

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
INSTITUTO DE FÍSICA

# Propriedades de Transporte em Nanocavidades:

Modelo da Versão Simetrizada do Mapa Padrão \*

Marla Heckler

Dissertação realizada sob a orientação da Prof.<sup>a</sup> Dr.<sup>a</sup> Sandra Denise Prado e apresentada ao Instituto de Física da UFRGS em preenchimento parcial dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Física.

Porto Alegre  
Julho de 2007

---

\*Trabalho financiado pela Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES)

Para meus pais Pedro e Felicita  
e para, meu marido, David.

# Agradecimentos

Em especial, a minha orientadora, Sandra Denise Prado, por compartilhar comigo seu conhecimento, tornando possível a realização deste trabalho e pela amizade, paciência e apoio durante esta etapa.

Aos membros da Banca Examinadora Giancarlo Q. Pellegrino, Marco Aurélio P. Idiart e Naira M. Balzaretto pelas sugestões e críticas que em muito contribuíram para este trabalho.

Ao David, meu marido, pelo apoio e compreensão nos momentos decisivos.

Aos meus pais e meus irmãos pelo apoio de sempre.

Aos meus colegas da sala M205, aos demais colegas do mestrado e aos colegas da graduação da FURG pela amizade, trocas de idéias e longas horas de estudo.

Aos amigos, professores e funcionários da FURG.

Aos professores, funcionários da biblioteca e da secretaria da pós-graduação do IF-UFRGS.

À CAPES pelo auxílio financeiro.

À sociedade Brasileira que custeia esta Universidade.

À Deus pela vida.

À todas as pessoas que, de alguma maneira, me ajudaram a chegar até aqui, MUITO OBRIGADA!

# Resumo

Propriedades de transporte em nanocavidades balísticas bidimensionais em regime de baixa densidade eletrônica e baixas temperaturas têm sido objetos de estudo desde os primórdios da década de 90. A falta de modelos teóricos que expliquem as estatísticas das flutuações quânticas na condutância eletrônica tornou-se um impedimento para maiores avanços na área. Mais recentemente, modelos matemáticos como mapas com aberturas têm sido propostos para simular as propriedades de transporte para sistemas caóticos. Mapas abertos podem modelar uma cavidade balística acoplada a reservatórios de elétrons e embora sejam sistemas abstratos do ponto de vista físico, eles são por outro lado, em geral, matematicamente tratáveis. Em nosso estudo, utilizamos uma versão simetrizada do mapa padrão de Chirikov com duas aberturas no espaço de fase para simular o efeito de bifurcação no transporte eletrônico em estruturas cujas dinâmicas clássicas podem ter regimes caótico ou regular. Classicamente, o mapa padrão descreve uma partícula movendo-se livremente sobre um círculo sujeita a uma perturbação periódica com intensidade  $\kappa$ . Dependendo do valor do parâmetro  $\kappa$ , o regime de movimento pode ser regular ou caótico. O *time delay* e a condutância quântica são obtidos através da matriz de espalhamento do mapa com canais de entrada e saída. Tiras são inseridas no mapa para simular estes canais. Nosso objetivo é modelar as flutuações do *time delay* e da condutância no regime semiclássico em termos de grandezas clássicas do mapa.

# Abstract

Transport properties in bidimensional ballistic nanocavities at low electronic density and low temperatures have been the subject of intense research for almost 15 years. Theoretical models that can fully explain the conductance fluctuations statistics are still missing and this is seen as a major problem for further development in this field. More recently quantum open maps have been suggested as good models to simulate transport properties in chaotic systems. Open maps can model general properties of ballistic cavities coupled to electronic reservoirs. Although they are not real physical systems, they are mathematically simpler. In our case, we have chosen a symmetrized version of the standard map also known as Chirikov map to with two openings in phase space to study periodic orbits bifurcation effects in transport properties like Wigner time delay and conductance. Classically, the standard map describes a particle moving freely on a circle under the effect of periodic perturbative force of intensity  $\kappa$ . The time delay and the quantum conductance are derived from the scattering matrix for the map with open channels. Vertical stripes in the map simulate these channels. Our main goal is to model the time delay and the conductance fluctuations in the semiclassical regime in terms of the classical quantities of the map.

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>7</b>
<b>2</b>	<b>Caos Clássico</b>	<b>13</b>
2.1	Caos Clássico . . . . .	14
2.2	Previsibilidade e Caos . . . . .	18
2.3	Sistemas Hamiltonianos . . . . .	19
2.4	Sistemas integráveis e simetrias . . . . .	20
2.5	Espaço de Fase . . . . .	22
2.6	Toros e trajetórias . . . . .	26
2.7	Mapa de Poincaré . . . . .	28
2.8	Estabilidade das órbitas periódicas . . . . .	30
2.9	Teorema KAM . . . . .	32
2.9.1	Teorema de Moser . . . . .	33
2.9.2	Teorema de Arnold . . . . .	35
<b>3</b>	<b>Caos Quântico</b>	<b>38</b>
3.1	Integrabilidade Quântica . . . . .	39
3.2	Caos em sistemas quânticos . . . . .	39
3.3	Limite semiclássico . . . . .	42
<b>4</b>	<b>Dinâmica do Mapa</b>	<b>47</b>
4.1	Sistema Fechado . . . . .	47
4.1.1	<i>Kicked rotator</i> . . . . .	47
4.2	Pontos Fixos . . . . .	52
4.2.1	Determinando os Pontos de período 1 . . . . .	53
4.3	Estabilidade das Órbitas . . . . .	56
4.3.1	Estabilidade das órbitas de período 1 . . . . .	56
4.3.2	Estabilidade das órbitas de período 2 . . . . .	58
4.4	Bifurcações . . . . .	60
4.5	Quantização do mapa . . . . .	62
4.6	Sistema Aberto . . . . .	67
<b>5</b>	<b>Time Delay</b>	<b>72</b>
5.1	Eisenbud-Wigner <i>Time Delay</i> . . . . .	72
5.2	Smith <i>time delay</i> . . . . .	74
5.3	Wigner-Smith <i>time delay</i> . . . . .	75
5.4	<i>Time delay</i> semiclássico para mapas . . . . .	76

## Sumário

---

5.5	Resultados numéricos . . . . .	80
5.5.1	Derivada da ação do mapa clássico . . . . .	81
5.5.2	Expansão de fase estacionária . . . . .	82
<b>6</b>	<b>Condutância</b>	<b>88</b>
6.1	Considerações Iniciais . . . . .	88
6.2	Comprimentos Característicos . . . . .	89
6.3	Regimes de Transporte . . . . .	92
6.4	Condutância e a Matriz Espalhamento . . . . .	94
6.5	Distribuições de Comprimentos e áreas . . . . .	99
6.6	Cálculo numérico . . . . .	101
6.7	Considerações finais . . . . .	106
<b>7</b>	<b>Conclusão</b>	<b>107</b>
	<b>Referências</b>	<b>110</b>

# Lista de Tabelas

2.1	Tabela com número de graus de liberdade e a dimensão do espaço de fase, da superfície de energia e do toro. Adaptada de [34]. . . .	23
4.1	Tabela de pontos fixos da versão simetrizada do mapa padrão de Chirikov. . . . .	56
4.2	Tabela com o traço de $J$ para pontos de período 1. . . . .	58
4.3	Tabela com o traço de $J$ para pontos de período 2. . . . .	60

