Universidade de São Paulo
Instituto de Física

SOBRE A QUANTIZAÇÃO DE UM SISTEMA CLASSICAMENTE CAÓTICO

Newton Franco de Godoy

Dissertação de Mestrado apresentada no Instituto de Física da USP

Orientador: Prof. Dr. Walter Felipe Wreszinski

São Paulo

1988

Defesa em 29/3/88

FICHA CATALOGRÁFICA

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

Godoy, Newton Franco de
Sobre a quantização de um sistema classicamente caótico. São Paulo, 1988.

Dissertação (Mestrado) - Universidade de São Paulo. Instituto de Física. Departamento de Física Matemática.

Área de Concentração: Física de Partículas Elementares.

Orientador: Prof. Dr. Walter Felipe Wreszinski

Unitermos: 1.Quantização de um sistema dissipativo

USP/IF/SBI - 10/88

RESUMO

Estudamos algumas propriedades de uma quantização em termos de observáveis de um modelo classicamente caótico que exibe um atrator estranho. Mostramos em particular que valores esperados convenientes de alguns observáveis possuem o limite clássico correto e que nesses casos os limites $\hbar \to 0$ e $t \to \infty$ (t=tempo) comutam rigorosamente. Este modelo foi quantizado por R. Graham de forma alternativa em termos da função de Wigner. Completamos em alguns pontos a análise de Graham, em particular, encontramos uma surpreendente analogia com resultados gerais sobre o limite semi-clássico da função de Wigner para sistemas integráveis, obtidos por M.V. Berry. Finalmente, tentamos comparar valores esperados obtidos pelos dois métodos de quantização.

ABSTRACT

We study some properties of a quantization in terms of observables of a classically chaotic system, wich exhibits a strange attractor. We show in particular that convenient expected values of some observables have the correct classical limit and that in these cases the limits $\hbar \to 0$ and $t \to \infty$ (t=time) rigorously comute. This model was alternatively quantized by R.Graham in terms of Wigner function. We complete Graham's analysis in a few points, in particular, we find out a remarkable analogy with general results about the semi-classical limit of Wigner function, obtained by M.V. Berry. Finally we have tried to compare expected values obtained by both methods of quantization.

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Walter Felipe Wreszinski pela orientação sempre segura e eficiente.

À Lia e aos meus pais pelo apoio.

À FAPESP pelo suporte financeiro.

ÍNDICE

INTRODUÇÃO E RESUMO

Este trabalho trata da quantização de sistemas dissipativos. Esse assunto já foi tratado na literatura sob diversos pontos de vista. Algumas referências são [1-6].

O método mais geral e mais difundido é o das equações mestras (master equations). Entretanto a justificação matemática dessas equações é um problema difícil (veja referência [6]). No caso em que há apenas dissipação global (veja capítulo 2) é, em certos casos, possível um tratamento *semi-Hamiltoniano* (Graham [7]) através de um *Hamiltoniano* que gera apenas translações temporais em uma direção (*futura*). Esse fato simplifica sobremaneira a quantização através da função de Wigner. Esses modelos têm ainda a característica adicional atraente de apresentar um *atrator estranho* (veja capítulo 1) no seu limite clássico. Impõe-se nesta conexão a questão extremamente fundamental e fascinante: o que acontece com esses atratores estranhos após a quantização?

Essa questão foi em princípio resolvida por Graham [7] e isso será revisto nas seções 3 e 4 do capítulo 2. Esse problema diz respeito à teoria geral do limite semiclássico desses sistemas, que foi analisado, em termos da função de Wigner, por Berry [8], especialmente para sistemas integráveis (veja também as conjeturas sobre o caso Hamiltoniano estocástico (caótico) em Berry [8] e Ozorio de Almeida [9]). Na seção 5 do capítulo 2 completamos em alguns pontos a análise de Graham, comparando-a com a de Berry. Encontramos uma surpreendente analogia com os resultados desse último para sistemas integráveis unidimensionais, apesar de estarmos tratando de um sistema dissipativo.

A teoria do limite semi-clássico de sistemas Hamiltonianos (referências matematicamente rigorosas são Hepp [10] e Ginibre e Velo [11]) mostra que os limites $\hbar \to 0$ e $t \to \infty$ (onde t designa o tempo, e $\hbar$ a constante de Planck) jamais comutam. De fato, em uma das formas em que Hepp [10] analisa o limite clássico - aquela em que ele obtém uma teoria de campos clássica - é introduzido um tempo *re-escalado*, $\tau = \hbar^2 t$, em termos do qual se obtém as equações clássicas de movimento para os campos (no limite clássico). Espera-se que um resultado análogo seja válido no caso de se obter uma teoria clássica de partículas no limite, o que implicaria que no caso Hamiltoniano os limites só comutariam no caso trivial de que as grandezas clássicas correspondentes - as funções das coordenadas de posição e momento analisadas fossem constantes no tempo. Esse reescalamento também concorda com a análise heurística nada trivial, mas convincente de Ott et al [12]. Esses autores estudaram o oscilador quântico periodicamente perturbado de Casati et al [13] ao qual se adiciona um termo de ruído. Se for nulo o termo de ruído, existe um tempo $t^* = \frac{C}{\hbar^2}$ (onde C é uma cons-tan-te dimensional ligada à *força* dos *chutes*) [12] tal que para $t > t^*$ o comportamento do sistema é essencialmente não-clássico (*quase periódico*). O que é novo e supreendente na heurística de Ott et al é a conjetura baseada na equivalência (Fishman et al [14]) entre o modelo do oscilador periodicamente perturbado e um modelo de *tight-binding* com desordem, da física de sistemas desordenados - o modelo de Anderson - de que qualquer ruído, por menor que seja restaura a comutação entre os limites $\hbar \to 0$ e $t \to \infty$ (ou seja, a *estabilidade* da dinâmica clássica). Cumpre notar neste contexto que também outros fenômenos quânticos sutis são extremamente sensíveis à dissipação, como o tunelamento (Caldeira e Leggett [5]).

É a equivalência entre o oscilador periodicamente perturbado e o modelo de Anderson que explica o tempo $t^* = \frac{C}{\hbar^2}$: para $t < \frac{1}{\delta\omega}$, onde $\delta\omega$ é o espaçamento entre as frequências dos modos do modelo de Anderson equivalente, o sistema ainda não *sabe* que o espectro de energias é discreto e se comporta como um sistema caótico clássico para constantes de acoplamento suficientemente grandes. A estimativa de Ott et al [12] fornece $\delta\omega \simeq \frac{\hbar^2}{C}$ na ausência de ruído. Há também, entretanto, um tempo t^{**} tal que o sistema só se comporta classicamente se $t > t^{**}$. Para sistemas quânticos lineares há, como é bem conhecido, estados especiais (*coerentes*) cujos centros de massa seguem as equações clássicas de movimento, mas que não sofrem alargamento. A existência de t^{**} está ligada ao fato de que tais estados não existem para sistemas quânticos não lineares.

Devido aos fatos mencionados acima, seria muito útil e instrutiva a análise do limite clássico em um modelo solúvel. Infelizmente essa análise em Graham é matematicamente formal, conforme observado no capítulo 2. Como veremos na seção 3 do capítulo 2 a quantização proposta por Graham através da função de Wigner envolve um elemento novo, intrinsecamente associado ao caráter dissipativo, que resulta de uma extensão do princípio de superposição: uma fase aleatória. Como alternativa a esse método de quantização, e estimulados pelo trabalho de Hepp, fomos assim levados a uma quantização do modelo em termos de observáveis, isto é, à la Ehrenfest.

Após analisar a relação entre as peculiaridades dessa quantização em um espaço cilíndrico e o nosso modelo, no capítulo 3, provamos rigorosamente na seção 3 deste capítulo que alguns observáveis $X_\hbar$ associados a funções clássicas X_{cl} não constantes no tempo possuem valores esperados $\langle\psi|X_\hbar(t)|\psi\rangle$ em estados $|\psi\rangle$ convenientes tais que

$$\lim_{\hbar\to 0}\lim_{t\to\infty}\langle\psi|X_\hbar(t)|\psi\rangle = \lim_{t\to\infty}\lim_{\hbar\to 0}\langle\psi|X_\hbar(t)|\psi\rangle = X_{cl}$$

onde $X_{cl} = \lim_{t\to\infty} X_{cl}(t)$ e $X_{cl}(t)$ é a solução das equações clássicas de movimento, com certos valores iniciais $X_{cl}(0)$. Os estados $|\psi\rangle$ estão ligados de forma natural a $X_{cl}(0)$. Esses resultados dependem de uma análise mais completa do modelo clássico feita no capítulo 1, onde também discutimos outros resultados interessantes, alguns dos quais não se encontram na literatura.

Concluindo, tentamos comparar os resultados obtidos para os valores esperados dos observáveis estudados através dos dois métodos. Na impossibilidade de calcular as integrais analiticamente na formulação através da função de Wigner, fizemos uma análise numérica que é, entretanto, inteiramente conclusiva e mostra resultados divergentes para aqueles mesmos observáveis cujos valores esperados foram calculados de maneira simples pela quantização à la Ehrenfest. Esse fato poderia ser devido ao caráter matematicamente formal da quantização pela função de Wigner que aqui se manifesta de forma ainda mais séria. Neste caso, isto significaria apenas que nesse método há uma classe de observáveis (cujos valores esperados são calculáveis através da função de Wigner) muito mais restrita que no outro. Fica portanto, aberta a questão extremamente fundamental: há quantizações diferentes de sistemas dissipativos que conduzem ao mesmo limite clássico? A resposta que sugerimos, parece ser sim em um sentido muito restrito: o de admitir diferentes classes de observáveis, mas não pode ser considerada conclusiva devido a ser uma das quantizações (à la Wigner) matematicamente formal. Se esse fato, entretanto, se confirmasse, apenas a experiência poderia decidir qual seria a quantização relevante, e para isso necessitariamos de uma análise rigorosa de modelos mais realistas.

[1] Immele, J.D., Kan, K.K., Griffin, J.J., *Nucl.Phys.* **A241**, 47 (1975).

[2] Yasue, K., *Phys.Lett.* **64B**, 239 (1976).

[3] Messer, J., *Acta Phys.Austr.* **50**, 75 (1979).

[4] Nemes, M.C., de Toledo Piza, A.F.R., *Phys.Rev* **A27**, 1199 (1983).

[5] Caldeira, A., Leggett, A.J, *Phys.Rev.Lett.* **46**, 211 (1981) e *Ann.Phys.* **149**, 374 (1983).

[6] Davies, E.B., *Quantum Theory of Open Systems*, (Academic Press, 1976) e referências lá citadas.

[7] referências 3, 4, 5 do capítulo 2

[8] referência 1 do capítulo 2.

[9] referência 6 do capítulo 2.

[10] Hepp, K., *Comm.Math.Phys.* **35**, 265 (1974).

[11] Ginibre, J., Velo, G., *Ann.Phys.* **128**, 243 (1980).

[12] Ott, E.R., Antonsen, T.M. Jr., Hanson, J.D., *Phys.Rev.Lett.* **53**, 2187 (1981).

[13] Casati, G., Chirikov, B.V., Izrailev, F.M., Ford, J.,*Lect. Notes in Phys.* **93** (Springer, Berlin, 1979).

[14] Fishman, S., Grempel, D.R., Prange, R.E., *Phys.Rev.Lett.* **49**, 509 (1982).

CAPÍTULO 1 - Modelo de Kaplan-Yorke

Caos é considerado hoje uma propriedade bastante comum à dinâmica de sistemas descritos por equações não-lineares. No entanto, muito pouco se conhece sobre métodos analíticos para resolver sistemas de equações não lineares e a maior parte dos resultados que se tem conseguido nos últimos anos sobre sistemas caóticos derivam de métodos numéricos. Assim sendo, há um grande interesse em modelos que exibam caos e sejam suficientemente simples para permitirem solução analítica.

Uma família de modelos introduzidos por Kaplan e Yorke [1] para estudos numéricos acabaram sendo resolvidos analiticamente [2,3,4] e um estudo detalhado destes modelos é o nosso objetivo neste capítulo.

1. O modelo de Kaplan-Yorke.

Trata-se de uma família de sistemas dinâmicos discretos descritos por mapeamentos bidimensionais.

$$x_{n+1} = 2x_n \,(\mathrm{mod}\, 1) \tag{1.1.a}$$

$$y_{n+1} = \lambda y_n + f(x_n) \tag{1.1.b}$$

$$x_n \in [0,1) \qquad y_n \in R \qquad \lambda \in R \qquad n \in N$$

$f : [0,1) \rightarrow R$, será extendida para todo R por $f(x+1) = f(x)$.

A eq.(1.1) é uma generalização da bem conhecida transformação de Baker que é um exemplo de sistema dinâmico conservativo que exibe mixing [5]. Para obter a transformação de Baker basta tomarmos $f(x) = \frac{1}{4}\left[1 - \mathrm{sgn}(\frac{1}{2} - x)\right]$, $\lambda = \frac{1}{2}$ e restringirmos y_n em $[0,1)$.

O determinante jacobiano de (1.1) é 2λ, de modo que para $|\lambda| < \frac{1}{2}$ temos um sistema dissipativo. Para $\lambda = \frac{1}{2}$ temos preservação local de áreas. Para tornar o modelo mais interessante vamos considerar $f(x)$ tal que $f(x+\frac{1}{2}) = f(x)$. Com isto teremos uma transformação não inversível e o caso $\lambda = \frac{1}{2}$ será globalmente dissipativo. Utilizaremos a terminologia *dissipação local* e *dissipação global* para os casos em que não há preservação local de áreas, mas há inversibilidade ou então há preservação, mas não inversibilidade, respectivamente [6].

