmetro de expansão temos $J = 2$.

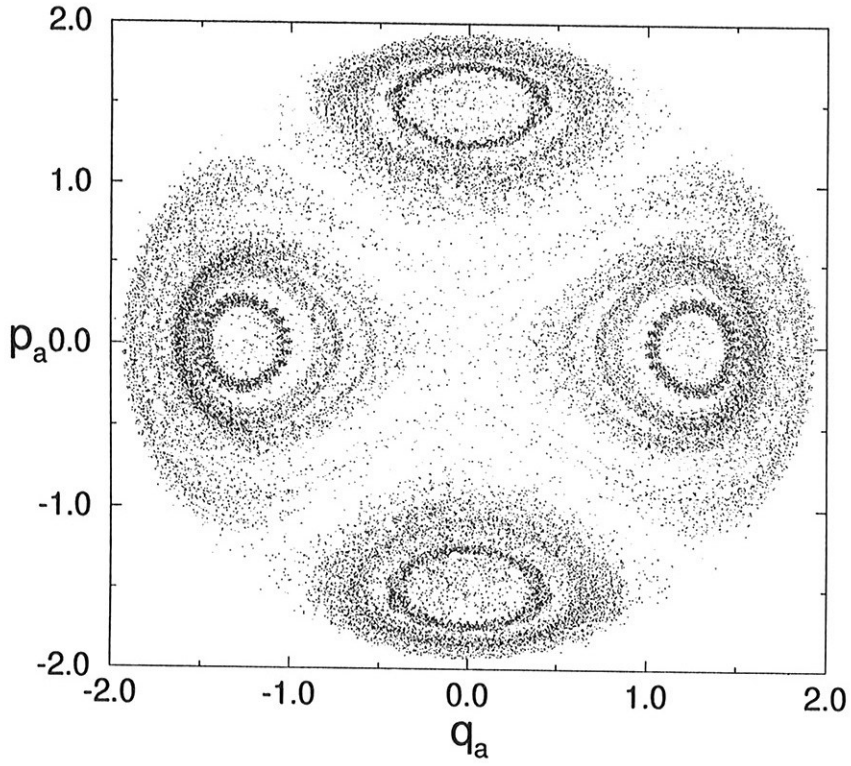

Figura 5.7: Idem a figura 5.6, com J=8.

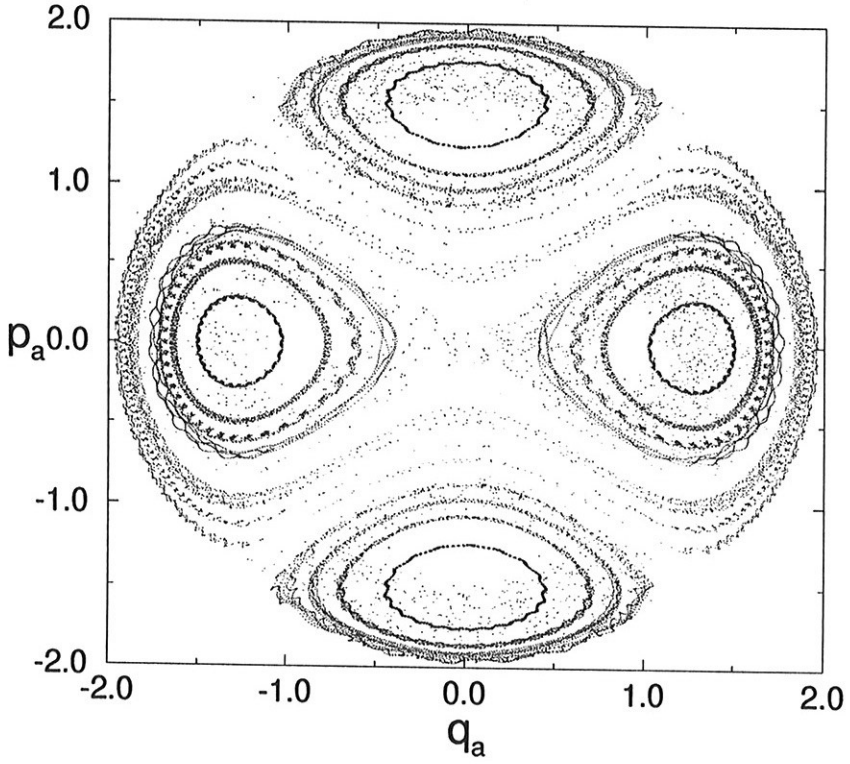

Figura 5.8: Idem a figura 5.6, com J=12.

As condições iniciais para as variáveis relacionadas às variança são escolhidas na condição de mínima incerteza. Para as médias $(q_i(0), p_i(0))$ temos as mesmas condições iniciais escolhidas na figura 5.2. Desta maneira á medida que o efeito dos graus de liberdade *quânticos* vai sendo levado à zero com o parâmetro de expansão J, o padrão da seção de Poincaré clássica para o mesmo valor de χ vai sendo recuperado. Este comportamento é qualitativamente o mesmo no caso $\chi = -0.5$

As correções semiclássicas introduzidas através dos novos graus de liberdade induzem o sistema a um comportamento caótico. Este comportamento é fruto unicamente da escolha que fizemos para a matriz densidade gaussiana F_0 quando realizamos a aproximação de campo médio. Ele é um artefato da aproximação. Mesmo se tratando de um sistema cujo limite clássico é regular veremos que a caoticidade encontrada na dinâmica semiclássica não é um comportamento espúrio mas sim o meio através do qual efeitos intrinsecamente quânticos, se manifestarão no espaço de fase.

O padrão de comportamento que observamos aqui já fora encontrado em outros sistemas como o oscilador harmônico quártico, com uma dinâmica efetiva (chamada também de semiquântica) obtida com base no teorema de Ehrenfest [16], e também variacionalmente em [39].

Para situações em que as condições iniciais para os graus de liberdade *quânticos* não é a de incerteza mínima o comportamento das seções de Poincaré projetadas no plano (q_a, p_a) é qualitativamente o mesmo. Entretanto o padrão clássico apresentado na figura 5.2, neste caso, somente se recupera para valores muito maiores de J. Nas figuras 5.9(a) e (b) temos as seções de Poincaré construídas com a evolução temporal semiclássica para uma única condição inicial para as médias (variáveis clássicas) $(q_i(0), p_i(0))$ (ambas com os mesmos valores para os parâmetros $J = 6$ e $\chi = -6.0$). Em (a) com a condição de incerteza mínima e em (b) fora dela. Neste último caso, a

área ocupada pelos pontos na seção é aumentada, mas irá para o mesmo limite que em (a) quando $J \to \infty$ (veja discussão relativa à figura 5.5). As regiões, nítidamente delimitadas, em que se encontram os pontos nas seções são aquelas às quais o sistema tem acesso, dados os valores de J, χ e energia.

Em relação às variânças Δq e Δp há uma propriedade que deve ser notada. Na figura 5.10 mostramos as seções de Poincaré construídas na superfície $q_a = 0$ (Σ), com $p_a > 0$ onde marcamos a cada passagem do sistema por (Σ) com o sentido correto, os valores de Δq e Δp. Tomando vários valores de energia dentro do intervalo permitido para $\chi = -6.0$, o resultado nos mostra que há regiões das seções para as quais as variânças têm valores inferiores a $\Delta q = \sqrt{\frac{1}{2}} = 0.7$ ou $\Delta p\sqrt{\frac{1}{2}} = 0.7$, caracterizando a evolução como a de um estado comprimido. Este resultado, obtido em outro contexto, pode ser encontrado também na referência [32].