# Lista de Figuras

1.1	Exemplo de como dois padrões de tempo divergem. . . . .	8
1.2	Um bilhar formado por uma só bola e mesa retangular sem caçapas não é caótico. Depois de quatro colisões com a borda, a trajetória da bola volta a ter a mesma direção. . . . .	9
1.3	Fixando uma segunda bola à mesa, obtemos o chamado bilhar de Sinai. A segunda bola desfocaliza as trajetórias da primeira, gerando um movimento irregular ou caótico. . . . .	9
1.4	Visão perspectiva de um ponto quântico, fabricado em um 2-DEG de uma heteroestrutura de GaAs/AlGaAs. Seu formato pode ser variado através dos eletrodos $G_1, G_2, \dots, G_5$ . A área do ponto é de aproximadamente $2\mu m^2$ . Elétrons podem entrar e sair através dos pontos de contato. . . . .	10
2.1	Pêndulo simples. . . . .	23
2.2	Espaço de fase para o pêndulo simples. Há três tipos de movimentos. i) curvas verdes: correspondem às elipses na região central são as librações - vão e voltam sobre si mesmas (oscilações), ii) curva azul: separatriz e iii) curvas vermelhas: correspondem as rotações. . . . .	24
2.3	Toro para o pêndulo simples com um grau de liberdade mostrando o comportamento das trajetórias próximas ao a) ponto fixo elíptico e b) ao ponto fixo hiperbólico. Adaptada de [33]. . . . .	26
2.4	Toro bidimensional para sistemas com dois graus de liberdade. Adaptada de [38]. . . . .	27
2.5	Seção de superfície. Fonte [37]. . . . .	30
2.6	toro 2-D de um sistema com dois graus de liberdade. . . . .	37
2.7	toro 3-D de um sistema com três graus de liberdade. . . . .	37
3.1	Previsões teóricas das NND para sistemas integráveis (linha pontilhada) e sistemas caóticos GOE (linha traço ponto) e GUE (linha tracejada) . . . . .	43
4.1	Espaço de fase do mapa (4.12); a) $\kappa = 0$ , b) $\kappa = 0.5$ , c) $\kappa = 2.5$ , d) $\kappa = 5$ , e) $\kappa = 6$ , f) $\kappa = 2\pi$ , g) $\kappa = 6.5$ e h) $\kappa = 7.5$ . . . . .	51
4.2	Bifurcações genéricas. Adaptada de [53]. . . . .	61
4.3	Diagrama de bifurcações para as órbitas de período 1 do mapa (4.12). . . . .	63
4.4	Diagrama de bifurcações para as órbitas de período 2 do mapa da equação (4.12). . . . .	63

## Lista de Figuras

---

4.5	Visão lateral e perspectiva da estrutura de um ponto quântico. Adaptada de [6]. . . . .	67
4.6	Espaço de fase com duas aberturas centradas nos pontos que bifurcam. Na faixa 1 pontos que escapam através da faixa 2 depois de uma (azul), duas (vermelho), três (verde) e quatro (magenta) iteradas do mapa (4.12). O interior do mapa é a parte do espaço de fase fora das faixas. . . . .	68
4.7	Espaço de fase com duas aberturas centradas nas órbitas isoladas. Na faixa 1 pontos que escapam através da faixa 2 depois de uma (azul), duas (vermelho), três (verde) e quatro (magenta) iteradas do mapa (4.12). Note que a faixa 1 é centrada em 0 e por isso é dividida em duas partes. . . . .	68
4.8	Sistema aberto: Faixas centradas nas bifurcações. . . . .	70
4.9	Sistema aberto: Faixas centradas órbitas isoladas. . . . .	70
5.1	Segundo momento <i>versus</i> $\kappa$ com $\Delta = 2.0, N = 597$ . A curva em verde (cruzes) para as faixas centradas nas bifurcações e a curva em vermelho (círculos) para as faixas centradas nas órbitas isoladas. . . . .	84
5.2	Logaritmo do segundo momento <i>versus</i> o logaritmo de $N$ com $\Delta = 2.0, \kappa = 2\pi$ e faixas centradas nas bifurcações. . . . .	85
5.3	Logaritmo do segundo momento <i>versus</i> o logaritmo de $N$ com $\Delta = 2.0, \kappa = 2\pi$ e faixas centradas nas órbitas isoladas. Gráfico mostrando a inclinação da reta. . . . .	86
5.4	Densidade <i>versus</i> $\tau$ para as faixas centradas nas bifurcações (linha cheia) e nas órbitas isoladas (linha tracejada) para $\kappa = 2\pi$ . . . . .	87
6.1	Regimes de transporte a) difusivo, b) quase balístico e c) balístico. Adaptada de [9]. . . . .	93
6.2	Cavidade balística típica acoplada a dois reservatórios caracterizados pelos potenciais químicos $\mu_1$ e $\mu_2$ . Adaptada de [10]. . . . .	95
6.3	Distribuições clássicas de comprimentos [a),c)] e áreas efetivas [b),d)] para o bilhar <i>stadium</i> (caótico) e o bilhar retangular (integrável). Adaptada de [70]. . . . .	101
6.4	Transmissão (linha cheia) e reflexão (linha tracejada) para as faixas centradas nas órbitas isoladas para o mapa clássico. Quando $\kappa = 2\pi$ ocorrem as bifurcações. . . . .	103
6.5	Transmissão (linha cheia) e reflexão (linha tracejada) quântica para as faixas centradas nas órbitas isoladas para $N = 997$ e $2M = 198$ . Quando $\kappa = 2\pi$ ocorrem as bifurcações. . . . .	103
6.6	Transmissão (linha cheia) e reflexão (linha tracejada) para as faixas centradas nas bifurcações para o mapa clássico. Quando $\kappa = 2\pi$ ocorrem as bifurcações. . . . .	104
6.7	Transmissão (linha cheia) e reflexão (linha tracejada) quântica para as faixas centradas nas bifurcações para $N = 997$ e $2M = 198$ . Quando $\kappa = 2\pi$ ocorrem as bifurcações. . . . .	104

## Lista de Figuras

---

- 6.8 Condutância clássica (linha tracejada) e quântica (linha cheia) para as faixas centradas nas órbitas isoladas (linha vermelha) e bifurcações (linha azul). Quando  $\kappa = 2\pi$  ocorrem as bifurcações. . 105

# Capítulo 1

## Introdução

A descoberta de que a maioria dos movimentos na Mecânica Clássica é extraordinariamente sensível ao estado inicial do sistema teve origem, há mais de um século, nos trabalhos sobre Mecânica Celeste do matemático francês Henri Poincaré (1854-1912) [1,2]. No entanto, a física da dinâmica não-linear não foi estudada até 1960, quando Lorenz tentava fazer previsões meteorológicas através de simulações numéricas. Partindo quase das mesmas condições iniciais, Lorenz viu seu computador de previsão do tempo produzir padrões que se distanciavam cada vez mais, até que toda a semelhança desaparecia, conforme ilustrado na figura (1.1). A criação de modelos no computador tinha, na verdade, transformado a meteorologia, de uma arte, numa ciência. As avaliações do Centro Europeu indicavam que o mundo tinha poupado bilhões de dólares anualmente com previsões que, estatisticamente, eram melhores do que nada. Mas além de dois ou três dias, as melhores previsões do mundo eram especulativas, e além de seis ou sete não eram válidas devido ao *Efeito Borboleta*, que quer dizer que pequenas alterações na temperatura e pressão em uma certa região do planeta originadas, por exemplo, do bater das asas de uma borboleta, podem causar nevascas, tormentas, furacões ou inundações em outra parte da Terra [3].

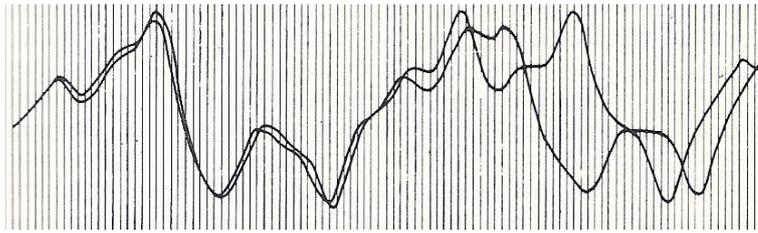


Figura 1.1: Exemplo de como dois padrões de tempo divergem.

Além do mais, um sistema dinâmico não precisa ser muito complicado para exibir dinâmica caótica [4]. Um dos sistemas mecânicos mais simples a apresentar caos é o do jogo de bilhar. O movimento de só uma bola em uma mesa retangular (sem caçapas) não é caótico. Como mostra a figura (1.2), o movimento geral da bola neste caso terá sempre a mesma direção depois de quatro colisões com a borda da mesa. Uma pequena alteração na condição inicial da bola levará a um desvio de sua trajetória que cresce linearmente com o tempo, enquanto duas trajetórias inicialmente paralelas permanecerão sempre paralelas. Porém, a presença de uma segunda bola alterará fundamentalmente o movimento da primeira. Mesmo que simplifiquemos o jogo, prendendo uma bola no meio da mesa, como sugeriu o matemático russo Yacob Sinai, seu efeito será o de desfocar as trajetórias da outra bola, como mostra a figura (1.3). Podemos considerar que o papel da segunda bola é meramente o de alterar a forma do bilhar que passou a ter uma borda interior, representada pelo contorno da bola extra [1].