Partindo de (x_0, y_0) e aplicando (1.1) n vezes obtemos

$$x_n = 2^n x_0 \pmod 1 \tag{1.2.a}$$

$$y_n = \lambda^n y_0 + \sum_{l=0}^{n-1} \lambda^l f(2^{n-1-l} x_0) \tag{1.2.b}$$

De (1.2.a) obtemos a densidade de probabilidade condicional $P_n(x|x_0)$

$$P_n(x|x_0) = \delta(x - 2^n x_0 \,(\mathrm{mod}\, 1)) = \delta^{\mathrm{mod}\,1}(x - 2^n x_0) \tag{1.3}$$

onde definimos $\delta^{\mathrm{mod}\,1}(x) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \delta(x - m)$, que usando a fórmula de soma de Poisson também se escreve, $\delta^{\mathrm{mod}\,1}(x) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \exp 2\pi i k x$. É fácil mostrar que

$$\delta^{\mathrm{mod}\,1}(Nx) = \frac{1}{N} \sum_{m=0}^{2^n-1} \delta^{\mathrm{mod}\,1}(x - \frac{m}{N}) \tag{1.4}$$

Para uma distribuição inicial arbitrária $P_0(x_0)$ temos

$$P_n(x) = \int_0^1 dx_0 P_0(x_0) P_n(x|x_0) \tag{1.5}$$

substituindo (1.3) em (1.5) e usando (1.4) chegamos em

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n} \sum_{m=0}^{2^n-1} P_0(\frac{x+m}{2^n}) \tag{1.6}$$

Para a densidade de probalidade condicional conjunta temos

$$P_n(x, y|x_0, y_0) = \delta^{\mathrm{mod}\,1}(x - 2^n x_0)\delta\left(y - \lambda^n y_0 - \sum_{l=0}^{n-1} \lambda^l f(2^{n-1-l} x_0)\right) \tag{1.7}$$

que pode ser escrito como $P_n(x, y|x_0, y_0) = P_n(x|x_0) \cdot P_n(y|x; y_0)$ onde

$$P_n(y|x; y_0) = \frac{1}{2^n} \sum_{m=0}^{2^n-1} \delta \left(y - \lambda^n y_0 - \sum_{l=0}^{n-1} \lambda^l f(\frac{x+m}{2^{l+1}}) \right) \tag{1.8}$$

de onde concluímos que para cada n a distribuição se concentra sobre as 2^n curvas

$$y_m^n(x) = \lambda^n y_0 + \sum_{l=0}^{n-1} \lambda^l f(\frac{x+m}{2^{l+1}}) \qquad m = 0, 1, \cdots, 2^n - 1 \tag{1.9}$$

Dada uma distribuição inicial $P_0(x_0, y_0)$ temos

$$P_n(x, y) = \int_0^1 dx_0 \int_{-\infty}^{+\infty} dy_0\, P_0(x_0, y_0) P_n(x, y|x_0, y_0) =$$

$$= \frac{1}{2^n} \sum_{m=0}^{2^n-1} \int_{-\infty}^{+\infty} dy_0\, \delta(y - \lambda^n y_0 - \sum_{l=0}^{n-1} \lambda^l f(\frac{x+m}{2^{l+1}}) P_0 \left(\frac{x+m}{2^n}, y_0 \right) =$$

$$= \frac{1}{2^n} \sum_{m=0}^{2^n-1} \frac{1}{\lambda^n} P_0 \left(\frac{x+m}{2^n}, \frac{y - \sum_{l=0}^{n-1} \lambda^l f(\frac{x+m}{2^{l+1}})}{\lambda^n} \right) \tag{1.10}$$

2. Atratores estranhos [7 - 10].

Uma definição matemática de atrator é uma questão controvertida. Milnor [7] inicia seu artigo *On the concept of Attractor* comparando várias das definições propostas na vasta literatura existente sobre atratores e em seguida propõe mais uma. Nesta breve seção sobre atratores vamos nos limitar a apresentar a definição de Eckmann [8] de 1981 (em 1985 ele propõe outra![9]), que é essencialmente a mesma de Lichtenberg [10], e a definição de Milnor.

Considere sistemas dinâmicos descritos por

$$\dot{x}(t) = f_\mu(x(t)) \qquad x \in R^d \tag{2.1.a}$$

ou

$$x_{n+1} = f_\mu(x_n) \qquad x_n \in R^d \tag{2.1.b}$$

onde $\mu \in R$ é um parâmetro mantido fixo e $f : R^d \to R^d$ é diferenciável.

Seja $x(y,t)$ uma solução de (2.1) com condição inicial $x(x_0, t = 0) = x_0$. Assuma que $\exists \mathrm{V} \subset R^d$ tal que $x_0 \in \mathrm{V} \;\Rightarrow\; x(x_0,t) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \mathrm{T}^t x_0 \in \mathrm{V}$ para todo $t > 0$.

Um atrator para o sistema dinâmico (2.1) será um conjunto para o qual o ponto $x(x_0,t)$ se aproximará a medida que t cresce, para *a maioria* das condições iniciais x_0 em uma certa vizinhança de X.

Def.1 (Eckmann 1981): Um *atrator* para o fluxo T^t é um conjunto compacto $\mathrm{X} \subset \mathrm{V}$ que satisfaz:

i) $\mathrm{T}^t\mathrm{X} = \mathrm{X}$ para todo $t > 0$. (invariança)

ii) $\exists \mathrm{U} \supset \mathrm{X}$, aberto, tal que $\mathrm{T}^t\mathrm{U} \subset \mathrm{U}$ para todo $t > 0$ e $\mathrm{X} = \bigcap_{t>0} \mathrm{T}^t\mathrm{U}$. (bacia de atração)

iii) Dado $\mathrm{U} \subset \mathrm{V}$, aberto, tal que $\mathrm{U} \cap \mathrm{X} \neq \emptyset$ então existem valores arbitrariamente grandes de t tais que $\mathrm{T}^t x \in \mathrm{X} \cap \mathrm{U}$ quando $x \in \mathrm{X} \cap \mathrm{U}$. (recorrência $\simeq$ não há transientes no atrator)

iv) X não pode ser decomposto em partes invariantes com medidas positivas. (transitividadade métrica)

Def.2 (Milnor 1985): Um compacto $\mathrm{X} \subset \mathrm{V}$ será dito um *atrator* quando:

i) O conjunto $\varrho(\mathrm{X}) = \{x \in \mathrm{V} : \omega(x) \subset \mathrm{X}\}$ tem medida estritamente positiva, onde $\omega(x)$ é o conjunto de todos os pontos de acumulação da sequência $\{x, f(x), f^2(x), \cdots\}$. ($\omega$−limite)

ii) $\nexists \mathrm{X}' \subset \mathrm{X}$ tal que $\varrho(\mathrm{X}')$ coincida com $\varrho(\mathrm{X})$ a menos de um conjunto de medida nula.

Note que Milnor não faz nenhuma exigência topológica sobre $\varrho(\mathrm{X})$.

Seja X um atrator. Dizemos que X tem sensibilidade às condições iniciais se $\forall x \in \mathrm{X}$, $\exists \epsilon > 0$ tal que para toda vizinhança $\mathcal{U} \ni x$, $\exists y \in \mathcal{U}$ e $t > 0$ tais que $\mathrm{d}(\mathrm{T}^t x, \mathrm{T}^t y) > \epsilon$. Ou seja, pontos arbitrariamente próximos sobre o atrator se tornam macroscopicamente afastados após um tempo finito de evolução. Dizemos que um atrator é *estranho* se ele tem sensibilidade às condições iniciais.

3. *Expoentes de Lyapunov* [9].

Considere um sistema como definido em (2.1.b). Vamos denotar por $T(x)$ a matriz Jacobiana $(\partial f_i/\partial x_j)$ calculada no ponto x. Definindo $f^n(x) = f(f \cdots f(x))$, a regra da cadeia nos dá

$$(\partial(f^n)_i/\partial x_j) = \mathrm{T}(f^{n-1}(x)) \cdots \mathrm{T}(f(x))\mathrm{T}(x) \stackrel{\text{def}}{=} \mathrm{T}_x^n$$

Agora, se ρ é uma medida para f, com suporte compacto, o teorema ergótico multiplicativo de Oseledec [11] nos garante a existência para quase todo x com respeito a ρ do seguinte limite:

$$\lim_{n\to\infty} (\mathrm{T}_x^{n*}\mathrm{T}_x^n)^{1/2n} = \Lambda_x \tag{3.1}$$

O logarítimo dos autovalores de Λ_x, que denotaremos por $\lambda_1 > \lambda_2 > \cdots$ onde cada λ_i multiplicidade m_i são chamados de expoentes de Lyapunov. Da ergodicidade de ρ segue ainda que estes expoentes são constantes para *quase todo* x.

Seja E_x^i o subespaço de R^d correspondente aos autovalores menores ou iguais a $\exp(\lambda_i)$. Então $R^d = \mathrm{E}_x^1 \supset \mathrm{E}_x^2 \cdots$ e vale o seguinte teorema:

Teo.: Para quase todo x com respeito a ρ,

$$\lim_{n\to\infty} \frac{1}{n} \log \|\mathrm{T}_x^n u\| = \lambda_i \qquad \text{se} \qquad u \in \mathrm{E}_x^i \backslash \mathrm{E}_x^{i+1}$$

em particular, para todos $u \notin \mathrm{E}_x^2$ o limite dará λ_1, o maior expoente de Lyapunov.

Voltando para o nosso sistema dinâmico, se $\delta x(0)$ é uma variação infinitesimal da condição inicial x_0 então $\delta x(n) = \mathrm{T}_x^n \delta x(0)$. Se $\delta x(0) \notin \mathrm{E}_x^2$ então $\delta x(n) \approx \delta x(0) e^{n\lambda_1}$ e dependência sensitiva às condições iniciais se traduz em ter pelo menos o maior expoente de Lyapunov positivo.

4. *Dimensões associadas a um atrator* [12].

São várias as dimensões definidas na literatura, vamos apresentar aqui duas delas: a dimensão fractal ou capacidade e a dimensão de informação.

Dado um sistema dinâmico com espaço de fase d-dimensional, seja $n(\epsilon)$ o número de d-bolas de raio ϵ necessárias para cobrir o atrator, definimos dimensão fractal por

$$D_F = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{\log n(\epsilon)}{|\log \epsilon|} \tag{4.1}$$

Suponha agora que cada uma das $n(\epsilon)$ bolas necessárias para cobrir o atrator tenham probabilidades diferentes de serem visitadas na evolução do sistema sobre o atrator e seja P_i a probabilidade associada a i-ésima bola. A *informação* contida nesta partição do atrator é definida por $I(\epsilon) = -\sum_{i=1}^{n(\epsilon)} P_i \log P_i$. Definimos dimensão de informação por

$$D_I = \lim_{\epsilon \to 0} \frac{I(\epsilon)}{|\log \epsilon|} \tag{4.2}$$

Se todos os elementos da partição têm a mesma probabilidade, isto é $P_i = 1/n$, então $D_I = D_F$. Em geral $D_I \leq D_F$.

Há duas conjeturas relacionando a dimensão com o espectro dos expoentes de Lyapunov. Kaplan e Yorke [1] fazem a conjetura de que

$$D_I = j + \frac{\sum_{i=1}^{j} \lambda_i}{|\lambda_{j+1}|} \tag{4.3}$$

onde j é o maior inteiro onde ocorre $\lambda_1 + \cdots + \lambda_j \geq 0$. Mori [13] coloca a conjetura de que

$$D_F = d + \frac{\sum_{i=1}^{k} \lambda_i^+}{\sum_{i=1}^{l} |\lambda_i^-|} \tag{4.4}$$

onde d é o número de expoentes não negativos, k é o número de expoentes positivos λ_i^+, e l é o número de expoentes negativos λ_i^-. Para sistemas contínuos com espaço de fase de dimensão 3 ou sistemas discretos de dimensão 2 ou menos, as conjeturas, quando aplicáveis, dão o mesmo resultado. Existem bons algorítimos para o cálculo direto da dimensão fractal e melhores ainda para o cálculo dos expoentes de Lyapunov. Em vários casos a conjetura de Kaplan-Yorke, que é um limite inferior para D_F, tem mostrado boa concordância.

5. *Estudo do atrator do modelo de Kaplan-Yorke.*

Retomando o mapa de Kaplan-Yorke descrito e resolvido na seção 1, fazendo $n \to \infty$ e supondo $|\lambda| < 1$, a eq.(1.9) nos leva a definir o atrator do sistema como a aderência do conjunto de curvas

$$y_m^\infty(x) = \sum_{l=1}^{\infty} \lambda^{l-1} f(\frac{x+m}{2^l}) \qquad m = 0, 1, 2, \cdots \tag{5.1}$$

Tomamos a aderência para garantir a compacticidade do atrator.

Vamos definir a variável contínua $\xi = x + m$. Introduzindo a representação binária de x e m

$$x = \sum_{p=1}^{\infty} \mathrm{S}_p \frac{1}{2^p} \equiv (.\mathrm{S}_1\mathrm{S}_2\mathrm{S}_3\cdots)_2$$

$$m = \sum_{p=-\infty}^{0} \mathrm{S}_p \frac{1}{2^p} \equiv (\cdots\mathrm{S}_{-3}\mathrm{S}_{-2}\mathrm{S}_{-1}\mathrm{S}_0)_2$$

ξ se escreve

$$\xi = \sum_{p=-\infty}^{+\infty} \mathrm{S}_p \frac{1}{2^p} \equiv (\cdots\mathrm{S}_{-2}\mathrm{S}_{-1}\mathrm{S}_0.\mathrm{S}_1\mathrm{S}_2\cdots)_2 \tag{5.2}$$

onde $\mathrm{S}_p = 0, 1$ para todo inteiro p. Com esta variável ξ e lembrando que $f(x+1) = f(x)$ podemos reescrever (5.1) como

$$y_m^\infty(x) = \sum_{l=1}^{\infty} \lambda^{l-1} f(\sum_{p=1}^{\infty} \mathrm{S}_{p-l} \frac{1}{2^p}) \qquad m = 0, 1, 2\cdots \tag{5.3}$$

Em base 2 os racionais em [0,1) são aqueles cuja representação contém um número finito de bits 1 (a representação termina) ou quando após um número finito de bits aparece uma sequência de 0 e 1 que se repete infinitamente. Vamos nos referir ao primeiro caso como racionais *finitos* e ao segundo como racionais *periódicos*. Designaremos estes conjuntos por Q_f e Q_p, respectivamente. Introduziremos os termos *comprimento* e *período* de um número racional com os significados óbvios.