Vemos na figura 5.10 que a área acessível pelo sistema nas seções varia com a energia, aumentando para energias próximas da separatriz (note que a separatriz somente está definida para o sistema clássico $\mathcal{H}_{cl}$, não existindo para valores de J finitos). Este comportamento também pode ser observado para as seções em que apresentamos as médias (q_a, p_a) (figura 5.8, particularmente) e reflete o fato de termos para estas variáveis, quando a energia $\mathcal{H}_{sc} = \mathcal{H}_{cl}(t = 0)$ é escolhida na região onde está no sistema clássico a separatriz (S_- ou S_+), um comportamento oscilatório $(Q_i(t) \times t, q_i(t) \times t$, etc...) com amplitude maior.

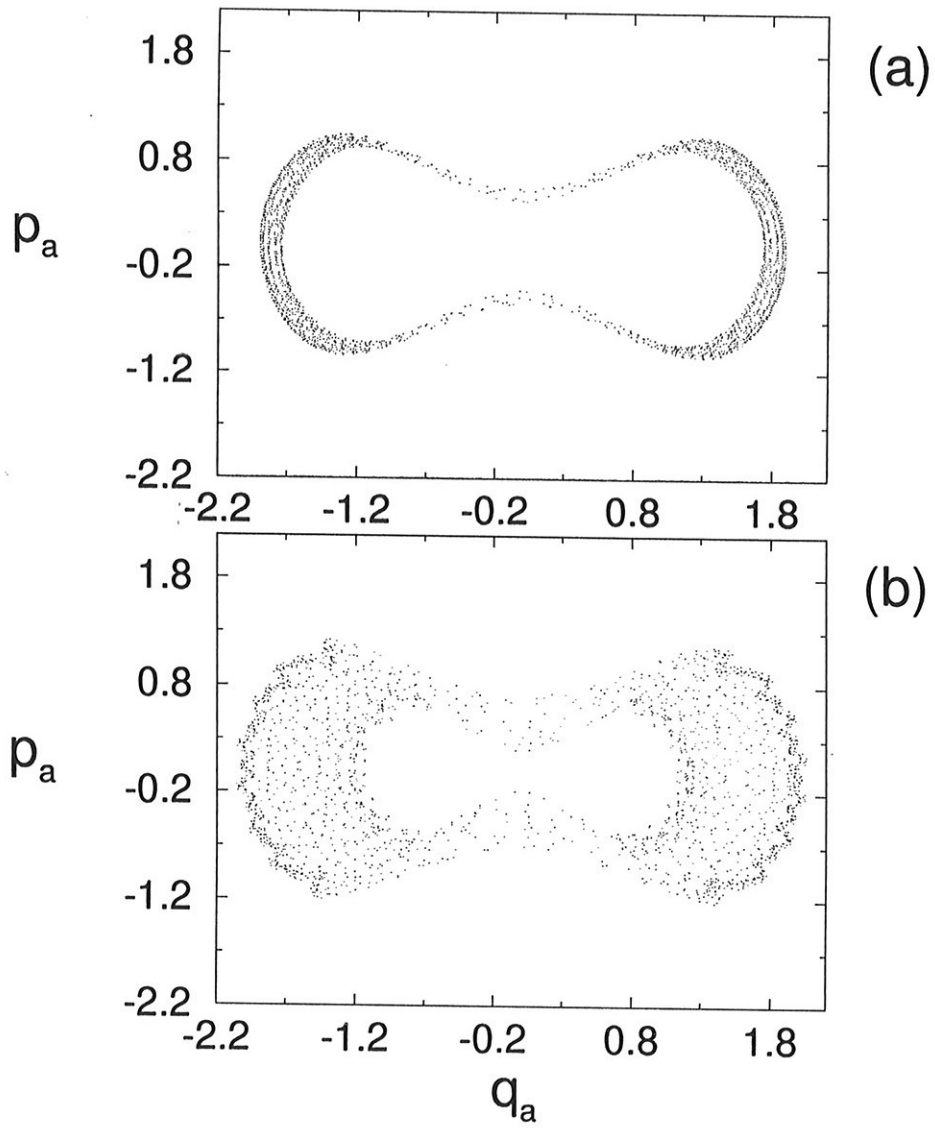

Figura 5.9: Seção se Poincaré para uma única condição inicial $(q_i(0), p_i(0), Q_i(0), P_i(0))$ ($\mathcal{H}_{cl}(t = 0) = 0.2$). Em (a) temos a condição de incerteza mínima $(Q_i(0), P_i(0)) = (\sqrt{\frac{1}{2}}, 0)$ e em (b) uma condição inicial que não a satisfaz $(Q_i(0), P_i(0)) = (\sqrt{\frac{1}{2}}, 0.8)$. Os valores dos parâmetros $J = 6$ e $\chi = -6.0$ são os mesmos nas duas figuras.