Estruturas com uma geometria similar como a dos bilhares, por exemplo as figuras (1.2) e (1.3), podem ser fabricadas em um gás de elétrons bidimensional (2-DEG) que forma a interface de uma heteroestrutura de GaAs/AlGaAs [4–6], também chamados de *pontos quânticos* (veja a figura (1.4)). Os elétrons podem entrar e sair do ponto quântico através dos pontos de contato (dreno e fonte), o que caracteriza o sistema como *aberto*, e que os diferem do jogo do bilhar, sem caçapas, que é um sistema *fechado*. Tais bilhares de elétrons têm dimensão da ordem de *nanômetros* a poucos *micrometros* e são denominados *sistemas mesoscópicos*. Estes são denominados de *sistemas mesoscópicos*, pois suas dimen-

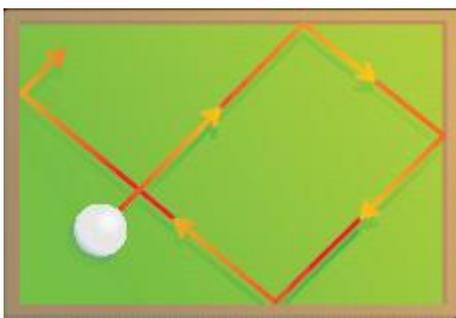


Figura 1.2: Um bilhar formado por uma só bola e mesa retangular sem caçapas não é caótico. Depois de quatro colisões com a borda, a trajetória da bola volta a ter a mesma direção.

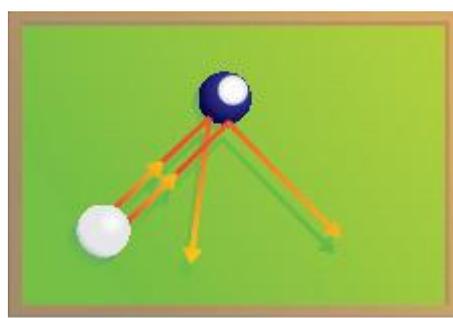


Figura 1.3: Fixando uma segunda bola à mesa, obtemos o chamado bilhar de Sinai. A segunda bola desfocaliza as trajetórias da primeira, gerando um movimento irregular ou caótico.

sões são intermediárias entre os mundos microscópico e macroscópico, ou seja, são sistemas cujas dimensões são muito maiores do que objetos microscópicos como átomos, mas que também não podem ser considerados macroscópicos [7]. Estes sistemas são ideais para o estudo do *limite semiclássico*, amplamente chamado também de *Caos Quântico*, que nada mais é que o estudo das *assinaturas* na Mecânica Quântica dos sistemas cujos análogos clássicos são caóticos no limite quando  $\hbar \rightarrow 0$  [8–10]. Os pontos quânticos minúsculos que a nanoengenharia produz para aprisionar um pequeno número de elétrons são o ponto de partida para futuras gerações de dispositivos eletrônicos. Suas formas podem ser alteradas exatamente como a dos bilhares. Os transistores atuais, de dimensões enormes se comparadas aos pontos quânticos, podem ser considerados como sistemas clássicos. Em contraposição, as propriedades dos futuros dispositivos terão de ser entendidas dentro da teoria do Caos Quântico [1].

Um dos principais temas dos últimos 25 anos na área de Caos Quântico tem sido o estudo de estatísticas de flutuações quânticas, tais como as propriedades estatísticas das distribuições dos autovalores energia e os valores obtidos pelas funções de onda, no limite semiclássico [11]. Para sistemas caóticos, de acordo com a conjectura de Bohigas-Giannoni-Schmit, as estatísticas dos níveis de en-

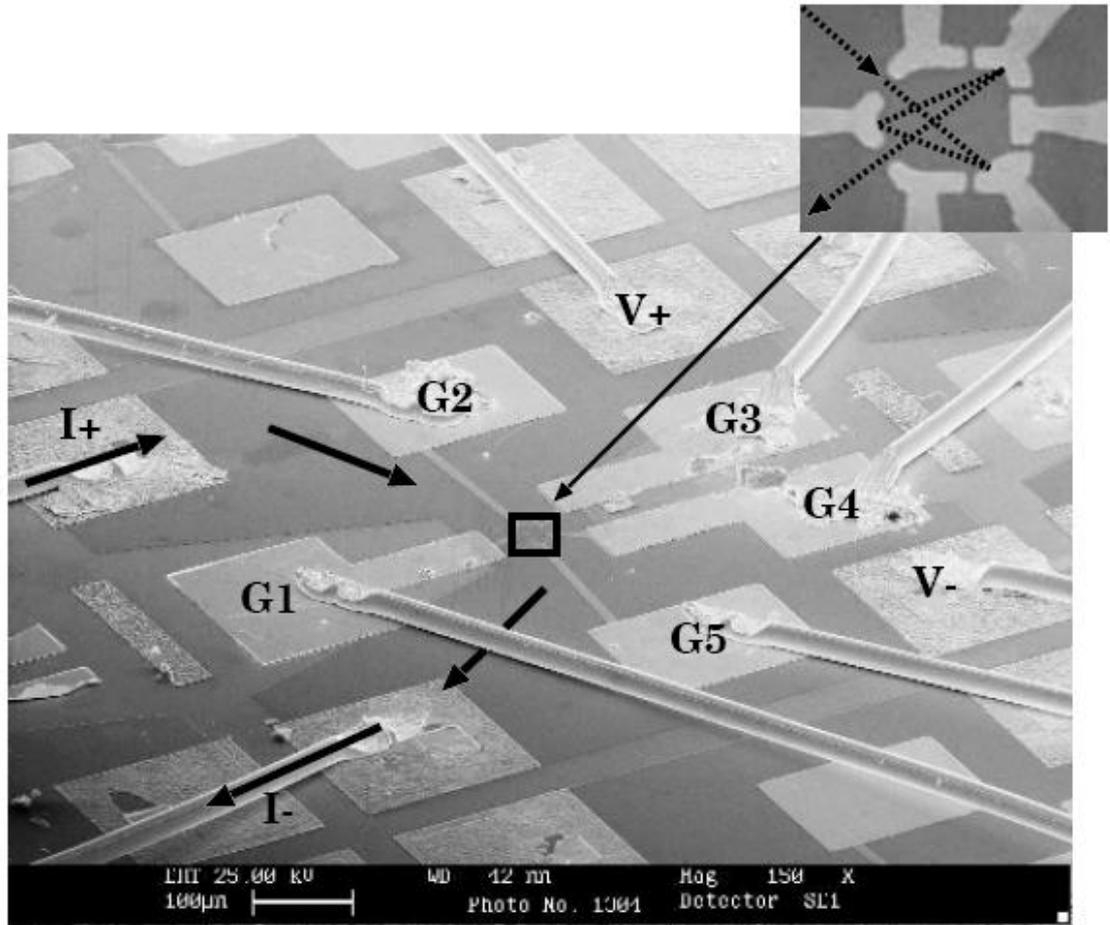


Figura 1.4: Visão perspectiva de um ponto quântico, fabricado em um 2-DEG de uma heteroestrutura de GaAs/AlGaAs. Seu formato pode ser variado através dos eletrodos  $G_1, G_2, \dots, G_5$ . A área do ponto é de aproximadamente  $2\mu\text{m}^2$ . Elétrons podem entrar e sair através dos pontos de contato.

ergia podem ser descritas usando a Teoria de Matrizes Aleatórias (RMT) [12], enquanto as funções de onda podem ser descritas estatisticamente usando o modelo de superposição de ondas aleatórias de Berry [13]. Para os sistemas que apresentam limite clássico integrável: a conjectura de Berry-Tabor [13] diz que a estatística dos níveis de energia é a mesma que a de processos tipo Poisson (aleatórios), e as funções de onda são bem descritas pela quantização de toros. Sistemas típicos (os mais importantes na maioria das situações de interesse) não são nem completamente integráveis nem completamente caóticos. Neste caso, foi proposto que as estatísticas das flutuações quânticas são uma média ponder-

ada das contribuições individuais destes dois componentes [14]. Essa conjectura descreve bem algumas estatísticas de flutuações.