A operação $2x(\mathrm{mod}\,1)$ em aritimética binária corresponde a deslocar todos os bits da parte fracionária uma posicão para esquerda (*shift left*), isto é

$$2 \times (\cdots S_{-1}S_0.S_1S_2S_3\cdots)_2(\mathrm{mod}\,1) = (.S_2S_3S_4\cdots)_2 \tag{5.4}$$

Note que em cada aplicação de (5.4) o dígito logo após o ponto é perdido.

Com as definições acima introduzidas e raciocinando sempre com base em (5.4) fica simples caracterizar o comportamento dinâmico do modelo de Kaplan-Yorke em função do ponto inicial (x_0, y_0) escolhido :

i) Se $x_0 \in Q_f$ então $x_n = 0$ para $n > m$, onde m é o comprimento de x_0. Para y_n teremos uma sequência convergente, independente de qual for o y_0 escolhido. Vamos definir S_{x_0,y_0} como a sequência dos pontos (x_n, y_n) com $x_0 \in Q_f$. É fácil mostrar que S_{x_0,y_0} tem o valor de aderência $(0, y_\infty(0))$ onde

$$y_\infty(0) = \lim_{n\to\infty} \sum_{l=0}^{n-1} \lambda^l f(2^{n-1-l}x_0) = f(0)\,\frac{1}{1-\lambda} \tag{5.5}$$

Note que o ponto (x_n, y_n) só vai começar a se aproximar do seu valor de aderência $(0, y_\infty(0))$ quando $n > m$ (a aproximação se dá sobre o eixo y), antes disso o que se observa é um comportamento totalmente irregular.

ii) Se $x_0 \in Q_p$, com período p, as soluções do modelo convergem para um ciclo de período p que independe de y_0, isto é, dado $x_0 \in Q_p$ um p-ciclo fica univocamente definido. Por exemplo, suponha atingido um ciclo $abcabcabc\cdots$ em x (do mesmo modo que em S_{x_0,y_0} teremos de início um comportamento irregular, mas após um número suficiente de iterações um ciclo em x será atingido e a partir daí, y inicia um rápido processo de convergência), vamos determinar os valores de aderência para a variável y :

$$\begin{aligned} x_n = a,\ y_n = y &\Rightarrow x_{n+1} = b,\ y_{n+1} = \lambda y + f(a) \\ &\Rightarrow x_{n+2} = c,\ y_{n+2} = \lambda^2 y + \lambda f(a) + f(b) \\ &\Rightarrow x_{n+3} = a,\ y_{n+3} = \lambda^3 y + \lambda^2 f(a) + \lambda f(b) + f(c) \Rightarrow \cdots \end{aligned} \tag{5.6}$$

de (5.6) obtemos os valores de aderência

$$y(a) = \left(f(c) + \lambda f(a) + \lambda^2 f(b)\right)\frac{1}{1-\lambda} \tag{5.7.a}$$

$$y(b) = \left(f(a) + \lambda f(b) + \lambda^2 f(c)\right)\frac{1}{1-\lambda} \tag{5.7.b}$$

$$y(c) = \left(f(b) + \lambda f(c) + \lambda^2 f(a)\right)\frac{1}{1-\lambda} \tag{5.7.c}$$

A extensão para ciclos maiores é imediata.

iii) Se $x_0 \in [0,1)/Q_p \cup Q_f$ então a evolução em x e y será eternamente irregular (não há elemento repetido na sequência x_0, $2x_0(\text{mod}\,1)$, $2^2 x_0(\text{mod}\,1), \cdots$).

Os três casos discutidos esgotam as possibilidades de escolha de x_0. Se $f(x)$ é limitada, a variável y também o será. De fato

$$|y_n| \leq \sum_{l=0}^{n-1} \lambda^l \max_{0\leq x<1} |f(x)| = \max_{0\leq x<1} |f(x)|\{1 + \lambda + \cdots + \lambda^{n-1}\}$$

$$\leq \max_{0\leq x<1} |f(x)|\frac{1}{1-\lambda} \tag{5.8}$$

Note que Q_p e Q_f são conjuntos de medida nula, portanto, embora os comportamentos *i*) e *ii*) sejam previstos teoricamente, eles têm probabilidade nula de serem observados em um sistema físico que fosse modelado pelo mapa de Kaplan-Yorke. Isto está associado à enorme instabilidade do ponto fixo $(0, y_\infty(0))$ e dos p-ciclos (uma pertubação em x_0, por menor que seja, destrói a periodicidade descrita em *ii*)). Entretanto, uma simulação numérica da evolução do sistema, se feita pelo modo usual, revelaria a existência de um único ponto fixo, $(0, y_\infty(0))$, qualquer que fosse a condição inicial escolhida.

A explicação deste efeito numérico indesejável é evidente após um exame de *i*): Um número é representado no computador sempre por uma sequência finita de 0 e 1. Em cada aplicação de (5.4) um zero é introduzido no último bit da palavra que representa o número e no máximo após um número de interações igual ao número de bits da palavra (ou palavras) que representa a condição inicial obtemos $x_n = 0$.

Podemos simular um racional periódico introdusindo-o diretamente em representação binária, usando tantas palavras quanto o necessário (independente da precisão) para guardar um período completo. A operação (5.4) seria implementada não por um *shift left* usual, mas um *shift left* com injeção: No último bit da primeira palavra injetamos o primeiro bit da primeira palavra e assim sucessivamente, fechando o ciclo com injeção do primeiro bit da primeira palavra (que é perdido na operação $2x(mod 1)$ usual) na última posição preenchida da última palavra. Com esse processo poderíamos simular qualquer p-ciclo e tomando um número cada vez maior de palavras com 0 e 1 distribuídos aleatoriamente teríamos uma boa aproximação de um irracional.

exemplo: Considere $f(x)$ dada por:

$$f(x) = \frac{1-\lambda}{2}\,\mathrm{sgn}\left(\frac{1}{2} - x\right) = \begin{cases} \frac{1-\lambda}{2} & \text{se } 0 \leq x < \frac{1}{2} \\ \frac{\lambda-1}{2} & \text{se } \frac{1}{2} \leq x < 1 \end{cases}$$

também podemos escrever $f(x)$ como

$$f\left(\sum_{p=1}^{\infty} S_p \frac{1}{2^p}\right) = \frac{1-\lambda}{2}(1 - 2S_1) \tag{5.9}$$

e portanto (5.3) fica

$$y_m^{\infty}(x) = \frac{1}{2} - \frac{1-\lambda}{\lambda}\sum_{p=1}^{\infty} \lambda^p S_{-p+1} \tag{5.10}$$

De (5.10) vemos que o atrator está contido no intervalo $|y| \leq \frac{1}{2}$ e $y_m^{\infty}(x)$ independe de x. Se $\lambda = \frac{1}{2}$ então $y_m^{\infty}(x) = \frac{1}{2} - \alpha$, com $\alpha = \sum_{p=1}^{\infty} S_{-p+1}\frac{1}{2^p}$. Como α pode assumir qualquer valor em $[0,1)$ vemos que o atrator é $[0,1) \times (-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}]$. Se $0 < \lambda < \frac{1}{2}$ aparecem lacunas em todas as escalas no domínio $|y| \leq \frac{1}{2}$ e o atrator se torna fractal. Para ver isto, tome por exemplo $\lambda = \frac{1}{3}$, e note que α será um número em base 3 onde o dígito 2 nunca aparece na sua representação.

Vamos relacionar $y_m^{\infty}(x)$ dado em (5.1) com y_n dado em (1.2.b). Para n arbitrariamente grande, mas fixo, podemos desprezar o termo $\lambda^n y_0$ na eq.(1.2.b), que será reescrita como

$$y_n = \sum_{l=0}^{n-1} \lambda^l f\left(\frac{2^n x_0}{2^{l+1}}\right) \qquad n \text{ grande} \tag{5.11}$$

Para identificar (5.11) com (5.1) devemos determinar x e m tais que $2^n x_0 = x + m$. Como $x \in [0,1)$, vemos que dado x_0, x e m estão determinados. Podemos interpretar m como uma pré-história para x: a representação binária de m nos permite decidir em cada passo para o passado qual das duas possibilidades que levam ao presente devemos escolher de modo que no n-ésimo passo para trás obtemos x_0. Isto se vê comparando (5.1) e (5.11) e lembrando que $f(x+1) = f(x)$. Por exemplo, dado $x_0 = 0.2$ quero x e m tais que x retorne para x_0 em 8 passos: $2^8 \times 0.2 = 51.2 = 51 + 0.2 \Rightarrow m = 51 = (00110011)_2 \Rightarrow x_{-1} = \frac{0.2}{2} + \frac{1}{2} = 0.6$ $x_{-2} = \frac{0.6}{2} + \frac{1}{2} = 0.8$; $x_{-3} = \frac{0.8}{2} + 0 = 0.4$; $x_{-4} = \frac{0.4}{2} + 0 = 0.2$; $x_{-5} = \frac{0.2}{2} + \frac{1}{2} = 0.6$; $x_{-6} = \frac{0.8}{2} + \frac{1}{2} = 0.8$; $x_{-7} = \frac{0.8}{2} + 0 = 0.4$; $x_{-8} = \frac{0.4}{2} + 0 = 0.2 = x_0$.

Com esta equivalência entre (5.11) e (5.1) vemos que $(0, y_\infty(0))$ e todos os p-ciclos estão no conjunto de curvas que definem o atrator

Aplicando (3.1) para o mapa de K.Y. vemos de imediato que os autovalores de Λ_x são 2 e λ e portanto os expoentes de Lyapunov são $\lambda_1 = \log 2$ e $\lambda_2 = \log \lambda$ de onde concluímos que há dependência nas condições iniciais, isto é, o atrator é estranho.

As conjeturas de Kaplan-Yorke e Mori dadas em (4.3) e (4.4) dão para o nosso atrator

$$D_I = 1 + \frac{\log 2}{|\log \lambda|}$$

excluído $\lambda = \frac{1}{2}$ onde não se aplica (4.3). Para a conjetura de Mori, $D_F = 1 + \frac{\log 2}{|\log \lambda|}$ mesmo para $\lambda = \frac{1}{2}$, caso em que $D_F = 2$. Este resultado, se correto, mostraria que $\lambda = \frac{1}{2}$ é um caso bastante especial, já que para $\lambda < \frac{1}{2}$ ou $\lambda > \frac{1}{2}$ o atrator é fractal. Teríamos um atrator estranho, não fractal.

6. *Cálculo de alguns valores esperados sobre o atrator.*

Vamos considerar uma distribuição uniforme em x_0 e tomar $f(x) = -\sin 4\pi x$.

6.1 Valor esperado de y_n.

$$\langle y_n\rangle = \int_0^1 dx_0\{\lambda^n y_0 - \sum_{l=0}^{n-1}\lambda^l \sin 4\pi 2^{n-1-l}x_0\} = \lambda^n p_0 \qquad (6.1)$$

$$\langle y_\infty\rangle = 0 \quad 0<\lambda<1 \qquad (6.2)$$

6.2 Valor esperado de $y_n{}^2$

$$\langle y_n{}^2\rangle = \int_0^1 dx_0 \left(\lambda^n y_0 - \sum_{l=0}^{n-1}\lambda^l \sin 4\pi 2^{n-1-l}x_0\right)^2 =$$

$$= \lambda^{2n}y_0{}^2 + \frac{1}{2}\sum_{l_1=0}^{n-1}\sum_{l_2=0}^{n-1}\lambda^{l_1+l_2}\int_0^1 dx_0 \cos\left[4\pi 2^{n-1}(2^{-l_1}-2^{-l_2})x_0\right] =$$

$$= \lambda^{2n}y_0{}^2 + \frac{1}{2}\sum_{l=0}^{n-1}\lambda^{2l} = \lambda^{2n}y_0{}^2 + \frac{1}{2}\frac{1-\lambda^{2n}}{1-\lambda^2} \qquad (6.3)$$

de onde

$$\langle y_\infty{}^2\rangle = \frac{1}{2}\frac{1}{1-\lambda^2} \qquad (6.4)$$

6.3 Valor esperado de $y_n{}^p$, p inteiro positivo.

$$\langle y_n{}^p\rangle = \int_0^1 dx_0 \left(\lambda^n y_0 - \sum_{l=0}^{n-1}\lambda^l \sin 4\pi 2^{n-1-l}x_0\right)^p =$$

$$= \sum_{k=0}^{p}\binom{p}{k}(\lambda^n)^{p-k}\int_0^1 dx_0\left[-\sum_{l=0}^{n-1}\lambda^l \sin 4\pi 2^{n-1-l}x_0\right]^k \qquad (6.5)$$

Para prosseguir precisamos de uma fórmula para o produto de k senos. Se k par este se reduz a uma soma de cosenos, se k 'mpar a uma soma de senos que não contribuem na integração, assim só nos interessa k par.Deduzimos por indução que (k par),

$$\sin a_1 \cdots \sin a_k = \frac{1}{2^{k-1}}\sum_j \epsilon_j \cos(a_{k-1} \pm a_1 \pm a_2 \cdots \pm a_{k-2} \pm a_k) \qquad (6.6)$$

onde $\epsilon_j = (-1)^{\frac{k}{2}}\,\mathrm{sgn}(\prod_{j=1}^{k} a_j)$ em que $\mathrm{sgn}(a_j)$ está significando não o sinal propriamente de a_j, mas sim o *sinal* que precede a_j na eq.(6.6) e a soma em j é sobre todas as possíveis combinações de *sinal* de $a_1, a_2, a_3, \cdots a_{k-2}$ em (6.6). Com isto podemos efetuar a integração em (6.5) e obtemos

$$\langle {y_n}^p \rangle = \sum_{\substack{k=0\\(k\ par)}}^{[p]} \binom{p}{k} (\lambda^n y_0)^{p-k} \frac{1}{2^{k-1}} \sum_{l_1=0}^{n-1} \cdots \sum_{l_k=0}^{n-1}$$
$$\lambda^{l_1+\cdots+l_k} \sum_j \epsilon_j \delta(2^{n-l_{k-1}} \pm 2^{n-l_1} \pm \cdots \pm 2^{n-l_{k-2}} \pm 2^{n-l_k}) \tag{6.7}$$

onde $[p]$ é o maior par menor ou igual a p e $\epsilon_j = (-1)^{\frac{k}{2}}\mathrm{sgn}(\prod_{j=1}^{k} 2^{n-l_j})$,valendo as mesmas convenções que fizemos em (6.6). Desta expressão vemos que quando p é ímpar todos os termos vão conter λ^n e portanto

$$\lim_{n\to\infty} \langle {y_n}^p \rangle = \langle {y_\infty}^p \rangle = 0 \qquad \text{se } p \text{ ímpar.} \tag{6.8}$$