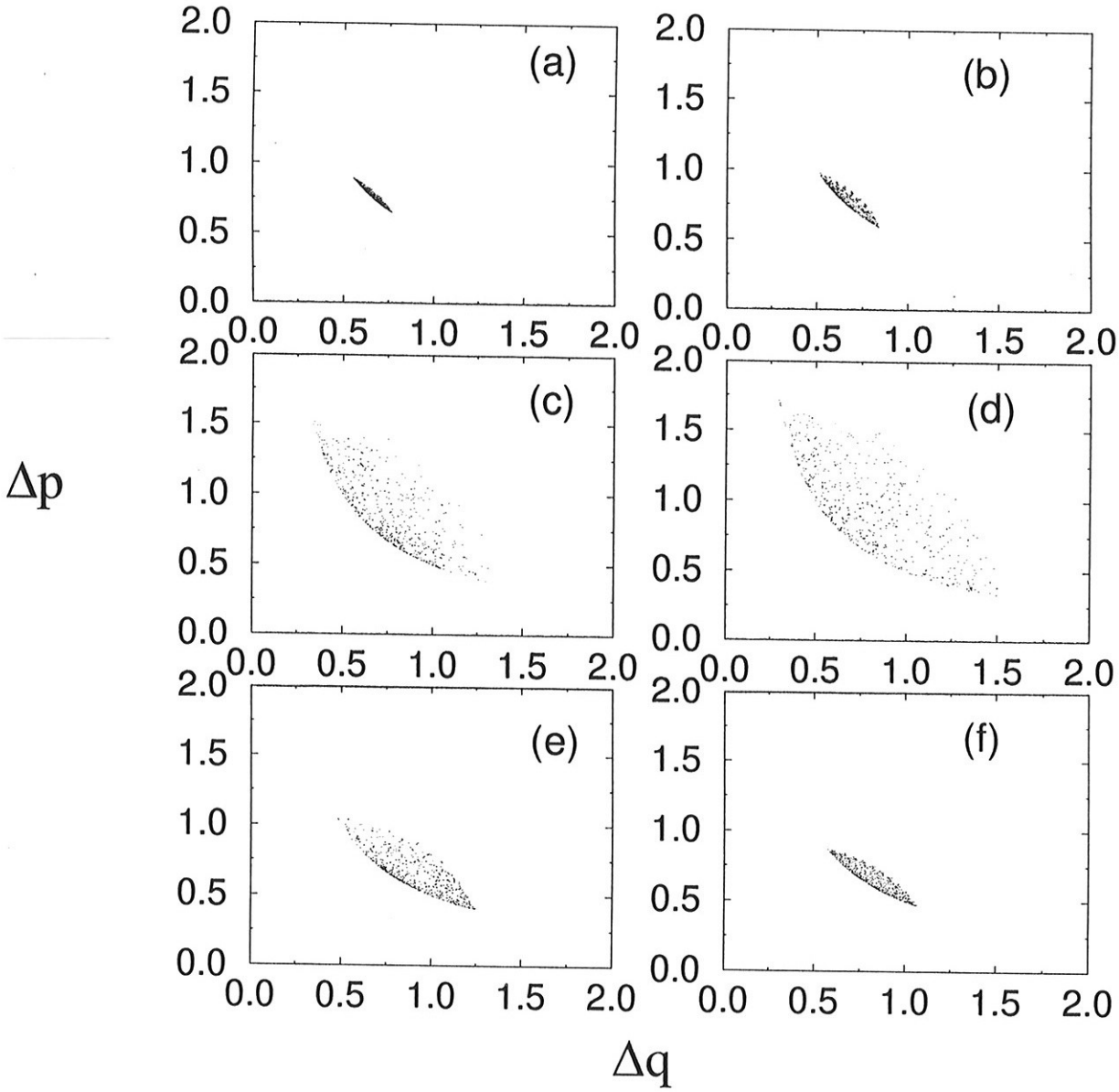

Figura 5.10: Seções se Poincaré para as variaças $\Delta q \times \Delta p$, construídas na superfície $q_a = 0$ com $p_a > 0$. As energias nas figuras são: (a)$\mathcal{H}_{cl}(t = 0) = -2.6$ (b)$\mathcal{H}_{cl}(t = 0) = -2.0$ (c)$\mathcal{H}_{cl}(t = 0) = -1.2$ (d)$\mathcal{H}_{cl}(t = 0) = -1.0$ (e)$\mathcal{H}_{cl}(t = 0) = 1.4$ (f)$\mathcal{H}_{cl}(t = 0) = 2.2$, com $\chi = -6.0$, $J = 6$. As condições iniciais para $(Q_i(0), P_i(0))$ são as de mínima incerteza.

5.4 Evolução Temporal de Valores Esperados: Tempo de Validade da Aproximação Semiclássica

Uma vez constatado que a dinâmica semiclássica do modelo de Lipkin exibe um comportamento caótico, e sabendo que este comportamento é alheio tanto à dinâmica clássica quanto à dinâmica quântica do modelo, uma questão importante surge naturalmente aqui. Mesmo tendo levado em conta as correlações de pares $< aa >, < bb >, < a^\dagger a^\dagger >, < b^\dagger b^\dagger >, < a^\dagger a >$ e $< b^\dagger b >$, além dos condensados $< a >$ e $< b >$ não há, em princípio, qualquer razão para que necessariamente a aproximação gaussiana (semiclássica) seja capaz de reproduzir os valores esperados dos operadores quânticos envolvidos na dinâmica dada por H (eq. (2.5)). É preciso saber se esta aproximação faz sentido quantitativamente. Para tanto comparamos a evolução temporal exata do operador J_z dada pela hamiltoniana quântica com as evoluções que obtemos das aproximações clássica e semiclássica.

Para a evolução temporal exata calculamos numericamente os autovalores e autovetores de H na base dos autovetores de J_z, $|J, M >$.

Temos a equação de autovalores

$$H|\phi_n >= E_n|\phi_n > \quad , \tag{5.13}$$

com

$$|\phi_n >= \sum_M < \phi_n|J, M > |J, M > \quad .$$

Para o estado inicial tomamos o estado coerente de Spin (veja equação (3.22))

$$|Z(t)>= e^{-iHt/\hbar}|Z(0)> \quad ; \quad |Z(0)>=\sum_{n,M}\alpha_n C_M^{(n)}|J,M> \quad , \tag{5.14}$$

onde

$$\alpha_n = \sum_{M'} < Z(0)|J,M' >< J,M'|\phi_n >$$

e

$$C_M^{(n)} =< \phi_n|J,M > \quad .$$

Assim, o valor esperado de J_z calculado exatamente será dado por

$$< J_z >_{ex}= \sum_{n,n',M,M'} \alpha^*_{n'}\alpha_n C^{*(n')}_{M'} C^{(n)}_M e^{-i(E_{n'}-E_n)t/\hbar}\hbar M\delta_{M,M'} \quad . \tag{5.15}$$

Implementando numericamente este cálculo podemos obter a evolução exata para vários valores de $J = N/2$ e do parâmetro de interação χ. Para a evolução da média de J_z segundo a aproximação clássica e semiclássica teremos simplemente

$$< J_z >_{cl}(t) = \frac{1}{2}\{\frac{1}{2}(q_b(t)^2 + p_b(t)^2) - \frac{1}{2}(q_a(t)^2 + p_a(t)^2)\} \tag{5.16}$$

e

$$\begin{aligned} < J_z >_{sc}(t) = {} & \frac{1}{2}\{\frac{1}{2}(q_b(t)^2 + p_b(t)^2) - \frac{1}{2}(q_a(t)^2 + p_a(t)^2)\}+ \\ & +\frac{1}{2J}\{\frac{1}{2}(Q_b(t)^2 + P_b(t)^2) - \frac{1}{2}(Q_a(t)^2 + P_a(t)^2) \\ & +\frac{(1+2\nu_b)^2}{8Q_b(t)^2} - \frac{(1+2\nu_a)^2}{8Q_a(t)^2}\} \quad . \end{aligned} \tag{5.17}$$

Por simplicidade, no cálculo dos valores esperados acima escolhemos uma condição inicial (a mesma para as três evoluções) com $< J_z > (0) = 0$. As condições iniciais serão as mesmas em todas as figuras apresentadas nesta seção.

Na figura 5.11 graficamos $< J_z >_{ex} (t)$, $< J_z >_{cl} (t)$ e $< J_z >_{sc} (t)$ em função do tempo. Podemos observar que qualitativamente o resultado obtido com a aproximação semiclássica está mais próximo do resultado exato que a evolução dada pela dinâmica clássica, uma vez que esta última apresenta somente oscilações harmônicas.

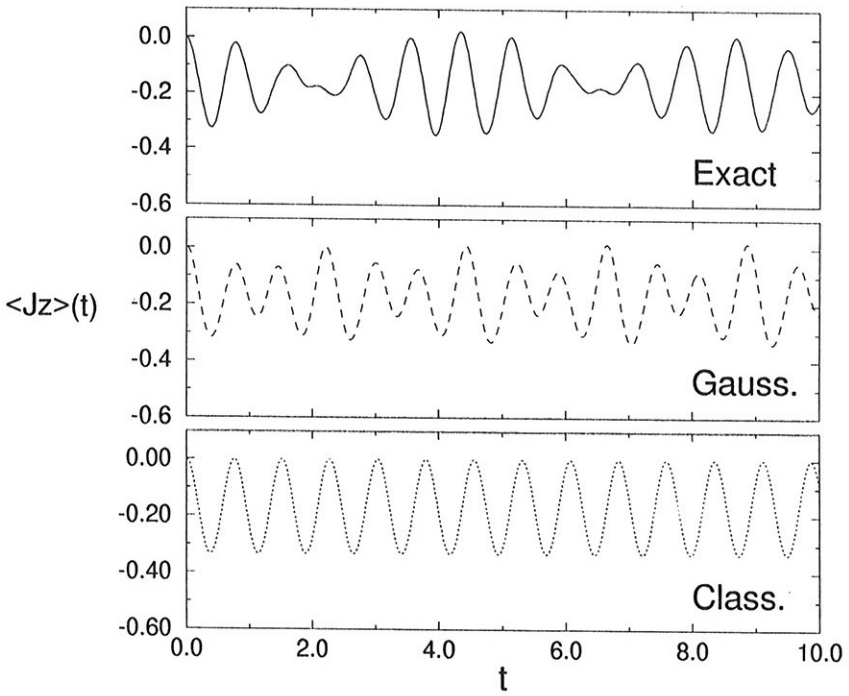

Figura 5.11: Evolução temporal da média do operador J_z com $\chi = -6.0$ segundo a dinâmica exata (linha sólida), a aproximação semiclássica (linha tracejada), ambas com $J = 4$ e a clássica (linha pontilhada). O tempo **t** é graficado em unidades arbitrárias.