Trabalhos mais recentes mostram, porém, que outras estatísticas são dominadas por contribuições de uma natureza completamente diferente associadas às bifurcações de órbitas clássicas. Certas estatísticas de autovalores de energia são semiclassicamente dominadas por bifurcações [15]. Desenvolveu-se uma teoria geral para quantificar este efeito no caso dos momentos espectrais, combinando-se a teoria semiclássica que descreve a influência de bifurcações na distribuição de autovalores de energia, inicialmente desenvolvida por Hannay e Ozorio de Almeida [16], com posteriores contribuições significativas devidas a Sieber [17] com a teoria de grandes flutuações dominadas por singularidades [18] para descrever a competição entre todas as diferentes bifurcações genéricas [19]. O resultado surpreendente é que os momentos são semiclassicamente caracterizados por expoentes universais. Esta teoria foi depois estendida por Keating e Prado em 2001 [20] para o cálculo dos momentos das autofunções. Por último usou-se esta teoria para descrever o efeito da competição de bifurcações nas estatísticas de flutuações da condutância eletrônica em redes quânticas (quantum lattices) [21].

O propósito deste trabalho é aplicar esta teoria, desenvolvida até então para sistemas fechados, para sistemas abertos, isto é, para espalhamentos. Essa nova teoria permitirá descrever propriedades estatísticas (momentos) das flutuações do *time delay* e da *condutância* para sistemas ligados a um reservatório por meio de fios condutores (os pontos quânticos ligados a fios condutores). Acreditamos que esta teoria terá aplicações significativas para a descrição das flutuações da condutância em dispositivos microeletrônicos e nanofios. Tanto o *time delay* como a condutância são obtidos através da matriz de espalhamento. O sistema físico que será estudado é um ponto quântico em um 2-DEG conectado por dois fios condutores balísticos à um reservatório de elétrons. O *espaço de fase* deste sistema é quadridimensional, mas pode ser reduzido para duas dimensões na *seção*

## Capítulo 1. Introdução

---

*de superfície de Poincaré.* O mapa padrão simetrizado de Chirikov é um modelo com um espaço de fase bidimensional e será usado por ser computacionalmente mais tratável, ter a mesma fenomenologia dos pontos quânticos e apresentar *propriedades genéricas* de sistemas caóticos [4, 22, 23].

Esta dissertação está estruturada da seguinte forma: No capítulo 2 apresentamos as principais idéias envolvidas no estudo de caos clássico. No capítulo 3 abordamos o estudo do limite semiclássico conhecido como Caos Quântico. No capítulo 4 apresentamos, estudamos e analisamos o modelo matemático e físico que será utilizado para estudar as flutuações estatísticas quânticas do *time delay* no capítulo 5, e a condutância no capítulo 6. No capítulo 7 apresentam-se as conclusões e fecha-se esta dissertação com as perspectivas de trabalhos futuros.

## Capítulo 2

### Caos Clássico

Os alicerces da mecânica clássica foram construídos por Galileu, Newton, Laplace, Lagrange, Hamilton e Poincaré, entre outros. Procuravam-se soluções exatas (completas) e, desta maneira, dada uma condição inicial para um problema, seríamos em princípio, capazes de determinar o estado futuro do mesmo. A célebre frase de Laplace:

*“Nós podemos tomar o estado presente do universo como o efeito do seu passado e a causa do seu futuro. Um intelecto que, em dado momento, conhecesse todas as forças que dirigem a natureza e todas as posições de todos os itens dos quais a natureza é composta, se este intelecto também fosse vasto o suficiente para analisar essas informações, compreenderia numa única fórmula os movimentos dos maiores corpos do universo e os do menor átomo; para tal intelecto nada seria incerto e o futuro, assim como o passado, seria presente perante seus olhos.”*

reflete o determinismo que reinava na época. Da mesma maneira como o Sistema Solar parecia evoluir de maneira absolutamente previsível em consequência de uma única lei simples, todo o Universo deveria funcionar com a mesma regularidade, como um *relógio mecânico* cujo mecanismo era compreensível através da Física. Neste mundo governado pela ordem, não haveria lugar para a *incerteza*

e para o *caos*. Foi o trabalho de Henri Poincaré sobre a estabilidade do Sistema Solar que apontou pela primeira vez a não-previsibilidade do estado futuro de um sistema dinâmico.

Neste capítulo, faremos uma breve introdução histórica. Em seguida, apresentaremos alguns aspectos teóricos sobre *caos* e sistemas dinâmicos que usaremos nos cálculos ou nas análises dos resultados nos capítulos 4, 5 e 6. Para quem estiver interessado em discussões mais aprofundadas deve consultar a bibliografia citada no decorrer do texto.

## 2.1 Caos Clássico

A primeira noção de caos surgiu no final do século XIX, quando a questão da estabilidade do Sistema Solar estava sendo discutida. A análise de Henri Poincaré deste problema, reduzido ao problema de três corpos - o sistema não trivial mais simples - conduziu ao conceito de caos, conforme veremos na sequência [24].

### O problema de 3 corpos

O problema de três massas pontuais interagindo, formulado por Newton, continua a ser um problema central e em aberto na física [25]. As versões atuais consistem em sistemas tais como: três quarks que formam um próton ou um nêutron, dois hidrogênios e um oxigênio que são os constituintes de uma molécula de água ou uma átomo de hélio que é formado por uma partícula alfa (núcleo de Hélio) e dois elétrons. Newton foi um dos primeiros cientistas que investigou o problema de três massas pontuais atraindo-se mutuamente com uma força que diminui com o inverso do quadrado da distância. No caso do sistema Terra-Sol-Lua, desvios da teoria já tinham sido corretamente determinados por Ptolomeu de Alexandria no século II a.C. e um grande número de refinamentos foram introduzidos por Tycho Brahe no final do século XVI, todos baseados em observações a olho nu [26].

O campo gravitacional produzido pelo Sol é de tal forma dominante no Sistema Solar, que foi possível detectar empiricamente a solução do problema de dois corpos (Sol-planeta): as elipses de Kepler. No entanto, o próprio Newton sabia que o movimento do Sistema Solar apresentava irregularidades em relação às leis de Kepler, que eram provenientes da interação gravitacional entre os planetas. Estas irregularidades são muito complicadas para serem descritas aqui. Estudar um problema de mais de dois corpos é uma tarefa difícil, porque as equações destes sistemas não são solúveis por nenhuma função conhecida. O problema é suficientemente complexo para que não seja possível nem mesmo encontrar uma solução que descreva o sistema para um intervalo de tempo arbitrário. Desenvolveram-se então métodos perturbativos, em que numa solução conhecida do problema de dois corpos se introduzem os efeitos dominantes das interações planeta-planeta como perturbações. Desta maneira, podemos obter novas soluções aproximadas, para intervalos de tempo limitados, que podem ser um ponto de partida mais preciso para um novo cálculo perturbativo. Executar o método muitas vezes melhora a precisão da solução, mas a obtenção de uma solução exata implicaria um número infinito de iterações.

Pierre Simon de Laplace (1749-1827) foi o expoente máximo da confiança da ciência dos séculos XVIII e XIX na regularidade e previsibilidade do *mecanismo de relógio* que regulava o funcionamento do Sistema Solar, expresso nas Leis de Newton. No seu Tratado sobre a Mecânica Celeste [27], usando técnicas inovadoras da teoria de perturbações, Laplace melhora as soluções aproximadas conhecidas para o Sistema Solar e traz grandes avanços ao cálculo e caracterização das órbitas planetárias. Ao tentar explicar as irregularidades observadas nas órbitas de alguns planetas, identifica as ressonâncias planetárias como um mecanismo geral que pode produzir efeitos a longo prazo. No entanto, conclui que estas perturbações se compensam, levando a perturbações periódicas na inclinação e excentricidade de alguns planetas que não colocam em risco a estabilidade do

Sistema Solar [28].