Quando p é par, para $n \to \infty$ só sobra o termo $k = p$ na primeira somatória,

$$\langle {y_\infty}^p \rangle = \frac{1}{2^{p-1}} \sum_{l_1=0}^{n-1} \cdots \sum_{l_p=0}^{n-1} \sum_j \epsilon_j \delta(2^{n-l_{k-1}} \pm \cdots) \tag{6.9}$$

Fazendo $p = 2$ evidentemente recuperamos (6.4) e para $p = 4$ temos

$$\langle {y_\infty}^4 \rangle = \frac{3}{4} \frac{1}{(1-\lambda^2)^2} - \frac{3}{8} \frac{1}{1-\lambda^4} - \frac{3}{2} \frac{\lambda^5}{1-\lambda^4} \tag{6.10}$$

Para n finito,

$$\langle {y_n}^4 \rangle = \lambda^{4n} {y_0}^4 + 3\lambda^{2n} {y_0}^2 + \frac{3}{4} \left(\frac{1-\lambda^{2n}}{1-\lambda^2} \right)^2 \tag{6.11}$$
$$- \frac{3}{8} \frac{1-\lambda^{4n}}{1-\lambda^4} - \frac{3}{2} \lambda^5 \frac{1-\lambda^{(n-2)4}}{1-\lambda^4}$$

Graham [4] tratou o caso em que há ruído externo obtendo $\langle y_n \rangle$ e $\langle {y_n}^2 \rangle$, também quando $n \to \infty$, em termos dos coeficientes de Fourier de $f(x)$, particularizando para o nosso exemplo e fazendo o limite quando o ruído vai a zero vemos que os nossos resultados concordam. Jensen e Oberman [2] obtiveram por um processo indireto usando integrais de trajetória, os valores esperados $\langle {y_n}^2 \rangle$ e $\langle {y_n}^4 \rangle$, também para $n \to \infty$. Eles concideraram $f(x) = \sin(2\pi x)$. Observando (6.5) vemos que se p é par então os valores esperados tomando $f(x) = \pm \sin(2\pi m x)$ para todo m inteiro coincidem. Os nossos resultados para $p = 2$ e $p = 4$ coincidem com os de Jensen e Oberman. Para valores esperados envolvendo também a variável x, temos

$$\begin{aligned} \langle {x_n}^q {y_n}^p \rangle &= \int_0^1 dx_0 \Big\{ 2^n x_0 (\mathrm{mod}\, 1) \Big\}^q \Big\{ \lambda^n y_0 - \sum_{l=0}^{n-1} \lambda^l \sin 4\pi 2^{n-1-l} x_0 \Big\}^p \\ &= \sum_{k=0}^{2^n - 1} \int_{k\, 2^{-n}}^{(k+1) 2^{-n}} dx_0 \, (2^n x_0 - k)^q \Big\{ \lambda^n y_0 - \sum_{l=0}^{n-1} \lambda^l \sin 4\pi 2^{n-1-l} x_0 \Big\}^p \end{aligned} \tag{6.12}$$

p, q inteiros positivos. Estas integrais podem ser resolvidas usando a mesma técnica dos casos anteriores.

Referências.

[1] Kaplan, J.L., Yorke, J.A., in *Functional Differential Equations and Approximations of Fixed Points, Lect. Notes in Math.* **730**, 204 (1979).

[2] Jensen, R.V., Oberman, C.R., *Phys.Rev.Lett.* **46**, 1547 (1981).

[3] Mayer, D., Roepstorff,G., *J.Stat.Phys.* **31**, 309 (1983).

s[4] Graham, R., *Phys.Rev.* **A28**, 1679 (1983).

[5] Arnold, V.I., Avez, A., *Ergodic Problems of Classical Mechanics*, (Benjamin, New York, 1968) p.8.

[6] Graham, R., *Z.Physik* **B59**, 75 (1985).

[7] Milnor, J., *Commun.Math.Phys.* **99**, 177 (1985).

[8] Eckmann, J.-P., *Rev.Mod.Phys.* **53**, 643 (1981).

[9] Eckmann, J.-P., Ruelle, D., *Rev.Mod.Phys.* 57, 617 (1985).

[10] Lichtenberg, , Liberman , *Regular and Stochastic Motion* (Springer-Verlag, Berlin, 1985).

[11] Oseledec, V.I.,*Trans.Moscow Math.Soc.* 19, 197 (1968).

[12] Farmer, J.D., Ott, E., Yorke, J.A., *Physica* 7D,153 (1983).

[13] Mori, H., *Prog.Theor.Phys.* 63, 3 (1980).

CAPÍTULO 2 - Quantização à la Graham.

1.Função de Wigner [1].

Para um sistema quântico unidimensional representado pelo estado puro $|\psi\rangle$, suposto normalizado, definimos a função de Wigner por:

$$\mathrm{W}(q,p) = \frac{1}{\pi\hbar}\int dx\, \mathrm{e}^{-\frac{2i}{\hbar}px}\langle q+x|\psi\rangle\langle\psi|q-x\rangle \tag{1.1}$$

Sempre que não forem especificados os limites de integração, considere $-\infty$ e $+\infty$.

A função de Wigner tem a notável propriedade de sua projeção em p fornecer a densidade de probabilidade em q e reciprocamente:

$$\int dp\mathrm{W}(q,p) = |\langle q|\psi\rangle|^2 \tag{1.2}$$

$$\int dq\mathrm{W}(q,p) = |\langle p|\psi\rangle|^2 \tag{1.3}$$

Note que $\mathrm{W}(q,p)$ pode assumir valores negativos, não sendo correto considerá-la uma distribuição de probabilidades no espaço de fase. Entretanto suas projeções em q e p são sempre positivas e constituem distribuições de probabilidade separadamente para p e q, respectivamente.

Outras propriedades importantes de $\mathrm{W}(q,p)$ são:

$$\int dq \int dp\mathrm{W}(q,p) = \langle\psi|\psi\rangle = 1 \tag{1.4}$$

$$\int dq \int dp\mathrm{W}^2(q,p) = \frac{1}{h} \tag{1.5}$$

$$|\mathrm{W}(q,p)| \leq \frac{2}{h} \tag{1.6}$$

$$\mathrm{W}(q,p) \to h\mathrm{W}^2(q,p) \quad \text{para} \quad h \to 0 \tag{1.7}$$

Para uma prova de (1.6) e (1.7) veja [2].

Suponha agora que o espectro de autovalores do operador $\hat{q}$ seja limitado. Neste caso os autovalores do momento conjugado $\hat{p}$ serão quantizados. Se $\hat{q}$ corresponde a rotação no espaço real, $-\pi < q \leq \pi$, teremos $p_n = n\hbar, \quad -\infty < n < \infty$.

Na situação acima, temos que modificar a definição de $W(q,p)$ dada em (1.1). De acordo com Berry [1], basta considerar

$$W(q,p_n) = \frac{1}{\pi\hbar}\int_{-\frac{\pi}{2}}^{+\frac{\pi}{2}} dx\, e^{-2nix}\langle q+x|\psi\rangle\langle\psi|q-x\rangle \tag{1.8}$$

As propriedades já mencionadas da função de Wigner continuam valendo desde que efetuemos as integrações em q no intervalo $(-\pi,+\pi]$ e substituamos $\int dp$ por $\hbar\sum\limits_{p_n}$.

2. Quantização de mapas Hamiltonianos.

Mapas Hamiltonianos são mapas que preservam a área, são inversíveis e podem ser colocados na forma

$$q_{n+1} = q_n + \frac{\partial H}{\partial p_{n+1}}(q_n, p_{n+1}) \tag{2.1.a}$$

$$p_{n+1} = p_n - \frac{\partial H}{\partial q_n}(q_n, p_{n+1}) \tag{2.1.b}$$

Um cálculo direto mostra que

$$\frac{\partial(q_{n+1},p_{n+1})}{\partial(q_n,p_n)} = 1 \qquad \text{sempre que} \qquad 1 + \frac{\partial^2 H(q_n,p_{n+1})}{\partial q_n \partial p_{n+1}} \neq 0 \tag{2.1.c}$$

Assim, (2.1.c) é uma condição suficiente para a preservação de áreas.

A inversibilidade significa ser possível colocar (2.1) na forma

$$q_n = f(q_{n+1}, p_{n+1}) \tag{2.1.a'}$$

$$p_n = g(q_{n+1}, p_{n+1}) \tag{2.1.b'}$$

Definindo a ação clássica

$$S(q_{n+1}, q_n) = -H(q_n, p_{n+1}) + p_{n+1}(q_{n+1} - q_n) \tag{2.2}$$

podemos reescrever as equações de Hamilton (2.1) como

$$p_{n+1} = \frac{\partial S}{\partial q_{n+1}}(q_{n+1}, q_n) \tag{2.3.a}$$

$$p_n = -\frac{\partial S}{\partial q_n}(q_{n+1}, q_n) \tag{2.3.b}$$

Definimos parênteses de Poisson neste contexto por

$$\{p_{n+1}, q_{n+1}\} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial p_{n+1}}{\partial p_n}\frac{\partial q_{n+1}}{\partial q_n} - \frac{\partial p_{n+1}}{\partial q_n}\frac{\partial q_{n+1}}{\partial p_n} \tag{2.4}$$

Partindo de (2.1.a) , (2.1.b) e supondo válida a condição (2.1.c) um cálculo direto mostra que $\{p_{n+1}, q_{n+1}\} = 1$ e portanto temos conservação dos parênteses de Poisson, pois

$$\{p_{n+1}, q_{n+1}\} = 1 = \{p_n, q_n\} \tag{2.5}$$

Um mapa quântico Hamiltoniano é descrito por

$$|\psi_{n+1}\rangle = U|\psi_n\rangle \tag{2.6}$$

onde

$$U\,U^\dagger = U^\dagger\,U = 1 \tag{2.7}$$

Para definir um mapa quântico precisamos especificar o operador unitário U, o que em representação-q significa conhecer o núcleo

$$K(q|q') = \langle q|U|q'\rangle \tag{2.8}$$

Dado um mapa Hamiltoniano clássico (2.1) queremos associar a ele um mapa quântico (2.6). É bem sabido que sistemas quânticos distintos podem ter o mesmo limite clássico e portanto a associação que se pretende estabelecer não é única, mas uma possível.

A condição de unitariedade de U pode ser escrita em termos de $K(q|q')$ como

$$\int d\tilde{q}\, K^*(q|\tilde{q})K(q'|\tilde{q}) = \delta(q-q') \tag{2.9.a}$$

$$\int d\tilde{q}\, K^*(\tilde{q}|q)K(\tilde{q}|q') = \delta(q-q') \tag{2.9.b}$$

O limite clássico será o correto se tivermos assintoticamente para $\hbar \to 0$

$$K(q|q') \approx \exp\left[\frac{i}{\hbar}S(q,q')\right] \qquad \text{para } \hbar \to 0 \tag{2.10}$$

onde $S(q,q')$ é a ação clássica definida em (2.2).

Graham [3] propõe o núcleo

$$K(q|q') = \int \frac{dp}{2\pi\hbar}\left(1+\frac{\partial^2 H(q',p)}{\partial q'\partial p}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(p(q-q') - H(q',p)\right)\right\} \tag{2.11}$$

para uma classe de Hamiltonianos de forma geral

$$H(q_n, p_{n+1}) = \frac{A}{2}p_{n+1}^2 + B(q_n)p_{n+1} + C(q_n) \tag{2.12}$$

com $\frac{\partial B}{\partial q_n}(q_n) \neq -1$, para que a condição (2.1.c) seja satisfeita. Usando (2.11) e (2.12) se mostra por um cálculo direto que a unitariedade é satisfeita. Usando que

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\left(i(ax^2+bx)\right) = \sqrt{\frac{\pi i}{a}}\exp\left(-\frac{ib^2}{4a}\right)$$

fazemos a integral em p em (2.11) obtendo

$$K(q|q') = \left(\frac{1+\partial B/\partial q'}{2\pi i\hbar A}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(\frac{1}{2A}\left(q-q'-B(q')\right)^2 - C(q')\right)\right\} \tag{2.13}$$

de onde vemos que (2.10) está satisfeita com

$$S(q|q') = \frac{1}{2A}\left[q-q'-B(q')\right]^2 - C(q') \tag{2.14}$$

A equação (2.14), deve, evidentemente, ser consistente com a definição da ação dada em (2.2). De fato, substituindo o Hamiltoniano dado em (2.12) e p_{n+1} calculado por (2.3.a) no segundo membro de (2.2) reobtemos (2.14).

As equações (2.6), (2.8), (2.11) e (2.12) definem portanto um mapa Hamiltoniano quantizado cujo limite clássico é dado por (2.1.a), (2.1.b).