Nas figuras 5.12(a) ($\chi = -0.5$) e 5.12(b) ($\chi = -6.0$) temos a evolução para as três soluções graficadas simutaneamente para diferentes valores de J. Vemos que a aproximação gaussiana produz um resultado melhor para tempos suficientemente curtos, embora a partir de um certo instante ($t = T_b$) tanto $< J_z >_{cl} (t)$ quanto $< J_z >_{sc} (t)$ passam a oscilar fora de fase e com amplitudes muito diferentes de $< J_z >_{ex} (t)$. Vemos também que a proximidade entre as soluções ao longo do

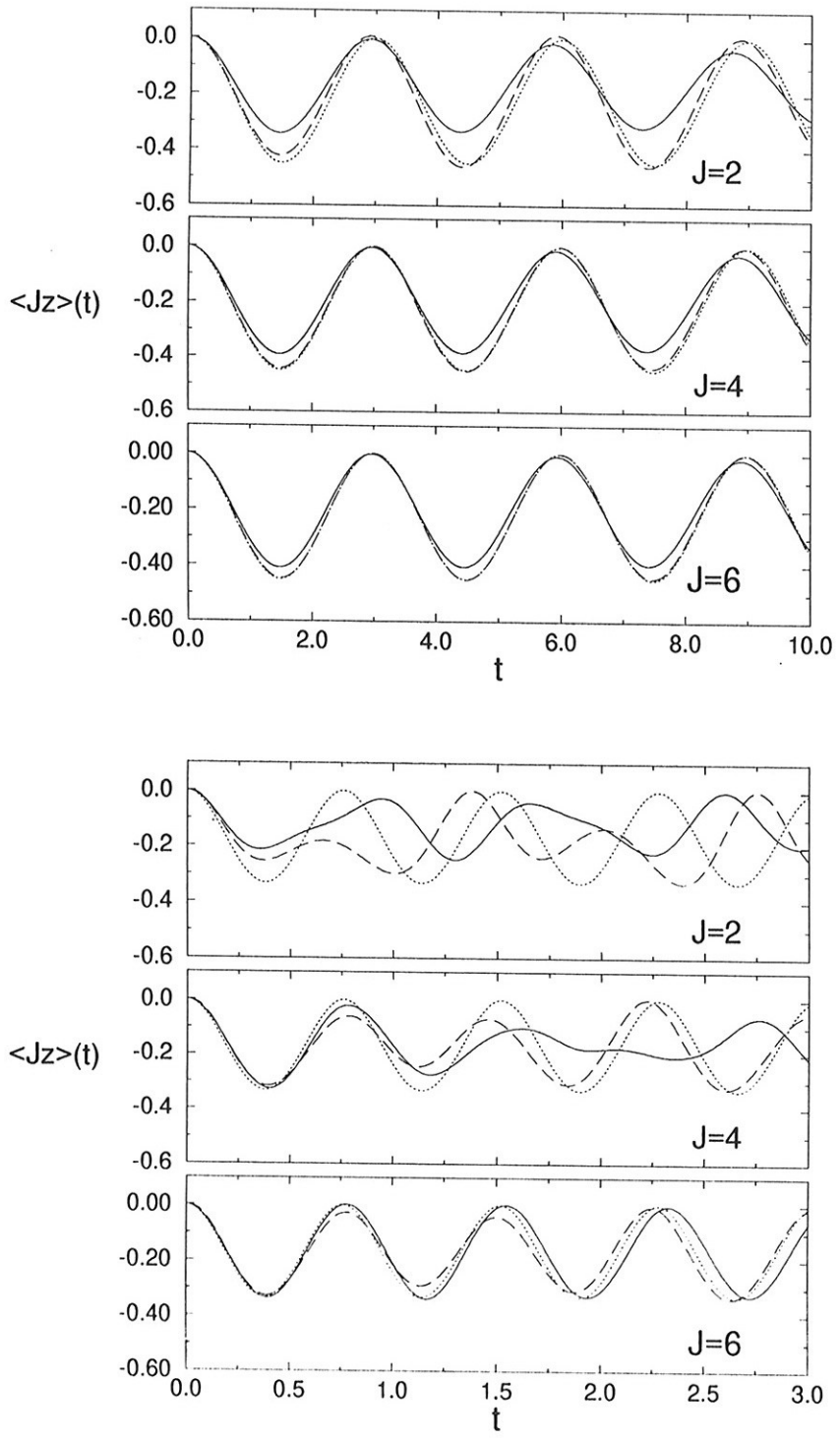

Figura 5.12: Evolução temporal da média do operador J_z segundo a dinâmica exata (linha sólida), a aproximação clássica (linha pontilhada) e a semiclássica (linha tracejada). Em (a) o cálculo é feito para $\chi = -0.5$ e em (b) com $\chi = -6.0$. O tempo **t** é graficado em unidades arbitrárias.

tempo depende fortemente do valor do parâmetro de expansão J, sendo sempre maior quanto também maior for o valor atribuído à este parâmetro. Particularmente, no limite $J \to \infty$ as três soluções coincidirão para qualquer instante t.

A questão importante a ser discutida aqui se refere ao tempo de validade das aproximações, já que qualquer aproximação semiclássica é válida por um intervalo de tempo sempre finito. Para darmos um significado mais preciso à expressão *tempos suficientemente curtos* que empregamos no parágrafo anterior, vamos definir um critério para que nos seja possível avaliar quantitativamente o erro entre as diferentes soluções. Uma vez que estamos tratando de um fenômeno oscilatório cuja evolução sistematicamente passa por valores próximos de zero ($< J_z > << 1$) o critério que se nos apresentou como o mais adequado está baseado na diferença entre as áreas das curvas que se quer comparar. Definimos

$$\Delta_{approx} = \frac{\int | < J_z >_{exact} (t) - < J_z >_{approx} (t)| dt}{\int | < J_z >_{exact} (t)| dt} \tag{5.18}$$

onde Δ_{approx} avalia o erro para a aproximação semiclássica ($\Delta_{approx} = \Delta_{sc}$ se $< J_z >_{approx} (t) =< J_z >_{sc}$) ou para a clássica ($\Delta_{approx} = \Delta_{cl}$ se $< J_z >_{approx} (t) = < J_z >_{cl}$), ambos em relação ao resultado exato.

Na figura 5.13 mostramos o resultado para o cálculo de Δ_{cl} e Δ_{sc} em função de $1/J$ calculados em diferentes intervalos de tempo: de $t = 0$ até $t = 10, 20, 30$. Concluímos imediatamente que a forma da escala de tempo de validade das aproximações é a mesma, linear com $1/J$, não importando o fato da aproximação semiclássica possuir um comportamento caótico. Vemos também que o erro para evolução temporal de $< J_z >$ segundo a aproximação gaussiana, num mesmo intervalo de tempo, é sempre menor. Note que as retas em função de $1/J$ apontam para a origem, nos indicando que $\Delta_{approx} \to 0$ quando $J \to \infty$.

Na figura 5.14 estimamos o tempo de validade T_b, estipulando de maneira arbi-

trária um valor máximo para Δ_{approx}, $\Delta^{max}_{approx} = 0.12$ (12 %). Uma vez atingido este valor a evolução temporal é interrompida. Vemos que a evolução semiclássica permanece próxima ao resultado exato, segundo este critério, sempre por um intervalo de tempo maior. Vemos que *sistematicamente* a aproximação semiclássica produz um resultado melhor que o limite clássico.