Apesar da robustez dos métodos desenvolvidos por Laplace, faltava ainda uma demonstração rigorosa da estabilidade do Sistema Solar, e foi este problema em aberto que motivou os trabalhos de Henri Poincaré (1854-1912) que levaram ao conceito de caos, assim como muitas outras descobertas ao longo dos últimos cem anos. Um problema relacionado, que também passou pelas mãos de Newton e Laplace e que, apesar dos constantes desenvolvimentos, ainda hoje dá trabalho a matemáticos e a computadores de ponta, é o problema da órbita da Lua. Parece estranho que o corpo celeste mais próximo da Terra, e que conhecemos tão bem, tenha ao longo de séculos resistido a uma descrição quantitativa rigorosa. A questão é que o movimento da Lua em torno da Terra não é bem aproximado pelo problema de dois corpos Terra-Lua, o Sol está próximo demais e é suficientemente massivo para que a sua influência neste sistema seja redutível a uma pequena perturbação. Assim sendo, a formulação básica do problema do movimento da Lua é um problema gravitacional mais complicado do que o problema de dois corpos, pois exibe caos.

### **O problema da estabilidade do Sistema Solar**

A questão da estabilidade do Sistema Solar levou-nos ao conceito de caos. Os métodos usados para estudar órbitas planetárias que envolviam mais de dois corpos (teoria das perturbações), numa época sem computadores, implicavam cálculos muito prolongados que após certa precisão se tornavam impraticáveis. A questão era a seguinte: Será que as soluções aproximadas que conseguimos calcular num problema de muitos corpos nos dão um entendimento fiel do comportamento destes sistemas em escalas de tempo da ordem da idade do Sistema Solar ou maiores, ou será que algo de inesperado está escondido além dos limites da nossa precisão?

Por ocasião das celebrações do sexagésimo aniversário do Rei Óscar II da

Suécia e Noruega, em 21 de Janeiro de 1889, foi aberto um concurso em que os candidatos eram convidados a apresentar um trabalho original sobre uma das quatro perguntas propostas. Estas questões tentavam focar quatro problemas importantes na fronteira do conhecimento matemático da época, e uma delas era a questão se o Sistema Solar é estável ou não, em escalas de tempo arbitrariamente grandes [2].

O vencedor do concurso foi Poincaré. Apesar de não ter dado uma resposta definitiva à questão proposta, os avanços que o seu trabalho representou para o conhecimento da natureza das soluções das equações diferenciais viriam a mudar para sempre o nosso entendimento da gravitação newtoniana e do Sistema Solar [24].

O problema da estabilidade do Sistema Solar somente foi melhor compreendido mais recentemente à luz do teorema KAM (Kolmogorov, Moser, Arnold), discutido na seção (2.9). O Sistema Solar é um sistema quase integrável e, embora a sua estabilidade não seja garantida para tempos indefinidamente longos, o sistema comporta-se efetivamente como um sistema estável em escalas de tempos cosmológicos [24].

### Henri Poincaré

Poincaré apresentou um trabalho sobre o chamado problema restrito de três corpos (PR3C), que pode ser considerado como o sistema gravitacional mais simples depois do Problema de dois corpos (P2C). Neste modelo consideram-se dois corpos, os primários, que se movem entre si seguindo uma solução do P2C e uma terceira massa infinitesimal, que se move sob a influência gravitacional dos corpos primários, mas que não afeta o movimento destes (numa 2ª aproximação o sistema solar pode ser visto como um PR3C, em que o Sol e Júpiter são os dois corpos primários e os restantes são as *massas infinitesimais*).

Neste trabalho, apesar de familiarizado com os métodos tradicionais da teoria

de perturbações para abordar problemas gravitacionais de mais de dois corpos, a sua intuição extraordinária levou-o a atacar o problema por um ângulo que resultou em soluções surpreendentes e inovadoras. Poincaré descobriu que um problema tão simples como o PR3C exhibe soluções caóticas: órbitas com dependência sensível às condições iniciais, expresso através das seguintes palavras:

*“...pode acontecer que as pequenas diferenças nas condições iniciais produzem diferenças muito grandes no fenômeno final. Um erro pequeno anterior causará um erro enorme posterior. Predição torna-se impossível, e temos o fenômeno imprevisível.” [2].*

## 2.2 Previsibilidade e Caos

O termo *caos* é usado para referir-se a esta não-previsibilidade. Entretanto, ainda é difícil fornecer uma definição de caos que seja universalmente aceita. Aqui, simplesmente apresentam-se algumas características importantes dos sistemas que são classificados como sendo caóticos [2]:

1. Uma instabilidade dinâmica que conduz a não-previsibilidade é uma característica central do caos. Esta instabilidade deve ser mais exponencial do que linear no tempo, porque no caso linear a previsibilidade é possível mesmo na presença de uma ligeira incerteza se conhecermos uma história suficientemente longa do sistema. No caso exponencial (caótico), entretanto, não se tem nenhum poder preditivo adicional conhecendo-se a história do sistema além da condição inicial. Esta instabilidade exponencial é quantificada pelo expoente de Lyapunov.
2. A instabilidade é puramente determinística e intrínseca à dinâmica; o caos não é explicado por algum ruído externo.
3. A instabilidade deve ser global, no sentido de que o comportamento caótico ocorre para uma quantidade de condições e não está limitado a um conjunto

de medida zero no espaço de fase, diagrama  $p - q$ , definido na seção (2.5), como no equilíbrio instável de um pêndulo.

4. O sistema deve estar em algum sentido limitado, para evitar a separação exponencial trivial das trajetórias, como em  $x(t) = x_o \exp(t)$  para diferentes  $x_o$ , ou seja, para diferentes condições iniciais. Para manter as trajetórias confinadas quando elas se separam, deve haver alguma noção de *esticar* e de *dobrar-se* (espaço de fase limitado).
5. O modelo físico do sistema deve ser simples. É surpreendente que sistemas simples tais como o problema de três corpos possam apresentar um comportamento complicado e imprevisível, mas o comportamento complicado não é surpreendente em um sistema com muitos graus de liberdade. Assim, por exemplo, embora o movimento Browniano seja imprevisível, um modelo físico determinístico inclui as interações das colisões de um número macroscópico de moléculas do gás; então, não consideramos este sistema caótico.

Quando retornamos ao conceito de integrabilidade, podemos ser mais precisos sobre o significado do caos, pelo menos em *sistemas Hamiltonianos*.

## 2.3 Sistemas Hamiltonianos

Classicamente, um sistema Hamiltoniano é especificado por uma função Hamiltoniana  $H(\vec{q}, \vec{p}, t)$ , que nada mais é do que uma função que descreve a energia total do sistema. O *estado do sistema* é especificado pelo seu momento  $\vec{p}$  e sua posição  $\vec{q}$  [29–32]. A dinâmica do sistema é governada pelas equações de Hamilton:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{q}} \quad (2.1)$$

$$\frac{d\vec{q}}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}} \quad (2.2)$$

que generalizadas para múltiplas dimensões podem ser escritas como:

$$\frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (2.3)$$

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (2.4)$$

onde  $i = 1, \dots, n$  é o número de graus de liberdade, que discutiremos a seguir, na seção 2.5. A Hamiltoniana para uma partícula é a soma das energias cinética e potencial, de forma que:

$$H(\vec{q}, \vec{p}, t) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{q}, t) \quad (2.5)$$

Neste caso, as equações de Hamilton ficam:

$$\frac{d\vec{p}}{dt} = -\frac{\partial V}{\partial \vec{q}} \quad (2.6)$$

$$\frac{d\vec{q}}{dt} = \frac{\vec{p}}{m} \quad (2.7)$$

que são as equações usuais de movimento de uma partícula em um campo de forças.

Sistemas Hamiltonianos são uma classe de sistemas dinâmicos que ocorrem em uma vasta variedade de situações e as propriedades especiais das equações de Hamilton dotam estes sistemas com atributos que diferem qualitativamente e fundamentalmente de outros sistemas. Por exemplo, as equações de Hamilton não possuem *atratores* - consequência do fato destes sistemas serem conservativos [32].

## 2.4 Sistemas integráveis e simetrias

Uma característica agradável de sistemas Hamiltonianos é que nestes podemos ser muito precisos sobre a definição de caos. Especificamente, as simetrias em geral, levam a grandezas conservadas. Um dos exemplos mais óbvios é inva-

riância da translação temporal (onde a Hamiltoniana não depende explicitamente do tempo). Esta simetria conduz à conservação de energia. Se um Hamiltoniano for invariante sob a translação espacial em uma determinada direção, então não há nenhuma força naquela direção e o momento linear correspondente é conservado. O problema de força central é rotacionalmente invariante, assim todos as componentes do vetor do momento angular são conservadas.