3. *Extensão para mapas globalmente dissipativos.*

Como definido no cap 1, um mapa é dito globalmente dissipativo se houver preservação local de áreas mas não inversibilidade. A conservação local permite aplicar os resultados da seção anterior, mas precisamos de um ingrediente a mais no processo de quantização que se relacione com a contração global, devido a não inversibilidade, do espaço de fase. Vamos apresentar este princípio novo, devido a Graham [4,5], para a quantização de sistemas globalmente dissipativos através de um caso concreto, que é o mapa de K.Y. para $\lambda = \frac{1}{2}$.

$$q_{n+1} = 2q_n \pmod 1 \tag{3.1.a}$$

$$p_{n+1} = \frac{1}{2}p_n - g'(q_n) \tag{3.1.b}$$

$$g(q_n + \frac{1}{2}) = g(q_n) \tag{3.1.c}$$

$$0 \leq q_n < 1 \qquad p_n \in R \qquad n \in N$$

O sistema (3.1) pode ser escrito na forma (2.1) com

$$\mathrm{H}(q_n, p_{n+1}) = \begin{cases} q_n p_{n+1} + 2g(q_n), & \text{se } q_n \in [0, \frac{1}{2}) \\ \\ (q_n - 1)p_{n+1} + 2g(q_n), & \text{se } q_n \in [\frac{1}{2}, 1) \end{cases} \tag{3.2}$$

Podemos condensar (3.2) em $\mathrm{H}(q_n, p_{n+1}) = (2q_n(\mathrm{mod} 1) - q_n)p_{n+1} + 2g(q_n)$ mas, mesmo assim, note que não temos um Hamiltoniano globalmente definido. Vamos aplicar o método da seção 2 separadamente para $q_n \in [0, \frac{1}{2})$ e $q_n \in [\frac{1}{2}, 1)$:

$$\begin{aligned} \mathrm{K}(q, q') &= \sqrt{2}\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}\left(p(q - q') - q'p - 2g(q')\right)\right\} \\ &= \sqrt{2}\exp\left\{-\frac{2i}{\hbar}g(q')\right\}\delta(q - 2q') \qquad q' \in [0, \frac{1}{2}) \end{aligned} \tag{3.3}$$

$$\mathrm{K}(q,q') = \sqrt{2}\exp\{-\frac{2i}{\hbar}g(q')\}\,\delta(q-2q'+1) \qquad q'\in[\frac{1}{2},1) \tag{3.4}$$

Agora, se uma medida da coordenada q_{n+1} no instante $n+1$ forneceu um valor bem definido em $[0,1)$ não há como saber se a pré-imagem q_n estava no subintervalo $[0,\frac{1}{2})$ ou $[\frac{1}{2},1)$. Assim, o estado do sistema no instante $n+1$, $|\psi_{n+1}\rangle$, não pode ser um estado puro, mas uma mistura estatística entre as duas possibilidades para a pré-imagem q_n. Estas duas contribuições para $\psi_{n+1}(q_{n+1})$ não podem sofrer interferência o que se consegue fazendo a superposição com um fator de fase $\exp(i\delta_n)$ sendo δ_n uma fase aleatória. Em cada aplicação do mapa tudo de repete e novas fases δ_n vão sendo introduzidas, mas sem correlação alguma com as fases anteriores δ_m, $m<n$. Assim, o núcleo $\mathrm{K}(q_{n+1},q_n)$ fica *globalmente* definido como

$$\begin{aligned}\mathrm{K}(q_{n+1},q_n) =&\sqrt{2}\exp\{\frac{-2i}{\hbar}g(q_n)\}\Big[\theta(\frac{1}{2}-q_n)\delta(q_{n+1}-2q_n)\\&+\exp(i\delta_n)\;\theta(q_n-\frac{1}{2})\,\delta(q_{n+1}-2q_n+1)\Big]\end{aligned} \tag{3.5}$$

Temos portanto o mapa quântico

$$\psi_{n+1}(q) = \int_0^1 dq'\,\mathrm{K}(q|q')\psi_n(q') \qquad q\in[0,1) \tag{3.6}$$

associado ao mapa globalmente dissipativo (3.1).

Neste ponto é conveniente introduzir a matriz densidade ρ_n

$$\langle q|\rho_n|q'\rangle = \overline{\psi_n(q)\psi_n^*(q')} \tag{3.7}$$

onde a barra significa uma média sobre as fases aleatórias, δ_m, $m<n$. Com a definição (3.7) o mapa quântico (3.6) se escreve

$$\begin{aligned}\langle q|\rho_{n+1}|q'\rangle =& \frac{1}{2}\exp\left[-\frac{2i}{\hbar}(g(\frac{q}{2})-g(\frac{q'}{2}))\right]\\&\times(\langle\frac{q}{2}|\rho_n|\frac{q'}{2}\rangle+\langle\frac{q+1}{2}|\rho_n|\frac{q'+1}{2}\rangle)\\&q\in[0,1) \qquad q'\in[0,1)\end{aligned} \tag{3.8}$$

4. Solução do modelo de K.Y. quantizado

Por iteração a partir de (3.8) e usando a propriedade (3.1.c) de $g(q_n)$ um cálculo direto mostra que

$$\langle q|\rho_{n+k}|q'\rangle = 2^{-n}\sum_{m=0}^{2^n-1}\exp\left[-\frac{2i}{\hbar}\sum_{l=1}^{n}\left(g(\frac{q+m}{2^l})-g(\frac{q'+m}{2^l})\right)\right]$$
$$\times\langle\frac{q+m}{2^n}|\rho_k|\frac{q'+m}{2^n}\rangle \qquad (4.1)$$
$$q\in[0,1) \qquad q'\in[0,1)$$

Partindo do estado inicial $k=0$ e fazendo $q=q'$ em (4.1), obtemos

$$\langle q|\rho_n|q\rangle = 2^{-n}\sum_{m=0}^{2^n-1}\langle\frac{q+m}{2^n}|\rho_0|\frac{q+m}{2^n}\rangle \qquad (4.2)$$

Vemos assim que a evolução dos termos diagonais da matriz densidade independe dos termos não diagonais e obedece a equação clássica de movimento (1.1.6). Fazendo $n\to\infty$ em (4.2) e supondo que o estado inicial $|\psi_0\rangle$ estava normalizado, obtemos

$$\langle q|\rho_\infty|q\rangle = 1 \qquad (4.3)$$

Tomando o limite $n\to\infty$ e em seguida $k\to\infty$ em (4.1) e usando (4.3), obtemos

$$\langle q|\rho_\infty|q'\rangle = \lim_{n\to\infty}2^{-n}\sum_{m=0}^{2^n-1}\exp\left\{-\frac{2i}{\hbar}\sum_{l=1}^{n}\left(g(\frac{q+m}{2^l})-g(\frac{q+m}{2^l})\right)\right\} \quad (4.4)$$

Podemos atribuir a m o mesmo significado dinâmico do cap 1 (pg 14) isto é, a representação binária de m contém a pré-história das trajetórias. Como em (4.4) não aparecem termos cruzados em m, podemos dizer que trajetórias com diferentes valores de m não se interferem.

É conveniente, neste ponto, introduzirmos a função de Wigner

$$W_n(q,p) = \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dx}{2\pi\hbar}\exp\left(-\frac{ipx}{\hbar}\right)\langle q+\frac{x}{2}|\rho_n|q-\frac{x}{2}\rangle$$

o que nos permite, *formalmente*, reescrever as equações (4.1) e (4.4) como

$$W_{n+k}(q,p) = 2^{-n} \sum_{m=0}^{2^n-1} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{2\pi} \exp(-ipx)$$
$$\times \langle \frac{(q+\frac{1}{2}\hbar x)(\mathrm{mod}\,1)+m}{2^n} | \rho_k | \frac{(q-\frac{1}{2}\hbar x)(\mathrm{mod}\,1)+m}{2^n} \rangle$$
$$\times \exp\left\{ -\frac{2i}{\hbar} \sum_{l=1}^{n} \left[g\left(\frac{(q+\frac{1}{2}\hbar x) \bmod 1 + m}{2^l} \right) - g\left(\frac{(q-\frac{1}{2}\hbar x) \bmod 1 + m}{2^l} \right) \right] \right\} \tag{4.5}$$

$$W_\infty(q,p) = \lim_{n\to\infty} 2^{-n} \sum_{m=0}^{2^n-1} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{2\pi} \exp(-ipx)$$
$$\times \exp\left\{ -\frac{2i}{\hbar} \sum_{l=1}^{n} \left[g\left(\frac{(q+\frac{1}{2}\hbar x) \bmod 1 + m}{2^l} \right) - g\left(\frac{(q-\frac{1}{2}\hbar x) \bmod 1 + m}{2^l} \right) \right] \right\} \tag{4.6}$$

Vamos rescrever a eq.(4.6) numa forma mais adequada. Para isto fazemos a mudança de variável $\frac{1}{2}\hbar x \to x$, substituímos $\int_{-\infty}^{+\infty} dx\, f(x)$ por $\sum_{l=-\infty}^{+\infty}$ $\int_0^1 dx f(x+l)$ e usamos a fórmula de soma de Poisson, obtendo finalmente

$$W_\infty(q,p) = \lim_{n\to+\infty} 2^{-n} \sum_{m=0}^{2^n-1} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \delta(p-\pi l\hbar) \int_0^1 dx \exp\left\{ -2\pi i x l \right.$$
$$\left. -\frac{2i}{\hbar} \sum_{k=1}^{n} \left[g\left(\frac{(q+x)(\mathrm{mod}\,1)+m}{2^k} \right) - g\left(\frac{(q-x)(\mathrm{mod}\,1)+m}{2^k} \right) \right] \right\} \tag{4.7}$$

Obtemos a distribuição de probabilidades em p integrando (4.7) em q

$$W_\infty(p) = \lim_{n\to+\infty} 2^{-n} \sum_{m=0}^{2^n-1} \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \delta(p-\pi l\hbar) \int_0^1 \int_0^1 dq dx \exp\left\{ -2\pi i x l \right.$$

$$-\frac{2i}{\hbar}\sum_{k=1}^{n}\left[g\left(\frac{(q+x)(\mathrm{mod}\,1)+m}{2^k}\right)-g\left(\frac{(q-x)(\mathrm{mod}\,1)+m}{2^k}\right)\right]\Bigg\} \tag{4.8}$$

Combinando as integrais em q e x numa única integração e notando que os termos com l ímpar se cancelam, obtemos

$$W_\infty(p)=\sum_{l=-\infty}^{+\infty}\delta(p-2\pi\hbar l)P_l \tag{4.9}$$

onde

$$P_l=\lim_{n\to\infty}\sum_{m=0}^{2^n-1}\left|\int_0^1 dq\exp\left\{-2\pi iql-\frac{2i}{\hbar}\sum_{k=1}^{n}g\left(\frac{q+m}{2^k}\right)\right\}\right|^2 \tag{4.10}$$

O limite clássico de (4.6) é obtido fazendo $\lim_{\hbar\to 0}W_\infty(p,q)$, isto é devemos tomar o limite $n\to\infty$ primeiro e $\hbar\to 0$ depois. Invertendo *formalmente* estes limites em (4.6), expandindo g até o termo de primeira ordem em $\hbar$ e fazendo a integral em x obtemos,

$$\lim_{\hbar\to 0}W_\infty(q,p)=\lim_{n\to\infty}2^{-n}\sum_{m=0}^{2^n-1}\delta(p-F_m(q)) \tag{4.11}$$

$$F_m(q)=-\sum_{l=0}^{\infty}2^{-l}g'\left(\frac{q+m}{2^{l+1}}\right) \tag{4.12}$$

Este resultado formal concorda com a densidade de probabilidade obtida rigorosamente no cap 1. O *formal* está na inversão dos limites $\hbar\to 0$ e $n\to\infty$ e na introdução do limite $n\to\infty$ dentro da integral.

O próximo termo na expansão de g é o de terceira ordem em $\hbar$, pois os de segunda se cancelam. Até esta ordem ainda é possível fazer a integral em x, e obtemos, ao invés de funções delta como em (4.11), funções de Airy

$$W_{S.C.\infty}(q,p)=\lim_{n\to\infty}2^{-n}\sum_{m=0}^{2^n-1}(\Delta_m(q))^{-\frac{1}{3}}\mathrm{Ai}\left\{\frac{p-F_m(q)}{(\Delta_m(q))^{1/3}}\right\} \tag{4.13}$$

com $F_m(q)$ dado em (4.12) e

$$\Delta_m(q) = \hbar^2 \sum_{k=1}^{\infty} 2^{-3k-2} g''' \left(\frac{q+m}{2^k}\right) \tag{4.14}$$

Do resultado semi-clássico (4.13) vemos que cada ramo $p = F_m(q)$ do atrator clássico está sofrendo uma delocalização de largura proporcional a $|\Delta_m(q)|^{\frac{1}{3}}$ e portanto proporcional a $\hbar^{2/3}$. Esta delocalizacão vai fazer com que ramos muito próximos no atrator clássico se confundam e portanto será perdida uma característica típica de atratores fractais que é a auto-similaridade. No domínio totalmente quântico, eqs.(4.9) e (4.10), não faz sentido se falar em atrator.

5. *Resultados adicionais*

A função de Wigner para um sistema onde o espectro de $\hat{q}$ é limitado não pode ser definida do modo usual, mas (como vimos na seção 1) por (1.8) no caso de $-\pi \leq q \leq \pi$. Assim, a função de Wigner deveria ter sido definida por

$$\begin{aligned} W_n(q, p_l) &= \int_0^1 \frac{dx}{2\pi\hbar} \exp(-2\pi i l x) \overline{\langle q + \frac{x}{2} | \psi_n \rangle \langle \psi_n | q - \frac{x}{2} \rangle} \\ &= \int_0^1 \frac{dx}{2\pi\hbar} \exp(-2\pi i l x) \langle q + \frac{x}{2} | \rho_n | \langle q - \frac{x}{2} \rangle \end{aligned} \tag{5.1}$$

$$p_l = 2\pi\hbar l$$

A eq.(4.6) seria substituída por

$$\begin{aligned} W_\infty(q, p_l) = \lim_{n\to\infty} 2^{-n} \sum_{m=0}^{2^n-1} \int_0^1 \frac{dx}{2\pi\hbar} \exp(-2\pi i l x) \\ \times \exp\left\{-\frac{2i}{\hbar} \sum_{l=1}^{n} \left[g\left(\frac{(q+\frac{x}{2})(\text{mod}\,1) + m}{2^l}\right) - g\left(\frac{(q-\frac{x}{2})(\text{mod}\,1) + m}{2^l}\right)\right]\right\} \end{aligned} \tag{5.2}$$

O valor esperado de uma função do momento é calculado por

$$\langle\psi_n|f(\hat{p})|\psi_n\rangle = \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \langle\psi_n|p_l\rangle f(p_l)\langle p_l|\psi_n\rangle$$

$$= \sum_{l=-\infty}^{+\infty} f(p_l)|\langle\psi_n|p_l\rangle|^2 = \sum_{l=-\infty}^{+\infty} f(p_l)\int_0^1 dq \mathrm{W}_n(q,p_l) \qquad (5.3)$$

Na última passagem usamos a propriedade (1.3) da função de Wigner.