Vemos ainda na figura 5.12 que o valor atribuído ao parâmetro de interação também exerce forte influência sobre a qualidade (tempo de validade) das aproximações. Note que as escalas de tempo das evoluções de $< J_z >$ para $(\chi = -0.5)$ e $(\chi = -6.0)$ são bastante diferentes. Na tabela abaixo vemos que o ciclo de Poincaré T_b, ou seja, o intervalo de tempo (médio) que o sistema precisa para que saindo da seção de Poincaré retorne a ela depende basicamente de χ, apenas, quase não se alterando em função de J. O tempo T_p para os três casos foi calculado para uma mesma condição inicial no regime rotacional $|\mathcal{H}| < 1.0$, com uma média feita sobre dois mil pontos da seção.

J	χ	T_p
4	-6.0	2.1304
8	-6.0	2.1253
12	-6.0	2.1251
500	-6.0	2.1250
4	-3.0	4.5198
8	-3.0	4.4741
12	-3.0	4.4763
500	-3.0	4.4824
4	-0.5	12.1811
8	-0.5	12.2548
12	-0.5	12.2707
500	-0.5	12.2841

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ex. 1
SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO
2633
INSTITUTO DE FÍSICA

Comparando a tabela acima com os valores obtidos para o tempo de validade

para a aproximação semiclássica (figura 5.14 com $\chi = -0.5$) vemos que ambos têm a mesma ordem de grandeza. Para valores de J não muito grandes onde a dinâmica caótica é mais facilmente (qualitativamente) observada (figuras 5.6, 5.7 e 5.8), o tempo de validade da aproximação é da mesma ordem de grandeza do ciclo de Poincaré. Esta afirmação, mesmo estando baseada em critérios arbitrários (tanto do ponto de vista da própria escolha do critério que utilizamos para definir o erro quanto do valor do mesmo que julgamos "aceitável") nos leva à uma questão importante. O comportamento caótico observado na dinâmica $\mathcal{H}_{sc}$ (caos semiquântico) se estabelece para tempos muito longos ($t \to \infty$), para os quais a descrição semiclássica da evolução temporal dos valores esperados dos operadores quânticos não faz mais sentido. Em um trabalho recente [39] se estuda, também com base em uma solução variacional, o comportamento semiquântico de um oscilador harmônico quártico. A comparação entre as escalas de tempo para as evoluções temporais também neste caso leva ao mesmo resultado, entretanto, com base neste argumento os autores concluem que o caos semiquântico é um comportamento espúrio, ou seja, o fato de surgir numa escala de tempo em que a aproximação não faz sentido (pelo menos do ponto de vista da evolução temporal dos valores esperados) lhe confere a qualidade de comportamento anômalo, sem significado físico. Já vimos que o argumento encontrado em [39] tem significado também aqui, entretanto, as nossas conclusões serão bastante diferentes.

Mostraremos na seção seguinte que a aproximação gaussiana é capaz, globalmente, de representar no espaço de fase o tunelamento quântico.

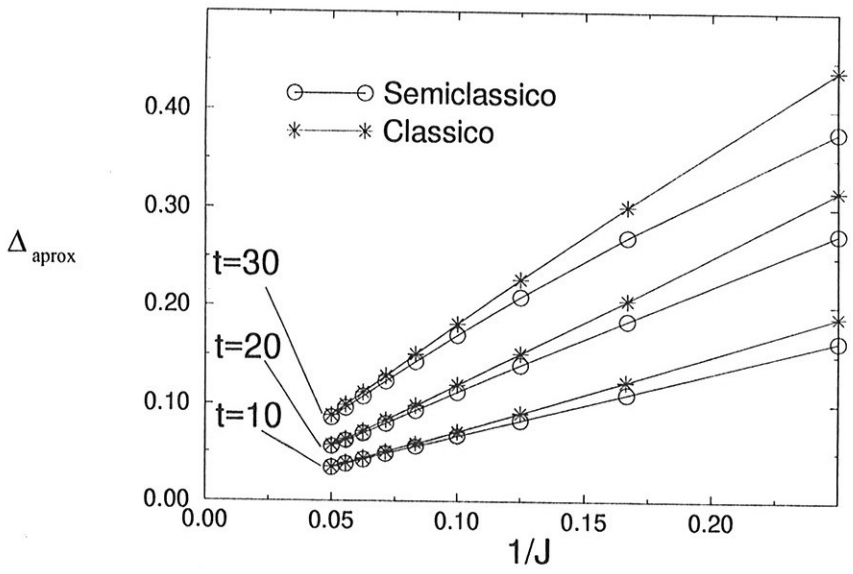

Figura 5.13: Erro Δ_{aprox} para a aproximação clássica e semiclássica calculado para três diferentes intervalos de tempo e graficado em função de $1/J$. O parâmetro de interação é dado por $\chi = -0.5$.

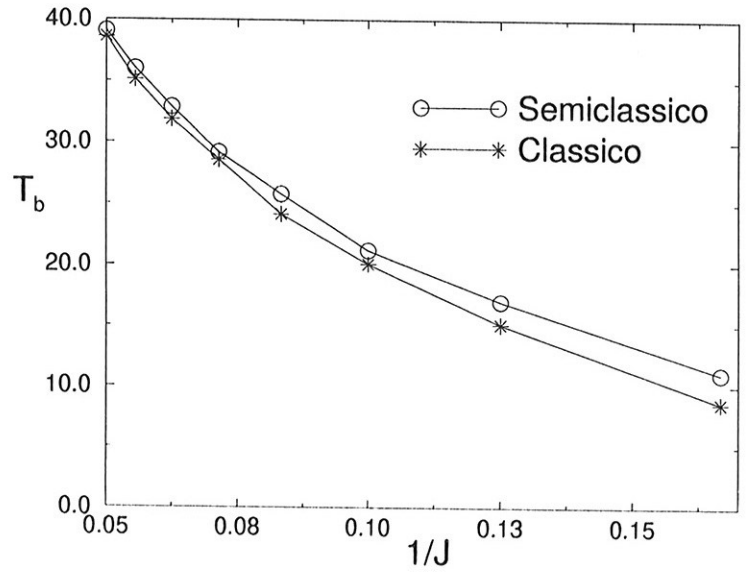

Figura 5.14: Tempo de validade das aproximações clássica e semiclássica calculado com o valor máximo do erro $\Delta_{aprox}^{max} = 0.12$ e graficado em função de $1/J$. O parâmetro de interação é $\chi = -0.5$.

5.5 Descrição Semiclássica do Tunelamento

Considere uma trajetória clássica com energia abaixo do regime rotacional. Na figura 5.2 tais trajetórias evoluem sobre os toros das regiões simétricas de mínimos de energia E_{min} ($\chi = -6.0$, $\mathcal{H}_{cl} < -1.0$) . Com a evolução temporal descrita pela hamiltoniana clássica $\mathcal{H}_{cl}$ (equação (4.38) o fenômeno de tunelamento é completamente proibido, mesmo geométricamente, já que qualquer condição inicial escolhida sobre um toro nesta região terá, sempre, sua evolução temporal confinada à este mesmo toro. Entretanto, com a inclusão dos novos graus de liberdade (Q_i, P_i), relacionados às flutuações quânticas, como correções à dinâmica clássica, emerge o comportamento caótico e a geometria dos toros invariantes não é mais observada. Iremos explorar aqui as consequências físicas deste comportamento.