Vamos supor, agora, que temos uma Hamiltoniana com  $n$  graus de liberdade (de maneira que uma trajetória é parametrizada por  $n$  coordenadas e  $n$  momentos). Supomos também que o sistema é altamente simétrico, tal que podemos encontrar  $n$  grandezas conservadas  $I_j$ . Finalmente, supomos que estas grandezas estão *em involução*, o que significa que seus parênteses de Poisson são nulos, isto é,

$$\{I_j, I_k\} = \sum_{i=1}^n \left( \frac{\partial I_j}{\partial x_i} \frac{\partial I_k}{\partial p_i} - \frac{\partial I_j}{\partial p_i} \frac{\partial I_k}{\partial x_i} \right) = 0 \quad (\forall j, k \in \{1, \dots, n\}) \quad (2.8)$$

Esta é essencialmente uma maneira formal de indicar que as grandezas conservadas são independentes uma das outras. Sob estas circunstâncias, é sempre possível escrever a solução (em termos das variáveis ângulo-ação), e assim não há nenhum caos. Tal sistema é dito ser *integrável*.

Usando esta idéia, podemos imediatamente ver que os sistemas Hamiltonianos autônomos com um grau de liberdade são sempre integráveis, porque a energia é uma grandeza conservada. Assim, nunca há caos em tais sistemas. No mínimo, dois graus de liberdade ou uma dependência explícita do tempo são necessários para apresentar caos.

A maioria dos sistemas não possuem o grau elevado de simetria exigido para a integrabilidade. Se houver somente uma constante do movimento ou poucas para o sistema, espera-se encontrar caos. Em outras palavras, uma condição para que um sistema apresente caos é a não-integrabilidade.

## 2.5 Espaço de Fase

Para determinar a posição no espaço de um sistema de  $K$  pontos materiais<sup>1</sup>, é necessário dar  $3K$  vetores, isto é,  $3K$  coordenadas. Geralmente, o número de grandezas independentes, que devem dar-se para determinar univocamente a posição de um sistema, denomina-se número de *graus de liberdade* do sistema; e neste caso, o número é igual a  $n = 3K$ . Estas grandezas não deverão ser necessariamente as coordenadas cartesianas do ponto; dependendo das condições do problema, poderão ser feitas escolhas mais convenientes, de quaisquer outras coordenadas.  $n$  grandezas quaisquer  $q_1, q_2, \dots, q_n$ , que caracterizam completamente a posição do sistema (com  $n$  graus de liberdade), denominam-se *coordenadas generalizadas* [29]. A configuração instantânea de um sistema está determinada pelos valores das  $n$  coordenadas generalizadas  $q_1, \dots, q_n$  e corresponde a um ponto particular no hiperespaço cartesiano no qual os  $q$  formam suas  $n$  coordenadas. Este espaço  $n$ -dimensional é denominado de *espaço de configurações*. Cada conjunto de valores atribuídos às coordenadas generalizadas define uma configuração do sistema, ou seja, as posições de todas as partículas num dado instante [30].

Em sistemas Hamiltonianos, o *estado* de um sistema é completamente descrito por seu momento (eq. (2.3)) e posição (eq. (2.4)). Para uma partícula em um *espaço de configurações* tridimensional, o momento e posição são ambos vetores com três componentes cada, e desta maneira uma completa descrição do sistema exige o conhecimento de seis variáveis [33].

A tabela (2.1) é útil nesta seção e no restante do capítulo, pois ilustra a relação entre o número de graus de liberdade de um sistema e a dimensão do espaço de fase, da superfície de energia e do *toro* [34].

Vamos ilustrar o espaço de fase considerando um exemplo clássico, que é discutido em [31, 33, 35, 36], o pêndulo simples da figura (2.1), cuja Hamiltoniana

<sup>1</sup>corpo cujas dimensões podem ser desprezadas ao descrevermos o movimento do sistema [29].

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

Tabela 2.1: Tabela com número de graus de liberdade e a dimensão do espaço de fase, da superfície de energia e do toro. Adaptada de [34].

em coordenadas polares é dada por:

$$H = \frac{1}{2}ml^2\dot{\theta}^2 - mgl \cos \theta \tag{2.9}$$

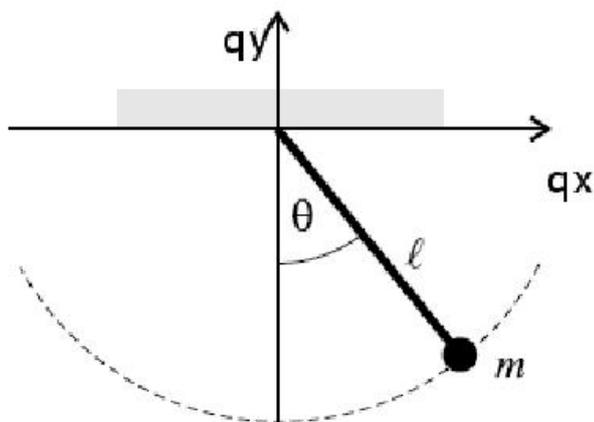
onde  $m$  e  $l$  são respectivamente a massa e comprimento do pêndulo e  $\theta$  é o ângulo a partir da vertical.

Lembrando que para um grau de liberdade, com  $H$  explicitamente independente do tempo, temos

$$H = E \tag{2.10}$$

onde  $E$  é a energia do sistema, que é uma constante de movimento. Desta maneira, usando a equação (2.9) podemos escrever:

$$\dot{\theta} = \sqrt{\frac{g}{l}} \sqrt{2(E' + \cos \theta)} \tag{2.11}$$



0

Figura 2.1: Pêndulo simples.

onde  $\dot{\theta}$  é a derivada temporal de  $\theta$  e  $E' = E/mgl$ .

Fazendo o gráfico de  $\theta \times \dot{\theta}/\sqrt{g/l}$  temos o espaço de fase do pêndulo como vemos na figura (2.2). Considerando que o sistema possui somente um grau de liberdade e, portanto, o mesmo é integrável, as diferentes curvas são soluções possíveis para uma energia constante. Podem ser identificados três regimes na dinâmica do pêndulo, ilustrados através das curvas de cores diferentes.

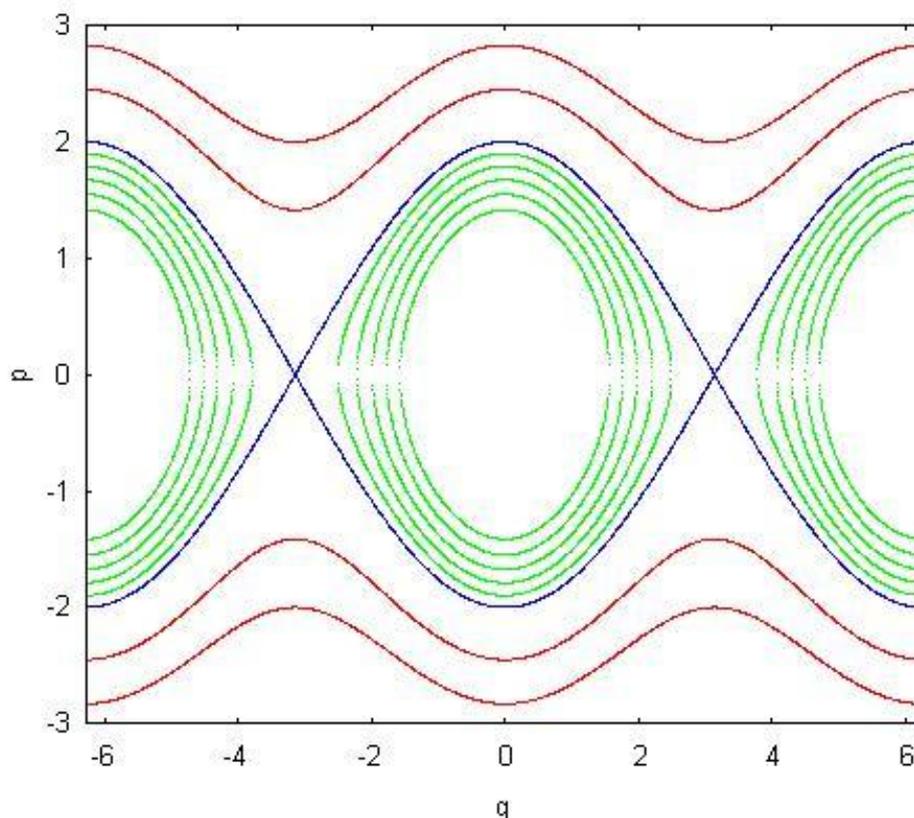


Figura 2.2: Espaço de fase para o pêndulo simples. Há três tipos de movimentos. i) curvas verdes: correspondem às elipses na região central são as librações - vão e voltam sobre si mesmas (oscilações), ii) curva azul: separatriz e iii) curvas vermelhas: correspondem as rotações.