Usando (5.2) e (5.3) obtemos

$$\langle f(\hat{p})\rangle = \lim_{n\to\infty} 2^{-n}\sum_{m=0}^{2^n-1}\sum_{l=-\infty}^{+\infty} f(2\pi\hbar l)\int_0^1 dq\int_0^1 \frac{dx}{2\pi\hbar}\exp(-2\pi i l x)$$

$$\times\exp\left\{-\frac{2i}{\hbar}\sum_{l=1}^{n}\left[g\left(\frac{(q+\frac{x}{2})(\mathrm{mod}\,1)+m}{2^l}\right)-g\left(\frac{(q-\frac{x}{2})(\mathrm{mod}\,1)+m}{2^l}\right)\right]\right\} \qquad (5.4)$$

Refazendo o cálculo, substituindo diretamente $\mathrm{W}_\infty(p)$ dado em (4.8) em $\int_{-\infty}^{+\infty} f(p)\mathrm{W}(p)dp$, obtemos o mesmo resultado. Assim, concluímos que a função de Wigner de Graham pode ser usada para o cálculo de valores esperados de funções do momento.

No caso geral, o valor esperado de um operador $\hat{\mathrm{A}}$ é calculado por $\langle\psi_n|\hat{\mathrm{A}}|\psi_n\rangle$. Suponha que $\hat{\mathrm{A}}$ tenha espectro discreto sendo A_m os autovalores e $|m\rangle$ as autofunções correspondentes, então

$$\hat{\mathrm{A}} = \sum_m |m\rangle\mathrm{A}_m\langle m| \qquad (5.5)$$

e

$$\langle\psi_n|\hat{\mathrm{A}}|\psi_n\rangle = \sum_m \mathrm{A}_m\langle\psi_n|m\rangle\langle m|\psi_n\rangle \qquad (5.6)$$

mas

$$\langle\psi_n|m\rangle\langle m|\psi_n\rangle = \int dq_1\int dq_2\langle m|q_1\rangle\langle q_1|\psi_n\rangle\langle\psi_n|q_2\rangle\langle q_2|m\rangle$$

$$= \int\int dq\,dQ\langle m|q+\frac{Q}{2}\rangle\langle q+\frac{Q}{2}|\psi_n\rangle\langle\psi_n|q-\frac{Q}{2}\rangle\langle q-\frac{Q}{2}|m\rangle$$

$$= \frac{1}{2\pi\hbar}\int\int\int dp\,dq\,dQ\,\mathrm{W}(q,p)\langle m|q+\frac{Q}{2}\rangle\langle q-\frac{Q}{2}|m\rangle \exp\left(\frac{ipQ}{\hbar}\right)$$

$$= \int\int dpdq\mathrm{W}(q,p)\left(|m\rangle\langle m|\right)(q,p) \qquad (5.7)$$

onde

$$\left(|m\rangle\langle m|\right)(q,p) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int dQ\langle m|q+\frac{Q}{2}\rangle\langle q-\frac{Q}{2}|m\rangle \exp\left(\frac{ipQ}{\hbar}\right) \qquad (5.8)$$

são elementos diagonais da matriz de Moyal, ou função de Wigner cruzada [6]. Finalmente

$$\langle\psi_n|\hat{\mathrm{A}}|\psi_n\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar}\int\int dp\,dq\mathrm{W}(q,p)\mathrm{A}(q,p) \qquad (5.9)$$

onde

$$\mathrm{A}(q,p) = 2\pi\hbar\sum_m \mathrm{A}_m\left(|m\rangle\langle m|\right)(q,p) \qquad (5.10)$$

é a transformada de Weyl do operador $\hat{\mathrm{A}}$. No caso particular em que $|m\rangle$ são autofunções do momento angular e $\hat{\mathrm{A}}$ é uma função do momento angular, recuperamos (5.3) e (5.4). Entretanto, para funções gerais de $\hat{q}$ e $\hat{p}$, $f(\hat{q},\hat{p})$ não há nenhum motivo aparente para (5.7) com $\mathrm{W}_\infty(q,p_l)$ dado em (5.2) ser o mesmo que o resultado obtido com $\mathrm{W}_\infty(q,p)$ dado em (4.6).

Se transladarmos o mapa para um intervalo simétrico com relação à origem, isto é

$$(q_{n+1}+\frac{1}{2}) = (2q_n+\frac{1}{2}) \pmod 1 \qquad (5.11.a)$$

$$p_{n+1} = \frac{1}{2}p_n - g'(q_n) \qquad (5.11.b)$$

$$q_n \in [-\frac{1}{2},\frac{1}{2}) \qquad p_n \in R$$

obteremos com a função de Wigner (5.1) o mesmo limite clássico formal obtido por Graham. Isso é devido ao fato de que, fazendo a mudança de variáveis $\frac{x}{\hbar} = x$ em (5.1) ficamos com

$$\mathrm{W}_n(q,p_l) = \int_{-1/2\hbar}^{+1/2\hbar}\frac{dx'}{2\pi}\exp\left(-ip_l x\right)\langle q+\frac{x\hbar}{2}|\rho_n|q-\frac{x\hbar}{2}\rangle \qquad (5.12)$$

No limite $\hbar \to 0$ o intervalo de integração se torna $(-\infty, +\infty)$ e recaímos no cálculo feito por Graham para a obtenção de (4.11) a partir de (4.6).

Em [1], Berry analisa o comportamento semiclássico da função de Wigner, especialmente para sistemas integráveis. No caso de sistemas integráveis unidimensionais, ele chega à conclusão de que há apenas três tipos diferentes de comportamento semiclássico, conforme se verifique a coalescência de dois, três ou quatro pontos estacionários (isto é, os que ocorrem na análise da forma da função através do princípio de fase estacionária), e os relaciona à teoria das catástrofes de Thom [7]. No caso da coalescência de dois pontos, a função se comporta como uma função de Airy nas vizinhanças do toro, atingindo um valor máximo da ordem de $\hbar^{-2/3}$ (com franjas de dimensões da ordem de $\hbar^{2/3}$, e comportamento oscilatório ou exponencial, dependendo do ponto e da direção segundo a qual nos afastamos do toro), correspondendo à catástrofe *fold*. No caso da coalescência de três pontos estacionários o comportamento é da forma da função de Pearcey [8] com valor máximo da ordem de $\hbar^{-3/4}$, correspondendo à catástrofe *cusp*. No caso de quatro pontos (inflexões da curva suposta convexa e lisa $H(q,p) = E$ que define o toro), temos a correspondência com a catástrofe *swallow-tail*, e a função de Wigner assume o valor máximo da ordem de $\hbar^{-4/5}$.

Podemos observar na função de Wigner (4.6) o comportamento semiclássico correspondente à catástrofe *fold* conforme nos revela (4.13) e (4.14). A eq.(4.13) é obtida de (4.6) expandindo g até a terceira ordem em $\hbar$ e fazendo uma mudança de variável na integração em x que force o aparecimento da função de Airy. Esta mudança de variável só funciona se $\Delta_m(q) \neq 0$. No caso de $\Delta_m(q) = 0$ para algum $q \in [0,1)$ e algum m fixo, a expressão semiclássica obtida por Graham parece não se aplicar.

Uma expressão semiclássica é obtida neste caso fazendo a expansão de g em (4.6) até o termo de quinta ordem em $\hbar$, já que os de quarta ordem se cancelam, e tomando formalmente o limite $n \to \infty$ dentro da integral.

$$W_{S.C.\infty}(q,p) = \lim_{n\to\infty} 2^{-n} \sum_{m=0}^{2^n-1} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dx}{2\pi} \exp(-ipx)$$

$$\times \exp\left\{ -\frac{2i}{\hbar} \sum_{l=1}^{\infty} \left[\frac{\hbar x}{2^l} g'\left(\frac{q+m}{2^l}\right) + \frac{2}{5!} \left(\frac{\hbar x}{2^{l+1}}\right)^5 g^v\left(\frac{q+m}{2^l}\right) \right] \right\}$$

$$= \exp\left\{-i\left[x\left(p+\sum_{l=1}^{\infty} g'\left(\frac{q+m}{2^l}\right)\frac{1}{2^{l-1}}\right)+\frac{1}{5!}\frac{\hbar^4 x^5}{2^{5l+3}}\sum_{l=1}^{\infty} g^v\left(\frac{q+m}{2^l}\right)\right]\right\} \tag{5.13}$$

Fazendo a mudança de variável $x' = x(\Gamma_m(q))^{1/5}$ onde

$$\Gamma_m(q) = \frac{\hbar^4}{2^{5l+3}}\sum_{l=1}^{\infty} g^v\left(\frac{q+m}{2^l}\right) \tag{5.14}$$

ficamos com

$$\frac{\hbar^{-4/5}}{(\Gamma_m(q))^{1/5}}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{dx}{2\pi}\exp -i\left[\frac{x(p-\mathrm{F}_m(q))}{(\Gamma(q))^{1/5}}+\frac{1}{5!}x^5\right] \tag{5.15}$$

Assim, desde que a função $B(\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \exp\{-i[x\lambda + \frac{1}{5!}\lambda^5\}]$ seja limitada, vemos que (5.15) atinge um máximo da ordem de $\hbar^{-4/5}$. Entretanto para que esse comportamento, deduzido acima para um m fixo (a região correspondente sendo o análogo dos toros nos sistemas integráveis tratados por Berry) se manifestasse globalmente na função de Wigner (5.13), seria necessário que a função

$$\Delta(\xi) = \hbar^2\sum_{k=1}^{\infty} 2^{-3k-2} g'''\left(\frac{\xi}{2^k}\right)$$

tivesse zeros em um subconjunto de $\{\xi_0, \xi_0+1, \xi_0+2, \cdots, \xi_0+2^n-1\}$, cujo número de pontos aumentasse proporcionalmente a 2^n, quando $n \to \infty$ onde ξ_0 é um zero de $\Delta(\xi)$. Esse fato se deve à existência da *média* $\lim_{n\to\infty} 2^{-n}\sum_{m=0}^{2^n-1}$ na função de Wigner (5.13). Devido a forma da função $\Delta(\xi)$ essa hipótese nos parece extremamente improvável, mas pretendemos testá-la numericamente. Antecipando esse teste, a conclusão seria de que a catástrofe *swallow-tail*, que é genérica para sistemas integráveis em um espaço cilíndrico, não se manifestaria neste modelo. A catástrofe *cusp* não aparece devido ao fato dos termos de ordem par em $\hbar$ se cancelarem na expansão.

Referências

[1] Berry, M.V., *Phil.Trans.Roy.Soc.* **287**, 237 (1977).

[2] Baker, G.A. Jr., *Phys.Rev.* **109**, 2198 (1958).

[3] Graham, R., *Z.Physik* B59, 75 (1985).

[4] Graham, R., *Phys.Lett.* **99A**, 131 (1983).

[5] Graham, R., *Phys.Rep.* **103**, 143 (1984).

[6] Ozorio de almeida, A., *Rev.Bras.Fis.* **14**, 62 (1984).

[7] Thom, R., *Structural stability and morphogenesis*, (Benjamin, Reading,Mass., 1975).

[8] Pearcey, T., *Phil.Mag.* **37**, 311 (1946).

CAPÍTULO 3 - Quantização em termos de Observáveis

1. Operadores L_z *e* $\hat{\varphi}$*. Princípio de incerteza generalizado*

Se A e B são operadores autoadjuntos, prova-se a partir da desigualdade de Schwartz que

$$\langle A\psi|A\psi\rangle\langle B\psi|B\psi\rangle \geq \frac{1}{4}\,|\langle\psi|[A,B]|\psi\rangle|^2 \tag{1.1}$$

Se $[A,B] = -i\hbar I$ então, para todo $|\psi\rangle$ temos

$$\Delta A\,\Delta B \geq \frac{1}{2}\hbar \tag{1.2}$$

onde

$$\Delta A = \sqrt{\langle(A - \langle A\rangle)^2\rangle} \qquad \langle A\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle \tag{1.3}$$

Como consequência imediata destas relações temos a relação de incerteza $\Delta x\,\Delta p_x \geq \frac{1}{2}\hbar$. Uma aplicação despreocupada de (1.2) para $A = \varphi$, $B = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi} \equiv L_z$ poderia nos levar a relação de incerteza para a variável angular φ, $\Delta\varphi\Delta L_z \geq \frac{1}{2}\hbar$, que é evidentemente incorreta. De fato, se ψ é autofunção de L_z, por exemplo $e^{in\varphi}$, então $\Delta L_z = 0$ e como não faz sentido uma incerteza maior que 2π na posição de uma partícula sobre o círculo, teremos uma contradição. O motivo matemático para não podermos aplicar diretamente (1.2) para φ e L_z está no fato de $L_z = -i\hbar\frac{d}{d\varphi}$ ser autoadjunto, em relação ao produto escalar $\langle f|g\rangle = \int_{-\pi}^{\pi} f^*(\varphi)g(\varphi)d\varphi$, apenas para uma classe restrita de funções: as funções absolutamente contínuas em $[-\pi,\pi]$ com derivadas em $L_2(-\pi,\pi)$ que satisfazem $\psi(\pi) = \psi(-\pi)$. A última condição se obtém integrando $\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi\psi^*(\varphi)(-i\hbar\frac{d}{d\varphi})\psi(\varphi)$ por partes e exigindo que $\langle\psi|L_z|\psi\rangle^* = \langle\psi|L_z|\psi\rangle$. Se $\psi(\varphi)$ está no domínio de L_z, $\varphi\psi(\varphi)$ não está e portanto $-i\hbar\frac{d}{d\varphi}$ não pode representar L_z quando atuando sobre $\varphi\psi(\varphi)$.