Na figura 5.15 mostramos as seções de Poincaré para uma única condição inicial $(q_i(0), p_i(0))$ (e incerteza mínima), com energia ligeiramente abaixo da separatriz S_- ($\mathcal{H}_{cl}(S_-) = -1.0$), tal que sua evolução segundo $\mathcal{H}_{cl}$ está restrita ao semiplano $p_a > 0$. Considerando para a dinâmica semiclássica a condição inicial de incerteza mínima temos $\mathcal{H}_{cl} = \mathcal{H}_{sc}(0)$ e assim construímos as várias seções com diferentes valores do parâmetro J. O fato é que uma condição inicial que classicamente está confinada a um toro invariante, quando evoluída com as correções quânticas (dinâmica semiclássica) pode acessar a região de mínima energia localizada no semiplano oposto. Note que para $J = 12$ os pontos na seção aparecem apenas no mesmo semiplano em que fora escolhida a condição inicial. A razão para isso é que neste caso ao sistema não foi dado tempo suficiente para que uma primeira transição ocorresse. Para qualquer condição inicial escolhida com as mesmas considerações

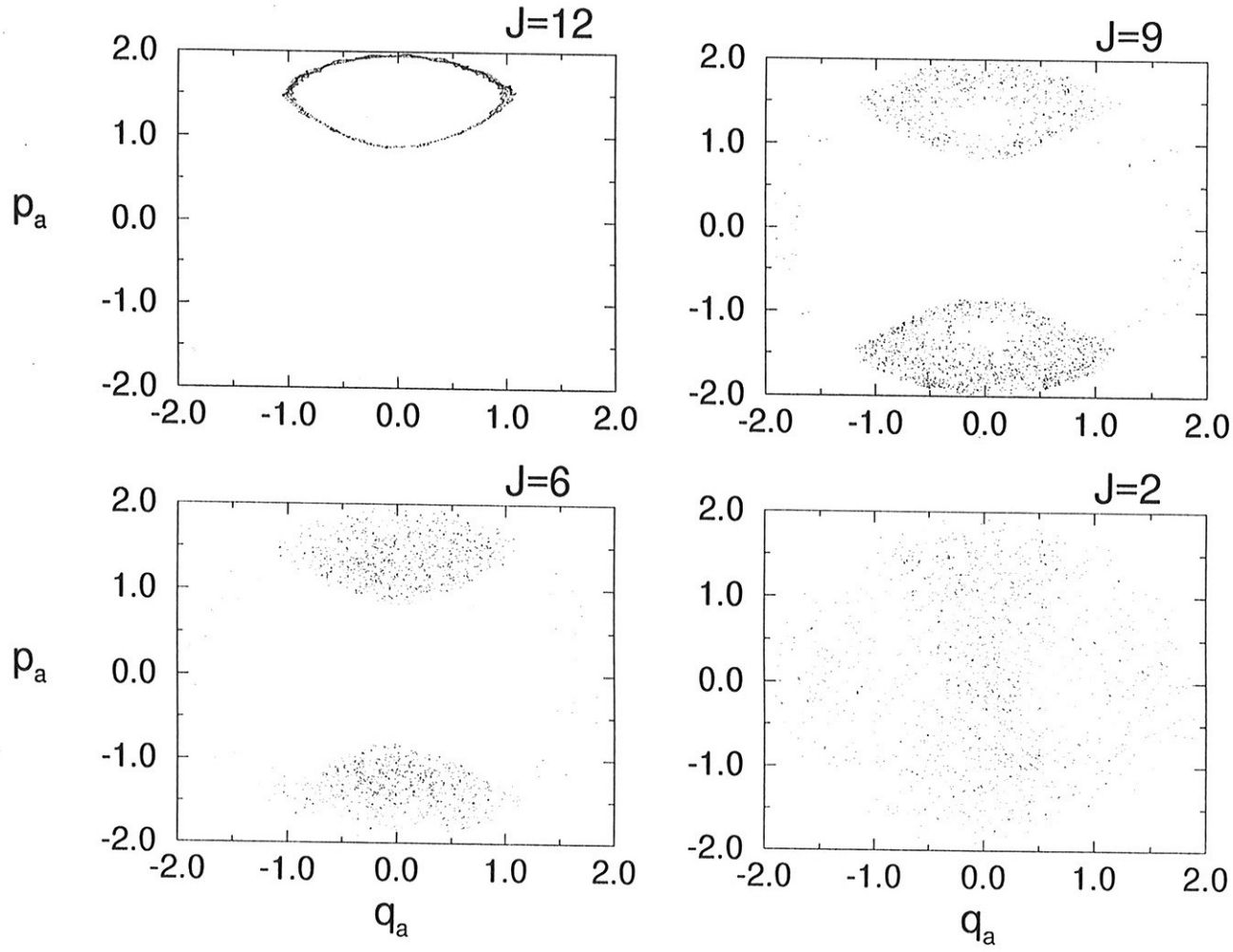

Figura 5.15: Seções de Poincaré construídas com uma única condição inicial $(q_i(0), p_i(0))$ (e incerteza mínima) com energia ligeiramente abaixo da separatriz $\mathcal{H}_{cl}(0) = \mathcal{H}_{sc} = -1.2$, $\chi = -6.0$.

($\mathcal{H}_{cl} = \mathcal{H}_{sc}(0) < -1.0$) tal transição ocorrerá para algum instantante t, sempre, se J for finito. Vejamos com um pouco mais de detalhe como ocorrem as trasições entre as duas regiões de mínimo de energia. Na figura 5.16, com J crescente, mapeamos o sinal de p_a, Sign(p_a) na seção de Poincaré, em função do tempo.

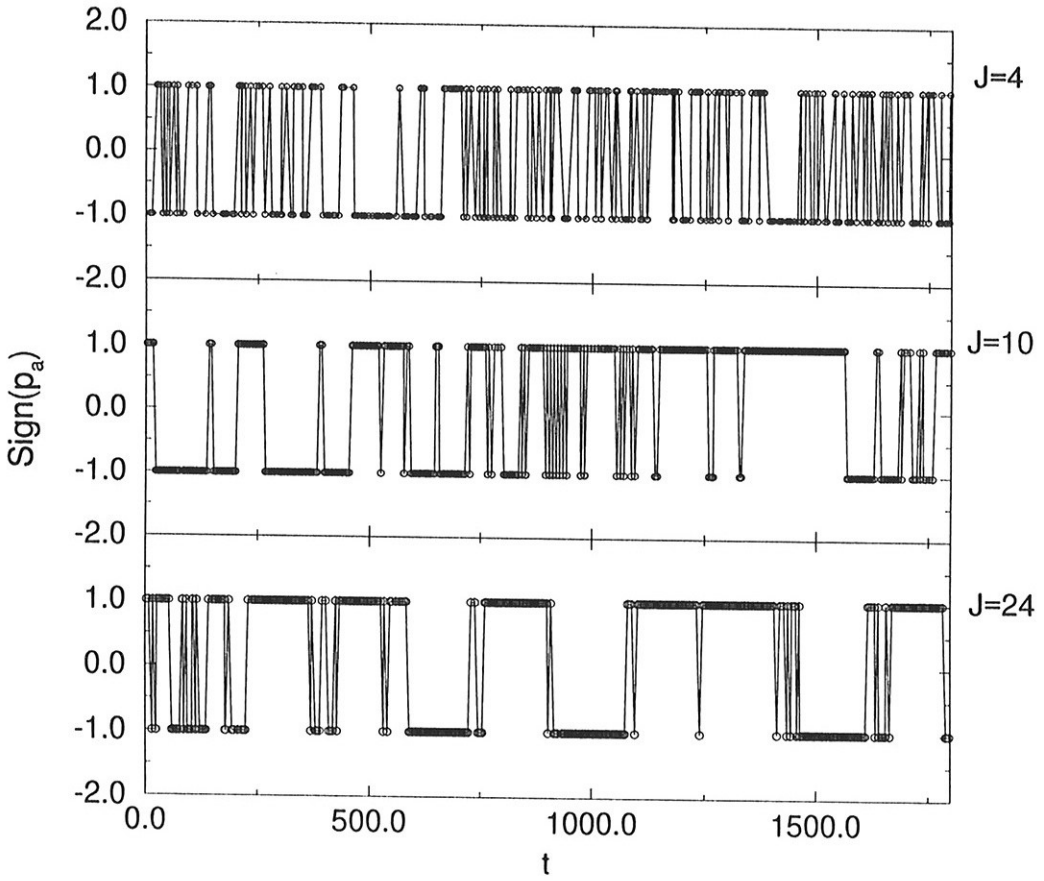

Figura 5.16: Sinal da variável p_a Sign(p_a) graficado em função do tempo. A energia da trajetória é $\mathcal{H}_{cl}(0) = \mathcal{H}_{sc} = -1.2$, com a condição de incerteza mínima nas variáveis Q_i e P_i. Temos $\chi = -6.0$. As linhas "verticais" indicam os instantes em que ocorrem as transições .