Há várias características interessantes que podem ser observadas a partir do espaço de fase, por exemplo, os tipos de movimentos que aparecem. Pode-se obter informações consideráveis analisando a equação (2.9) para diferentes valores de energia  $E$  e o gráfico (2.2). O valor da Hamiltoniana corresponde à energia total, energia cinética mais a energia potencial do sistema. Podem ser identificados três tipos de movimentos através das curvas no espaço de fase:

Curvas vermelhas: este é o caso onde  $E$  é maior do que o maior valor da energia potencial do sistema, então  $\dot{\theta}$  é sempre diferente de zero, o que resulta num movimento não ligado em  $\theta$  que varia de  $\pi$  a  $\pi$ , num sentido ou noutro. Isto significa que a energia inicial, que é dada ao pêndulo, é suficiente para que este consiga subir até a altura máxima e continuar a rotação a partir desse ponto. Estas curvas correspondem a círculos completos sucessivamente descritos pelo pêndulo, e são periódicas, embora a imagem não a sugira imediatamente (temos de pensar que  $\pi$  e  $\pi$  correspondem à mesma posição e que, portanto, o espaço de fase deve ser visto como tendo a borda esquerda *colada* à borda direita) veja seção (2.6).

Curvas verdes: neste caso,  $E$  é menor do que a energia potencial máxima. Neste regime o pêndulo é largado com velocidade angular nula numa posição que faz um ângulo menor que  $\pi$  com a vertical. Desprezando qualquer atrito, a velocidade do pêndulo cresce até atingir um valor máximo quando  $\theta = 0$  e decresce a seguir até voltar a zero, quando atinge a elongação máxima do lado oposto, simétrica a inicial. Como podemos ver, neste regime as curvas são fechadas (cada linha verde corresponde a uma dada altura inicial) o que podemos de imediato identificar com um movimento periódico. O pêndulo nunca chega a fazer um ângulo de  $\pi$ , pois não tem energia suficiente.

Curva azul: neste caso,  $E$  é igual a energia potencial. Temos um regime fronteira, em que o pêndulo é lançado exatamente com a energia necessária para poder chegar ao ponto de altura máxima, que atinge com velocidade nula. Por isso, o tempo associado a este movimento fronteira é infinito. Esta curva define a separatriz entre dois regimes de movimento.

O movimento tem dois pontos singulares em  $\dot{\theta} = 0$ : os pontos  $(\dot{\theta}, \theta) = (0, 0)$  que é um ponto elíptico estável e  $(\dot{\theta}, \theta) = (0, \pm\pi)$  que são pontos hiperbólicos instáveis. Uma característica notável é que as trajetórias no espaço de fase próximas a um ponto elíptico permanecem na sua vizinhança, enquanto que uma trajetória

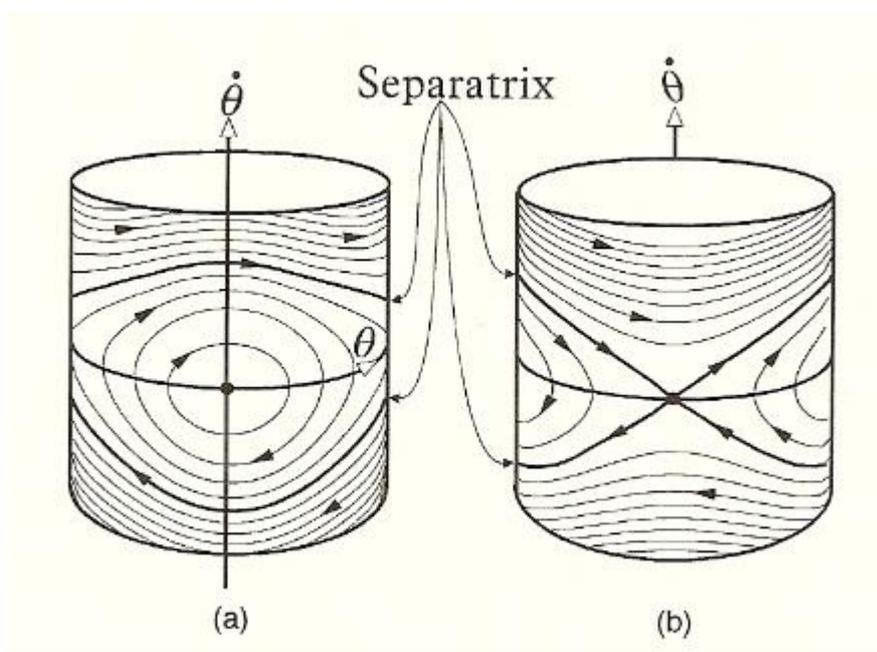


Figura 2.3: Toro para o pêndulo simples com um grau de liberdade mostrando o comportamento das trajetórias próximas ao a) ponto fixo elíptico e b) ao ponto fixo hiperbólico. Adaptada de [33].

próxima a um ponto hiperbólico instável diverge deste ponto [34, 35].

## 2.6 Toros e trajetórias

Considerando o caso com um grau de liberdade  $n = 1$ : a trajetória é representada por um segmento de reta de comprimento  $2\pi$ . O ponto representativo move-se uniformemente para à direita com velocidade  $\omega_1$  e quando ela atinge o ponto  $Q_1 = 2\pi$ , ela pula para  $Q_1 = 0$ . Esta descontinuidade pode ser evitada representando a trajetória como um círculo, onde  $Q_1$  é a coordenada angular do ponto representativo [37]. Este é o caso do pêndulo do exemplo da seção (2.5). Representando todas as trajetórias da figura (2.2) vemos que a forma do toro é cilíndrica, conforme figura (2.3).

Considerando o caso  $n = 2$ : no plano  $(Q_1, Q_2)$ , movimento ocorre dentro de um quadrado com lados de comprimento  $2\pi$ . O ponto move-se com uma velocidade constante cujas componentes são  $\omega_1$  e  $\omega_2$ ; quando o ponto deixa um

lado do quadrado, ele reaparece no lado oposto. Outra vez, pode-se evitar esta descontinuidade *colando-se* primeiro o lado esquerdo do quadrado ao lado direito do quadrado e depois o lado superior à parte inferior. Esta superfície obtida é um *toro*.  $Q_1$  e  $Q_2$  são coordenadas angulares que especificam a posição de um ponto no toro. Este toro pode ser visualizado através da figura (2.4).

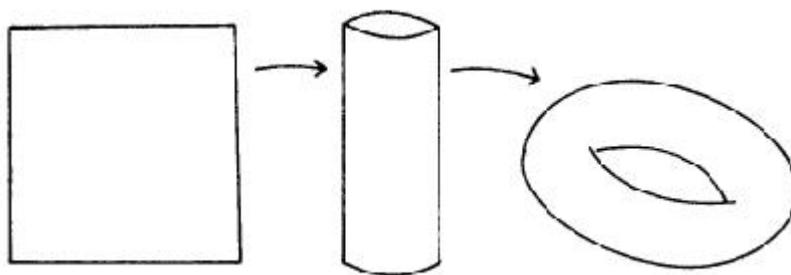


Figura 2.4: Toro bidimensional para sistemas com dois graus de liberdade. Adaptada de [38].

Para  $n$  graus de liberdade, o movimento pode ocorrer dentro de um hiper-cubo  $n$ -dimensional, no espaço cartesiano  $(Q_1, \dots, Q_n)$ , com descontinuidades; ou em um  $n$ -toro, com as  $Q_i$ s coordenadas angulares, e sem descontinuidades no movimento. Ambas as representações são úteis.

Qual a forma da trajetória sobre si mesma no  $n$ -toro?