Uma forma de resolver este problema de domínio foi proposta por Judge e Lewis [1,2] e consiste em manter a definição de L_z mas definir o operador $\hat{\varphi}$ não como multiplicação pelo ângulo usual, $-\infty < \varphi < \infty$, mas:

$$\hat{\varphi} = \varphi - 2\pi\sum_{n=0}^{\infty}\theta(\varphi - (2n+1)\pi) + 2\pi\sum_{n=0}^{\infty}\theta(-\varphi - (2n+1)\pi) \tag{1.4}$$

onde θ é a função degrau unitário. Na definição de produto escalar vamos considerar os limites de integração $-\pi^+$ e π^+ para não termos problemas com a definição de $\theta(x)$ em $x = 0$.

De (1.4) obtemos diretamente o comutador

$$[\hat{\varphi}, L_z] = i\hbar\{1 - 2\pi \sum_{-\infty}^{+\infty} \delta(\varphi - (2n+1)\pi)\} \tag{1.5}$$

Para chegar numa relação de incerteza para φ e L_z precisamos ainda redefinir $\langle\varphi\rangle$ e $\Delta\varphi$ para uma distribuição de probabilidades no círculo. Na reta usualmente definimos $\langle x\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x f(x)dx$ e $(\Delta x)^2 = \int_{-\infty}^{+\infty}(x - \langle x\rangle)^2 f(x)dx$. Considere a função $V(a) = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 f(x+a)dx$. É fácil mostrar que $V(a)$ assume um valor mínimo $V(\bar{a})$ para $\bar{a} = \langle x\rangle$ e ainda $V(\bar{a} = \langle x\rangle) = (\Delta\varphi)^2$ [3]. Assim, temos duas formas equivalentes de definir $\langle x\rangle$ e $(\Delta x)^2$ na reta. Para uma distribuição $f(\varphi)$ no círculo estas duas formas claramente dão resultados diferentes, já que pela definição usual, $(\Delta\varphi)^2 = \int_{-\pi}^{\pi}(\varphi - \langle\varphi\rangle)^2 d\varphi$, depende da origem , isto é, é afetada pela mudança de variável $\varphi \to \varphi + \gamma$, enquanto a segunda definição não depende da origem. Assim, seguindo Judge [2] vamos definir:

i) $\langle\varphi\rangle$ é o valor de a, $-\pi \leq a \leq \pi$, que minimiza a função,

$$V(a) = \int_{-\pi}^{\pi} \varphi^2 f(\varphi + a)d\varphi$$

ii) $(\Delta\varphi)^2$ é o mínimo de $V(a)$, $-\pi \leq a \leq \pi$, isto é,

$$(\Delta\varphi)^2 = V(a = \langle\varphi\rangle).$$

Esta definição de $\Delta\varphi$ tem as seguintes propriedades:

a) $\Delta\varphi$ independe da origem.

b) $\Delta\varphi = 0$ para $f(\varphi) = \delta(\varphi)$.

c) $\Delta\varphi = \pi/\sqrt{3}$ para a distribuição uniforme.

Retomando o nosso problema de obter uma relação de incerteza para φ e L_z, definimos

$$V(a) = \int_{-\pi}^{\pi} \psi^*(\varphi + a)\varphi^2\psi(\varphi + a)d\varphi \tag{1.6}$$

O mínimo de $V(a)$ em $[-\pi,\pi]$ será o $(\Delta\varphi)^2$ e ocorrerá em $\gamma = \langle\varphi\rangle$. ΔL_z continuará sendo definido pelo modo usual

$$(\Delta L_z)^2 = \int_{-\pi}^{\pi} \psi^*(\varphi)(-i\hbar\frac{d}{d\varphi} - \langle L_z\rangle)^2\psi(\varphi)d\varphi \tag{1.7}$$

onde

$$\langle L_z\rangle = \int_{-\pi}^{\pi} \psi^*(\varphi)(-i\hbar\frac{d}{d\varphi})\psi(\varphi)d\varphi \tag{1.8}$$

$$\psi(\varphi+2\pi) = \psi(\varphi)$$

É fácil mostrar que (1.7) e (1.8) são invariantes pela mudança de coordenada $\varphi \to \varphi+\gamma$, assim podemos reescrever (1.7) como

$$(\Delta L_z)^2 = \langle\psi_\gamma|(L_z - \langle L_z\rangle)^2|\psi_\gamma\rangle \tag{1.9}$$

com

$$\psi_\gamma(\varphi) \equiv \psi(\varphi+\gamma) \tag{1.10}$$

do mesmo modo

$$(\Delta\varphi)^2 = V(\gamma) = \langle\psi_\gamma|\varphi^2|\psi_\gamma\rangle \tag{1.11}$$

Usando (1.9) , (1.10) e (1.11), a eq.(1.1) com $A = \hat{\varphi} - \langle\hat{\varphi}\rangle$, $B = L_z - \langle L_z\rangle$ nos dá

$$\begin{aligned}(\Delta L_z)^2(\Delta\varphi)^2 &= (\Delta L_z)^2 V(\gamma) = \langle\psi_\gamma|(L_z - \langle L_z\rangle)^2|\psi_\gamma\rangle\langle\psi_\gamma|\varphi^2|\psi_\gamma\rangle \\ &\geq \frac{1}{4}|\langle\psi_\gamma|\,[\hat{\varphi}, L_z]\,|\psi_\gamma\rangle|^2\end{aligned} \tag{1.12}$$

Substituindo (1.5) em (1.12) temos

$$(\Delta L_z)^2(\Delta\varphi)^2 \geq \frac{1}{4}\hbar^2\{1 - 2\pi\psi^*(\pi+\gamma)\psi(\pi-\gamma)\}^2 \tag{1.13}$$

A partir de (1.13) chega-se em

$$(\Delta L_z)\frac{(\Delta\varphi)}{1 - 3\frac{(\Delta\varphi)^2}{\pi^2}} \geq 0.16\hbar \tag{1.14}$$

Esta última etapa da dedução da relação de incerteza usa uma série de propriedades da função V(a) e pode ser vista no apêndice do artigo do Judge [2]. Segundo Judge, deve ser possível por métodos funcionais mais sofisticados melhorar (1.14) trocando o 0.16 por $\frac{1}{2}$. De (1.14) vemos que $\Delta L_* \to 0 \Rightarrow \Delta\varphi \to \frac{\pi}{\sqrt{3}}$ que corresponde a distribuição uniforme em φ e não temos mais a contradição apontada no início da seção.

2. Quantização do mapa de Kaplan-Yorke.

Seja o mapa de K.Y.,

$$q_{n+1} = 2q_n \pmod 1 \tag{2.1.a}$$

$$p_{n+1} = \lambda q_n - g'(q_n) \tag{2.1.b}$$

$$g(q_n + \frac{1}{2}) = g(q_n) \tag{2.1.c}$$

$$q_n \in [0,1) \qquad -\infty < p_n < \infty \qquad 0 < \lambda < 1$$

Nosso objetivo é definir operadores $\hat{q}_n$ e $\hat{p}_n$ de modo que faça sentido uma versão quântica de (2.1) diretamente em termos destes observáveis,

$$\hat{q}_{n+1} = 2\hat{q}_n \tag{2.2.a}$$

$$\hat{p}_{n+1} = \lambda\hat{p}_n - g'(\hat{q}_n) \tag{2.2.b}$$

com g uma função real satisfazendo (2.1.c) e estendida para toda reta por $g(x+1) = g(x)$.

A variável q no modelo clássico é definida módulo 1 podendo portanto ser interpretada como uma variável angular. Interpretando p como o momento angular associado a q estaremos nas mesmas condições da seção anterior e adaptando (1.4) para o intervalo de definição de q, definimos

$$\hat{q}_n = q_n - \sum_{m=1}^{\infty} \theta(q_n - m) + \sum_{m=0}^{\infty} \theta(-q_n + m) \tag{2.3}$$

$$\hat{p}_0 = -i\hbar\frac{d}{dq_0} \tag{2.4}$$

(2.4) e (2.2.b) definem $\hat{p}_n$ para todo n.

O domínio de $\hat{p}_0$ como operador autoadjunto em relação ao produto escalar $\langle f|g\rangle = \int_{0+}^{1^+} f^*(q_0)g(q_0)dq_0$ consiste das funções absolutamente contínuas em $[0,1]$ com derivadas em $L_2(-\pi,\pi)$ que satisfazem $\psi(0)=\psi(1)$. Se $\psi(q_0)$ está no domínio, $\hat{q}_0\psi(q_0)$,e em geral $f(\hat{q}_0)\psi(q_0)$, também estarão. Note que (2.3) corresponde a tomar $q_n(\mathrm{mod}1)$. Aplicando (2.2) n vezes e usando as definições (2.3) e (2.4) temos como solução do mapa de K.Y. quantizado:

$$\hat{q}_n = 2^n q_0 \quad (\mathrm{mod}\ 1) \tag{2.5.a}$$

$$\hat{p}_n = \lambda^n \hat{p}_0 - \sum_{l=0}^{n-1} \lambda^l g'(2^{n-1-l}q_0) \tag{2.5.b}$$

$$\hat{p}_0 = -i\hbar\frac{d}{dq_0} \tag{2.5.c}$$

3. Cálculo de valores esperados. Limite clássico.

Vamos obter o valor esperado de funções de $\hat{q}_n$ e $\hat{p}_n$ em relação ao estado $\langle q_0|\psi\rangle = 1 \equiv \langle q_0|1\rangle$ que corresponde à distribuição uniforme $P_0(q_0)=1$

3.1 Valor esperado de $\hat{p}_n$

$$\begin{aligned}\langle\hat{p}_n\rangle &= \langle 1\,|\lambda^n\hat{p}_0 - \sum_{l=0}^{n-1}\lambda^l \sin(4\pi\, 2^{n-1-l}\, q_0)|\, 1\rangle \\ &= -\int_0^1 dq_0 \sum_{l=0}^{n-1}\lambda^l \sin(4\pi\, 2^{n-1-l}\, q_0) = 0 \end{aligned}\tag{3.1}$$

Classicamente obtivemos $\langle p_n\rangle = \lambda^n p_0$.Como $\langle 1|\hat{p}_0|1\rangle = 0$ devemos tomar $p_0 = 0$ na expressão clássica para comparar com o limite clássico de $\langle\hat{p}_n\rangle$.Vemos que $\langle\hat{p}_n\rangle$ tem o limite clássico correto independente de fazer $\hbar\to 0$.

3.2 Valor esperado de $\hat{p}_n^2$.

$$
\begin{aligned}
\langle \hat{p}_n^2 \rangle &= \langle 1 | \lambda^{2n} - \lambda^n \hat{p}_0 \sum_{l=0}^{n-1} \lambda^l \sin(4\pi\, 2^{n-1-l}\, q_0) \\
&\quad - \sum_{l=0}^{n-1} \lambda^l \sin(4\pi\, 2^{n-1-l}\, q_0)\, \lambda^n \hat{p}_0 + \Big(\sum_{l=0}^{n-1} \lambda^l \sin(4\pi\, 2^{n-1-l}\, q_0)\Big)^2 | 1 \rangle \\
&= -\lambda^n \frac{\hbar}{i} \int_0^1 \sum_{l=0}^{n-1} \lambda^l 4\pi\, 2^{n-1-l} \cos(4\pi\, 2^{n-1-l}\, q_0)\, dq_0 \\
&\quad + \int_0^1 \sum_{l_1=0}^{n-1} \sum_{l_2=0}^{n-1} \lambda^{l_1+l_2} \sin(4\pi 2^{n-1-l_1} q_0) \sin(4\pi 2^{n-1-l_2} q_0)\, dq_0 \\
&= \frac{1}{2} \sum_{l_1=0}^{n-1} \sum_{l_2=0}^{n-1} \lambda^{l_1+l_2} \int_0^1 \Big\{ \cos\big[4\pi(2^{n-1-l_1} - 2^{n-1-l_2}) q_0\big] \\
&\quad - \cos\big[4\pi(2^{n-1-l_1} + 2^{n-1-l_2}) q_0\big] \Big\}\, dq_0 \\
&= \sum_{l_1=0}^{n-1} \lambda^{2l_1} = \frac{1}{2} \frac{1-\lambda^{2n}}{1-\lambda^2}
\end{aligned} \tag{3.2}
$$

Fazendo $y_0 = 0$ na expressão clássica (1.6.3) vemos que $\langle \hat{p}_n^2 \rangle$ tem o limite clássico correto independente de $\hbar \to 0$

3.3 Valores esperados de $\hat{p}_n^3$ e $\hat{p}_n^5$

Por um cálculo direto, como em (3.2), obtemos

$$
\langle \hat{p}_n^3 \rangle = \langle \hat{p}_n^5 \rangle = 0 \tag{3.3}
$$

Da expressão clássica geral (1.6.7) vemos que se p for ímpar todos os termos da somatória em k vão conter potências de y_0 e portanto para $y_0 = 0$ teremos $\langle {y_n}^p \rangle = 0$,p ´mpar. Assim (3.3) têm o limite clássico correto, independente de $\hbar \to 0$.