Para um determinado valor de J, a cada ponto que aparece na seção marcamos Sign(p_a)=-1 se $p_a < 0$ e Sign(p_a)=1, do contrário. Podemos ver assim que por

um certo número de iterações do mapa de Poincaré os pontos estão confinados a uma das regiões (a este intervalo de tempo chamaremos T_c) e este número de iterações do mapa que ocorre entre uma transição e outra torna-se maior, em média, a medida que aumentamos J, indo à infinito no limite $J \to \infty$. Dito de outra maneira, o número de linhas "verticais" no diagrama $\mathrm{Sign}(p_a) \times t$, que representam as transições é diminuído, considerado o mesmo tempo total de integração das equações do movimento, aumentando-se J.

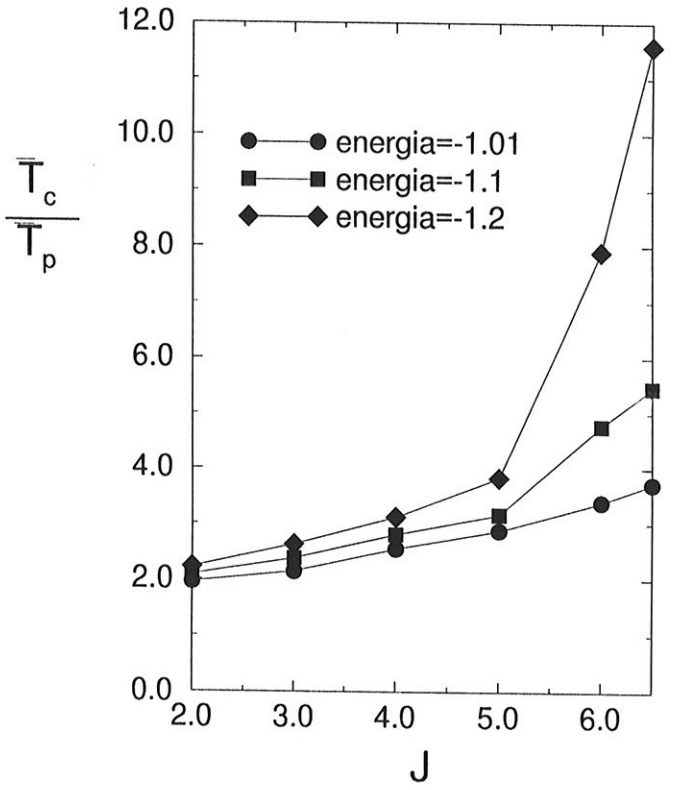

Figura 5.17: T_c/T_p para vários valores de energia $\mathcal{H}_{sc}$ abaixo da separatriz, graficado em função de J, com $\chi = 6$.

O tempo necessário para a ocorrência do tunelamento de trajetórias (a grandeza física associada ao tunelamento será descrita logo adiante) com energias baixas (da ordem de meia altura da barreira) é muitíssimo grande, tornando impraticável a inte-

gração numérica das equações do movimento com precisão aceitável. Mostraremos o comportamento do intervalo de tempo entre as transições apenas para energias pouco abaixo da separatriz S_. Escolhida uma condição inicial, contadas mil transições $p_a > 0 \leftrightarrow p_a < 0$, tomamos a média sobre o intervalo de tempo T_c ($\bar{T}_c$) compreendido entre dois eventos consecutivos e dividimos pelo tempo médio necessário para iterar o mapa de Poincaré ($\bar{T}_p$). O resultado assim obtido para crescentes valores de J e vários valores de energia está graficado na figura 5.17. Com a grandeza $\bar{T}_c/\bar{T}_p$, não pretendemos definir, com qualquer rigor, uma taxa de tunelamento. Trata-se apenas de um meio para quantificar o fenômeno nesta representação semiclássica.

O observável quântico associado às transições $p_a > 0 \leftrightarrow p_a < 0$ é $J_x = (J_+ + J_-)/2$. O sinal do valor médio $< J_x >$ na seção de Poincaré é completamente determinado pelo sinal de p_a. Temos

$$\text{Sign}[< J_x >] = \text{Sign}[\frac{1}{2}(q_b q_a + p_b p_a) = \text{Sign}[p_a] \quad . \tag{5.19}$$

O fenômeno que estamos a descrever aqui não tem em sua essência a mesma natureza do tunelamento quântico (o genuíno), trata-se apenas de uma representação deste último. Esta diferença fundamenta-se no fato de estarmos trantando de um sistema completamente determinístico $\mathcal{H}_{sc}$ sendo alheia à ele a natureza probabilistica do fenômeno descrito pela dinâmica quântica. Desta maneira, pelo menos em princípio, é possível encontrar uma condição, necessária e suficiente, sobre o espaço de fase $\{q_i, p_i, Q_i, P_i\}$ para que ocorram as transições .

Capítulo 6

Conclusões

Com base no princípio variacional dependente do tempo realizado com uma mistura estatística gaussiana, efetuamos uma aproximação de campo médio para o modelo de Lipkin $SU(2)$ na qual os parâmetros variacionais associados às flutuações quânticas são acoplados à dinâmica das médias e projetados sobre espaço de fase de variáveis canonicamente conjugadas. Mostramos que a dinâmica semiclássica assim obtida incorpora a dinâmica destas flutuações nos termos de ordem não nula da expansão $1/N$ em torno do limite clássico $N \to \infty$. Como consequência da introdução destes novos graus de liberdade mostramos que mesmo tendo o modelo de Lipkin uma dinâmica quântica exatamente solúvel (sem que o espectro de energias apresente os traços típicos dos sistemas quânticos que possuem análogos clássicos não integráveis) e uma dinâmica clássica regular, as correções quânticas assim obtidas nos levam à uma dinâmica efetiva (semiclássica) caótica. Este é o comportamente denominado caos *semiquântico* descrito recentemente em [14], [15] e [16]. Mostramos que mesmo exibindo um comportamento caótico a aproximação semiclássica reproduz melhor os resultados para a evolução temporal do valor esperado dos operadores quânticos. Propomos um critério para quantificar tal propriedade e estimar a escala de tempo de validade de ambas as aproximações (clássica e semiclássica comparadas ao resul-

tado exato). Verificamos que as duas escalas apresentam a mesma forma (o erro cresce linearmente em função de $1/N$). Mostramos ainda que a destruição da estrutura geométrica dos toros invariantes permite que para uma dada condição inicial classicamente confinada por uma barreira de energia seja possível observar no espaço de fase a ocorrência de tunelamento quântico. É através do comportamento caótico que este efeito quântico se manifesta no espaço de fase. Caracterizamos o fenômeno em termos do parâmetro de expansão $1/J$ e da energia da trajetória semiclássica $\mathcal{H}_{sc}$, mostrando numericamente que as transições através da barreira se tornam cada vez mais raras a medida que o limite clássico vai sendo atingido ($N \to \infty$) e não ocorrem neste limite.

O formalismo que empregamos neste trabalho para a realização da aproximação gaussiana está inserido em um contexto mais amplo. Como brevemente discutimos na seção 3.3.1 a parte da matriz densidade total F responsável pela evolução temporal das correlações , F', pode ser escrita, através de uma expansão sistemática, em termos da história passada da matriz densidade gaussiana F_0 (aqui responsável pela geração da dinâmica semiclássica). Pode-se mostrar que a dinâmica das correlações, em termos de integrais de memória (funções também dos parâmetros gaussianos), pode ser também colocada na forma das equações de Hamilton [40]. Um passo seguinte ao que demos nesta contribuição seria o estudo do efeito da evolução temporal destas correlações quânticas sobre a dinâmica semiclássica no espaço de fase. Na barreira centrífuga responsável pela realização do princípio de incerteza (cinemática quântica) no espaço de fase (equação 3.73) o parâmetro de ocupação ν faz o papel de momento angular. Acrescentando-se à essa dinâmica a outra não unitária, dada por F', teremos $\dot{\nu} \neq 0$ o que pode produzir efeitos interessantes, esperamos, também na dinâmica do tunelamento.

Este trabalho, pretendemos, não tem significado unicamente acadêmico. No

contexto da Física da Matéria Condensada, particularmente o das Heteroestruturas Semicondutoras (onde além de ser possível o estudo de propriedades fundamentais da Mecânica Quântica, há grande interesse do ponto de vista do desenvolvimento de novas tecnologias), relatou-se recentemente [41] a ocorrência de comportamentos caóticos associados à propriedades quânticas de sistemas que são classicamente integráveis. Um trabalho particularmente intressante refere-se à estatísticas de nível para um problema de poço de potencial duplo que apresenta a estatística de Wigner para a distribuições de primeiros vizinhos na região do espectro em que se encontra o topo da barreira [42]. Um comportamento inusitado para um sistema classicamente integrável. Acreditamos que o presente trabalho pode fornecer uma ferramenta útil para o estudo e compreensão deste tipo de comportamento, com uma possível realização experimental.

Bibliografia

[1] Peter R. Holland, *The Quantum Theory of Motion: An Account of the de Broglie-Bohm Causal Interpretation of Quantum Mechanics* (Cambridge University Press, 1993). Este trabalho propicia uma excelente discussão sobre as bases conceituais da Mecânica Quântica e sua conexão com a teoria Clássica.

[2] *Chaos and Quantum Physics*, Les Houches Summer School 1989, editado por M.J. Gianonni, A. Voros e J. Zinn-Justin (North-Holland, Amsterdam, 1991).

[3] I. C. Percival, Adv. Chem. Phys. 36, (1977), 1; para uma revisão sobre os trabalhos originais.

[4] M. Gutzwiller, J. of Math. Phys. **12**, No.3 (1971) 343.

[5] M. Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Physics* (Wiley-Interscience, New York, 1991).

[6] E. P. Wigner, Phys. Rev. **40** (1932) 749.

[7] McDonald e Kaufman, Phys. Rev. Lett. **42** ,(1979) 1189.

[8] E. J. Heller Phys. Rev. Lett. **53** ,(1984) 1515.

[9] P. Kramer ee M. Saraceno, Lecture Notes in Physics, **140**, Springer Verlag, (1981) 1.

[10] L. Yaffe, Rev. Mod. Phys. **54**, (1982) 407-435

[11] R. Jackiw and Kerman Phys. Lett. **71A** (1979), 158.

[12] Fred Cooper, So-Yong Pi e Paul N. Stancioff, Phys. Rev. D, **34**, No.12, (1986) 3831.

[13] H. C. Reis e O. J. P. Éboli Int. J. of Mod. Phys. A, **11**, No.21, (1996) 3957.

[14] Fred Cooper, John Dawson, D. Meredith e H. Shepard, Phys. Rev. Lett. **72** (1994) 1337.

[15] A. K. Pattanyak and W. C. Schieve, Phys. Rev. Lett. **72**, (1994) 2855.

[16] A. K. Pattanyak and W. C. Schieve, Phys. Rev. E **50**, (1994) 3601.

[17] T. C. Blum e Hans-Thomas Elze, Phys. Rev. E **53**, No. 4, (1996) 3123.

[18] H.Lipkin, N. Meshkov e A. Glick, Nucl. Phys **62** (1965) 188.

[19] Lin Chi Yong , A. F. R. de Toledo Piza - Modern Physics Letters A, **5** , No.20, (1990) 1605.

[20] Lin Chi Yong , A. F. R. de Toledo Piza - Physical Review D, **46**, No.2, (1992) 742-756

[21] D Agassi, H.Lipkin e N. Meshkov, Nucl. Phys **86** (1966) 321.

[22] M. L. Cescato, M. Kyotoku e M. C. Nemes, Physical Review **C 45**, (1992) 671.

[23] K. Heep e E. H. Lieb, Lecture Notes in Physics, **38**, Springer Verlag.

[24] Valdecir Marvule, Tese de Doutoramento apresentada ao Instituto de Física da Universidade de São Paulo.

[25] A. M. Perelomov, Sov. Phys. Usp. **20**(9), (sept. 1977) 703-720

[26] Wei-Min Zhang, DaHsuan Feng e R. Gilmore, Reviews of Modern Physics, **62**, No. 4, (1990).

[27] K. Takahashi, J. of the Phys. Soc. Jpn., **55**, No.3 (1986) 762.

[28] J. Kurshan, P. Leebouf, M. Saraceno, Phys. Rrev. A **40** No.12 (1989).

[29] M. L. Cescato, M. Kyotoku, M.C. Nemes e M. Trindade dos Santos, Phys. Rev. **C46**, (1992) 2102.

[30] M. O. Terra, Tese de Doutoramento apresentada ao Instituto de Física da Universidade de São Paulo, (1996).

[31] M. C. Nemes e A. E. R. de Toledo Piza, Physica A **137** (1986) 367.

[32] A.F.R. de Toledo Piza, Physical Review **A 51** No.2 (1995) 1612-1616.

[33] P. Ring , P, Schuck - The Nuclear Many-Body Problem - Springer-Verlag New York Inc. 1980

[34] D Galleti, A.F.R. de Toledo Piza, Physica A **214** (1995) 207-228.

[35] J.L.Van Hemmen e W.Von Waldenfels, Physica **100 A** (1980) 83.

[36] M. C. Cambiaggio, G.C. Dussel e M. Saraceno-Condensed Matter Theories, Vol.1 ed. F.B. Malik (Plenum, N. Y., 1986) 57.

[37] M. O. Terra, A. H. Blin, B. Hiller, M. C. Nemes, C. Providência e J. Providência, J. Phys. A: Math. Gen. **27** ((1994) 697.

[38] M. Trindade dos Santos, M. L. Cescato, K. Furuya, M. Kyotoku e M. C. Nemes, Physica Scripta, **55** (1997) 415

[39] Fred Cooper, John Dawson, Salman Habib, e Robret D. Reyne, disponível eletronicamente em quant-ph/9610013.

[40] A.F.R. d Toledo Piza e Chi-Yong Lin, *Quantum Many-Body Dynamics in the Gaussian Approximation and Beyond*, nos Anais da International Conference on Many-Body Nuclear Physics, editado por C. Fiolhais, M. Fiolhais, C. Souza e J.N.Urbano, World Scientific, 1994, p. 227.

[41] Giovanni Jona-Lasinio e Carlo Presilla, Phys. Rev. Lett. **68**, No. 15 (1992) 2269.

[42] R. Berkovits, Y. Ashkenazy, L. P. Horwitz e J. Levitan, *Chaotic Signatures in the Spectrum of a Quantum Double Well*, disponível eletronicamente em cond-mat/9602008 (2 Feb. 1996).