3.4 Valor esperado de $\hat{p}_n^4$

$$\langle \hat{p}_n^4 \rangle = \langle 1 | \{\lambda^n \hat{p}_0 - \mathrm{S}(q_0)\}^3 \{-\mathrm{S}(q_0)\} | 1 \rangle$$

$$= \langle 1 | \{\lambda^{3n}\hat{p}_0^3 - \lambda^{2n}\hat{p}_0^2\,\mathrm{S}(q_0) - \lambda^n \hat{p}_0 \mathrm{S}(q_0)\lambda^n \hat{p}_0 + \lambda^n \hat{p}_0 \mathrm{S}^2(q_0)$$

$$- \mathrm{S}(q_0)\lambda^{2n}\hat{p}_0^2 + \mathrm{S}(q_0)\lambda^n \hat{p}_0 \mathrm{S}(q_0) + \mathrm{S}^2(q_0)\lambda^n \hat{p}_0 - \mathrm{S}^3(q_0)\}\{-\mathrm{S}(q_0)\} | 1 \rangle$$

$$= \lambda^{2n}\langle 1 | \hat{p}_0^2\,\mathrm{S}^2(q_0) | 1 \rangle + \lambda^{2n}\langle 1 | \hat{p}_0 \mathrm{S}(q_0)\hat{p}_0 \mathrm{S}(q_0) | 1 \rangle - \lambda^n \langle 1 | \hat{p}_0 \mathrm{S}^3(q_0) | 1 \rangle$$

$$+ \lambda^{2n}\langle 1 | \mathrm{S}(q_0)\hat{p}_0^2\,\mathrm{S}(q_0) | 1 \rangle - \lambda^n \langle 1 | \mathrm{S}(q_0)\hat{p}_0 \mathrm{S}^2(q_0) | 1 \rangle$$

$$- \lambda^n \langle 1 | \mathrm{S}^2(q_0)\hat{p}_0 \mathrm{S}(q_0) | 1 \rangle + \langle 1 | \mathrm{S}^4(q_0) | 1 \rangle$$

$$= -\lambda^{2n}\hbar^2 \int_0^1 \{4\,\mathrm{S}(q_0)\mathrm{S}''(q_0) + 3\,\mathrm{S}'^2(q_0)\}\, dq_0$$

$$+ i\hbar\lambda^n \int_0^1 6\,\mathrm{S}^2(q_0)\mathrm{S}'(q_0)\, dq_0 + \int_0^1 \mathrm{S}^4(q_0)\, dq_0 \qquad (3.4)$$

onde

$$\mathrm{S}(q_0) = \sum_{l=0}^{n-1} \lambda^l \sin(4\pi\, 2^{n-1-l}\, q_0)$$

Precisamos calcular cada uma das integrais em (3.4). Vamos detalhar um pouco o cálculo de duas delas para mostrar que tipos de dificuldades aparecem.

$$\int_0^1 \mathrm{S}^2(q_0)\mathrm{S}'(q_0) dq_0 = \sum_{l_1=0}^{n-1}\sum_{l_2=0}^{n-1}\sum_{l_3=0}^{n-1} \lambda^{l_1+l_2+l_3} \int_0^1 dq_0\, 4\pi 2^{n-l_3-1}$$

$$\sin(4\pi\, 2^{n-1-l_1} q_0)\sin(4\pi\, 2^{n-1-l_2} q_0)\cos(4\pi\, 2^{n-1-l_3} q_0)$$

$$= \frac{4\pi}{2^2}\sum_{l_1=0}^{n-1}\sum_{l_2=0}^{n-1}\sum_{l_3=0}^{n-1} \lambda^{l_1+l_2+l_3}\, 2^{n-l_3-1} \int_0^1 dq_0$$

$$\cos 4\pi(2^{n-1-l_1} - 2^{n-1-l_2} + 2^{n-1-l_3})q_0 + \cos 4\pi(2^{n-1-l_1} - 2^{n-1-l_2} - 2^{n-1-l_3})q_0$$

$$- \cos 4\pi(2^{n-1-l_1} + 2^{n-1-l_2} + 2^{n-1-l_3})q_0 \; - \cos 4\pi(2^{n-1-l_1} + 2^{n-1-l_2} - 2^{n-1-l_3})q_0 \tag{3.5}$$

Apenas os termos onde o argumento do coseno for zero vão contribuir, assim basta determinar as possíveis combinações de l_1, l_2, l_3 que satisfazem esta condição e efetuar o triplo somatório vinculado. Por exemplo:

$$2^{n-1-l_1} - 2^{n-1-l_2} + 2^{n-1-l_3} = 0$$

admite como única família de solucões: $l_3 = l_1$; $l_2 = l_1 - 1$. Estabelecidos os vínculos, (3.5) se reduz a efetuar

$$\sum_{l_1=0}^{n-1} \lambda^{3l_1-1}\, 2^{n-l_1-1} + \sum_{l_2=0}^{n-1} \lambda^{3l_2-1}\, 2^{n-l_2-1} - \sum_{l_2=0}^{n-1} \lambda^{3l_2-1}\, 2^{n-l_2}$$

que é zero, o que era de se esperar, pois, caso contrário, (3.4) seria um número complexo.

Na última integral em (3.4) podemos exprimir o fato de só cosenos com argumentos nulos contribuirem (com o valor 1) através de deltas de Kronecker. Chegamos em

$$\frac{1}{8}\sum_{l_1=0}^{n-1} \cdots \sum_{l_4=0}^{n-1} \lambda^{l_1+l_2+l_3+l_4}\, \delta(2^{n-l_3} + 2^{n-l_1} + 2^{n-l_2} + 2^{n-l_4})$$

$$- \delta(2^{n-l_3} + 2^{n-l_1} + 2^{n-l_2} - 2^{n-l_4}) - \delta(2^{n-l_3} + 2^{n-l_1} - 2^{n-l_2} + 2^{n-l_4})$$

$$+ \delta(2^{n-l_3} + 2^{n-l_1} - 2^{n-l_2} - 2^{n-l_4}) - \delta(2^{n-l_3} - 2^{n-l_1} + 2^{n-l_2} + 2^{n-l_4})$$

$$+ \delta(2^{n-l_3} - 2^{n-l_1} + 2^{n-l_2} - 2^{n-l_4}) + \delta(2^{n-l_3} - 2^{n-l_1} - 2^{n-l_2} + 2^{n-l_4})$$

$$- \delta(2^{n-l_3} - 2^{n-l_1} - 2^{n-l_2} - 2^{n-l_4}) \tag{3.6}$$

A discusão de todos os deltas que aparecem acima se resume em resolver dois problemas: determinar as relações entre os inteiros positivos a, b, c, d que satisfazem a uma das equações

$$\begin{aligned} i) \quad & 2^a = 2^b + 2^c + 2^d \\ ii) \quad & 2^a + 2^b = 2^c + 2^d \end{aligned}$$

Fixado um ordenamento $a \geq b \geq c \geq d$ as soluções únicas para estas equações são:

$$\begin{aligned} i) \quad & c = d \quad b = d + 1 \quad a = d + 2 \\ ii) \quad & a = c \quad b = d \end{aligned}$$

Com estes vínculos a somatória em (3.6) fica

$$\frac{1}{8}\,3\Big\{2\sum_{l_1=0}^{n-1}\sum_{l_3=0}^{n-1}\lambda^{2l_1+l_3} - \sum_{l_1=0}^{n-1}\lambda^{4l_1}\Big\} - \frac{1}{8}\,4\Big\{3\sum_{l_4=0}^{n-3}\lambda^{4l_4+5}\Big\}$$

$$= \frac{3}{4}\left(\frac{1-\lambda^{2n}}{1-\lambda^2}\right)^2 - \frac{3}{8}\,\frac{1-\lambda^{4n}}{1-\lambda^4} - \frac{3}{2}\,\lambda^5\,\frac{1-\lambda^{4(n-2)}}{1-\lambda^4}$$

Pelo mesmo método obtemos as duas integrais que faltam em (3.4) e finalmente chegamos em

$$\begin{aligned} \langle \hat{p}_n^4 \rangle = \hbar^2 \lambda^{2n} \pi^2\, 2^{2n+1}\, \frac{1-(\frac{\lambda}{2})^{2n}}{1-(\frac{\lambda}{2})^2} + \frac{3}{4}\left(\frac{1-\lambda^{2n}}{1-\lambda^2}\right)^2 \\ - \frac{3}{8}\,\frac{1-\lambda^{4n}}{1-\lambda^4} - \frac{3}{2}\,\lambda^5\,\frac{1-\lambda^{4(n-2)}}{1-\lambda^4} \end{aligned} \tag{3.7}$$

Temos o limite clássico,

$$\lim_{\hbar\to 0}\langle \hat{p}_n^4 \rangle = \frac{3}{4}\left(\frac{1-\lambda^{2n}}{1-\lambda^2}\right)^2 - \frac{3}{8}\frac{1-\lambda^{4n}}{1-\lambda^4} - \frac{3}{2}\lambda^5\frac{1-\lambda^{4(n-2)}}{1-\lambda^4} \tag{3.8}$$

que concorda com o resultado clássico (1.6.11) fazendo $y_0 = 0$

De (3.7) vemos que

$$\lim_{n\to\infty}\lim_{\hbar\to 0}\langle\hat{p}_n^4\rangle = \lim_{\hbar\to 0}\lim_{n\to\infty}\langle\hat{p}_n^4\rangle$$
$$= \frac{3}{4}\frac{1}{(1-\lambda^2)^2} - \frac{3}{8}\frac{1}{1-\lambda^4} - \frac{3}{2}\lambda^6\frac{1}{1-\lambda^4} \qquad (3.9)$$

ou seja, os limites $n\to\infty$ e $\hbar\to 0$ comutam rigorosamente.

3.5 Limite clássico de $\langle\hat{p}_n^r\rangle$ r inteiro positivo.

$$\lim_{\hbar\to 0}\langle\hat{p}_n^r\rangle = \lim_{\hbar\to 0}\langle 1|\left(-i\hbar\lambda^n\frac{d}{dx} - \sum_{l=0}^{n-1}\lambda^l\sin(4\pi\, 2^{n-1-l}\, q_0)\right)^r|1\rangle$$
$$= (-1)^r\int_0^1 dq_0\Big\{\sum_{l_1=0}^{n-1}\cdots\sum_{l_r=0}^{n-1}\lambda^{l_1+\cdots+l_r}\sin 4\pi 2^{n-1-l_1}\, q_0\cdots$$
$$\cdots\sin 4\pi 2^{n-1-l_r}\, q_0\Big\} \qquad (3.10)$$

Se r é ímpar cada um dos produtos de senos em (3.10) se reduz a soma de senos e portanto

$$\lim_{\hbar\to 0}\langle\hat{p}_n^r\rangle = 0 \quad \text{se } r \text{ ímpar} \qquad (3.8)$$

Se r par temos

$$\lim_{\hbar\to 0}\langle\hat{p}_n^r\rangle = \sum_{l_1=0}^{n-1}\cdots\sum_{l_r=0}^{n-1}\frac{1}{2^{r-1}}\lambda^{l_1+\cdots+l_r}\sum_{(comb.\pm)}$$
$$\epsilon_{l_1\cdots l_r}\,\delta(2^{n-l_{r-1}}\pm 2^{n-l_1}\pm\cdots\pm 2^{n-l_{r-2}}\pm 2^{n-l_r}) \qquad (3.11)$$

onde

$$\epsilon_{l_1\cdots l_r} = (-1)^{\frac{r}{2}}\times(\text{sinal do produto de } \pm \text{ no argumento do } \delta)$$

e a somatória é sobre todas as combinações de $\pm$ no argumento do delta de Kronecker.

Vemos então que $\lim_{\hbar\to 0}\langle\hat{p}_n^r\rangle$ bate com o clássico se fizermos $p_0 = 0$.

3.6 *Limite clássico de $\langle \hat{q}_n^l \, \hat{p}_n^r \rangle$ com l, r inteiros positivos.*

Como a equação para $\hat{q}_n$ é idêntica à clássica, os resultados da última seção nos permitem dizer que $\lim_{\hbar\to 0}\langle \hat{q}_n^l \, \hat{p}_n^r \rangle$ concorda com a expressão clássica (1.6.12) desde que $y_0 = 0$.

3.7 *Cálculo de valores esperados pela função de Wigner.*

Como vimos no capítulo 2 , valores esperados de funções do momento são calculados usando a função de Wigner por

$$\langle f(\hat{p})\rangle = \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dp\, f(p)\, \delta(p - 2\pi\hbar l)\mathrm{P}_l = \sum_{l=-\infty}^{+\infty} f(2\pi\hbar l)\, \mathrm{P}_l \tag{3.13}$$

onde

$$\mathrm{P}_l = \lim_{n\to\infty} \sum_{m=0}^{2^n-1} \left| \int_0^1 dq \exp\left[-2\pi q l - \frac{2i}{\hbar} \sum_{k=1}^{n} g\left(\frac{q+m}{2^k}\right)\right] \right|^2 \tag{3.14}$$

Fizemos uma análise numérica de (3.13), (3.14) tomando $f(p)$ como potências de p e $g'(q) = \sin 4\pi q$. Observamos resultados divergentes (em n e em l) em todos os casos analisados. Alguns dos resultados estão na tabela 1. ($\hbar = 1$)

Este fato deve estar ligado ao caráter formal do método de quantização pela função de Wigner, significando apenas que funções do tipo que usamos não estão no domínio de validade do método. Isto é, deve existir uma classe de observáveis cujos valores esperados são calculáveis através da função de Wigner, mas observáveis como $\hat{p}$, $\hat{p}^2$,$\hat{p}^3$,$\cdots$ não estão nesta classe. Repetindo a análise para funções do tipo $\exp\left(-\alpha p^2\right)$ constatamos uma rápida convergência (tanto em n como l) de (3.13).

$f(p)$	n	l	$\langle f(p) \rangle$
p^2	5	10	6.71
	5	20	3289.6
	5	30	3626.0
	10	10	5.97
	10	20	5891.9
	10	25	5916.8
p^3	5	10	0.004
	5	20	1648.9
	5	30	-37225.8
p^4	5	10	12469.8
	5	20	33194230.0
p^5	10	5	-0.19
	10	10	-4115.3

Tabela 1- Valores esperados calculados com a função de Wigner.

Refências

[1] Judge, D., Lewis, J.T., *Phys.Lett.* **5**, 190 (1963).

[2] Judge, D., *Nuovo Cim.* **31**, 332 (1964).

[3] Constantinescu, F., Magyari, E., *Problems in Quantum Mechanics*, (Pergamon Press, Oxford, 1974) p.77 .