Para  $n = 1$  a trajetória simplesmente coincide com seu 1-toro (círculos). Para  $n = 2$ , as coisas são um pouco mais complicadas. Se a razão  $\omega_1/\omega_2$  é racional, então depois de uma trajetória inteira ela volta sobre si mesma: ela é periódica (também denominado de caso *ressonante*). Se a razão  $\omega_1/\omega_2$  é irracional (caso geral), a trajetória nunca se fecha e preenche densamente o quadrado. Esta é a chamada *trajetória quase periódica*. Mais geralmente, para  $n$  graus de liberdade, se os  $\omega_i$ s são mutuamente incomensuráveis, ou seja, se não existe a relação de comensurabilidade

$$k_1\omega_1 + \dots + k_n\omega_n = 0 \tag{2.12}$$

onde os  $k_i$ s são inteiros e não todos nulos, então a trajetória é densa no  $n$ -toro. Este é o caso geral. Se existem  $p$  relações de comensurabilidade independentes, então a trajetória ocupa somente um subespaço  $(n-p)$ -dimensional no  $n$ -toro [37].

## 2.7 Mapa de Poincaré

Muitas vezes não é muito útil analisar as trajetórias individuais, simplesmente porque é difícil determiná-las exatamente. Uma aproximação mais útil é considerar o espaço de fase para sistemas Hamiltonianos, que como vimos na seção (2.5) é o espaço das variáveis necessárias para especificar completamente o estado de um sistema (isto é, as posições e os momentos para um sistema Hamiltoniano). Este conceito surpreendente pode ser encontrado nos Principia de Newton publicado em 1687 [39]. Na segunda definição do primeiro capítulo denominado “*Definições*”, Newton especifica : “*A quantidade de movimento é a medida da mesma, obtida conjuntamente a partir da velocidade e da quantidade de matéria*”, ou seja, cada corpo tem associado uma quantidade chamada momento, que é o produto da massa e velocidade do objeto. Já no seu segundo capítulo “*Axiomas ou Leis do movimento*”, Newton diz que “*a mudança de movimento é proporcional à força motora imprimida*”, ou seja, a força é responsável pela mudança no momento. Portanto, momento e posição são as duas quantidades que, juntas, fornecem a completa informação sobre o sistema dinâmico em qualquer instante.

Logo após a publicação dos Principia, as novas gerações de físicos e matemáticos começaram a trabalhar no formalismo das Leis de Newton, assim como nas suas aplicações aos mais variados sistemas tais como pêndulos, projéteis, força das marés, etc. Com o trabalho de Lagrange (1736-1813), Pierre Simon de Laplace (1749-1827) e William Hamilton (1805 - 1865), a Mecânica Newtoniana desenvolveu-se como teoria física e matemática muito além da formulação original de Newton. Mais tarde, os trabalhos de Henri Poincaré (1854 - 1912)

marcaram uma nova etapa no entendimento da Física de Newton. Esta nova etapa está ligada ao desenvolvimento do conceito de espaço de fase, uma forma muito geral e poderosa de visualizar a evolução de um sistema.

A 2ª lei de Newton permite-nos, em princípio, escrever uma equação na qual procuramos uma solução  $\vec{q}(t)$ , que descreve a posição em função do tempo. No entanto, sabe-se que os detalhes matemáticos que envolvem a procura de uma solução, que na maior parte das vezes nem existe na forma de uma combinação de funções conhecidas, podem ofuscar o nosso entendimento do comportamento global do sistema. Pensou-se, então, em como obter informação sobre o comportamento de um sistema a partir das suas equações do movimento sem precisar resolvê-las explicitamente.

O primeiro passo foi reconhecer que o futuro de qualquer sistema mecânico fica inequivocamente determinado pela sua posição e pelo seu momento iniciais. Se o movimento do sistema for no espaço de configuração, cada uma destas grandezas terá três componentes, duas horizontais e uma vertical, de modo que conhecer a posição e o momento significa conhecer três pares de valores. Se o sistema for constituído por mais do que uma partícula, o seu estado fica descrito pela posição e momento de cada uma delas. Chamam-se a estes pares de variáveis os graus de liberdade do sistema, e o número de graus de liberdade, o número destes pares, mede a dimensão do espaço em que se dá o movimento, e o número de componentes do sistema. A introdução do espaço de fase foi um poderoso passo do ponto de vista matemático, mas representa um sério retrocesso do ponto de vista humano [40]. Como podemos visualizar seis dimensões? Em alguns casos felizmente pode se reduzir o espaço de fase para três, ou melhor, duas dimensões.

Se nosso interesse for entender o comportamento assintótico de uma trajetória, não será necessário seguir sua evolução com grande detalhe. Bastará olharmos para ela em certos instantes de tempo [37]. Esta é a idéia que está por trás do *método de seção de superfície*. Considerando o caso em que  $N = 3$ , ou seja, um es-

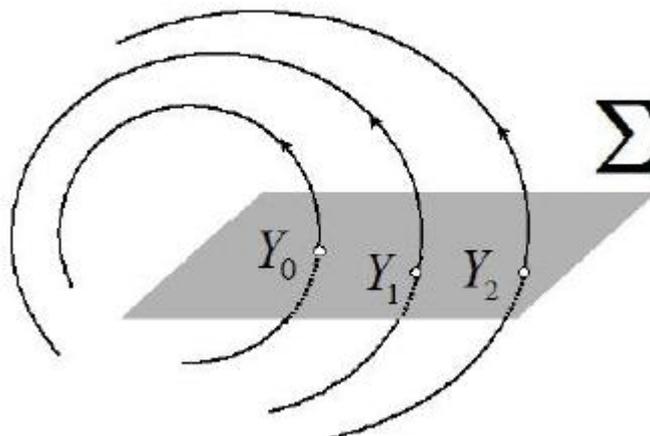


Figura 2.5: Seção de superfície. Fonte [37].

paço de fase tridimensional. Para este espaço de fase tridimensional, selecionamos uma *seção de superfície*  $\Sigma$  apropriada, que será uma superfície bidimensional ordinária, e observamos as sucessivas intersecções da trajetória com a superfície  $\Sigma$ . A seqüência de pontos que intersectam  $\Sigma$  têm a propriedade fundamental que se um dos seus pontos  $Y_i$  é dado, então o próximo ponto poderá ser deduzido. Têm-se assim um mapeador  $M$  da superfície  $\Sigma$  que é chamado de *mapa de Poincaré* [37].

As propriedades essenciais do sistema de equações diferenciais são refletidas nas propriedades do mapa  $M$ . Por exemplo, uma trajetória periódica do sistema diferencial corresponde a um conjunto de pontos periódicos de  $M$ ; se a trajetória for instável, os pontos periódicos também o serão.

Quando estudamos um mapeamento, nos referimos a uma seqüência infinita dos pontos  $Y_i$  como uma *trajetória* ou *órbita*, desde que ela é agora o equivalente da trajetória original no espaço de fase.

## 2.8 Estabilidade das órbitas periódicas

Uma órbita periódica de um sistema Hamiltoniano corresponde a um *ponto fixo* ou um *ciclo* na seção de Poincaré [37]. Como vimos na seção (2.7) as pro-

priedades essenciais do sistema de equações diferenciais são refletidas nas propriedades do mapa. Então vamos examinar a estabilidade dos pontos fixos de um mapa bidimensional que preserva a sua área (chamados de mapas 2-D simpléticos). Para mapas que preservam área o determinante da matriz Jacobiana  $J$  é igual a 1 [32, 34, 37]. Esta é uma característica dos sistemas Hamiltonianos devido ao Teorema de Liouville [29]. Os autovalores de  $J$  são dados por:

$$\det(J - \lambda I) = \begin{bmatrix} \frac{\partial q_{t+1}}{\partial q_t} - \lambda & \frac{\partial q_{t+1}}{\partial p_t} \\ \frac{\partial p_{t+1}}{\partial q_t} & \frac{\partial p_{t+1}}{\partial p_t} - \lambda \end{bmatrix}$$

$$\det(J - \lambda I) = \lambda^2 - T\lambda + 1 = 0 \quad (2.13)$$

onde  $T$  é o traço da matriz Jacobiana, dado por:

$$T = \frac{\partial q_{t+1}}{\partial q_t} + \frac{\partial p_{t+1}}{\partial p_t} \quad (2.14)$$

assim

$$\lambda = \frac{T \pm (T^2 - 4)^{1/2}}{2} \quad (2.15)$$

Desde que  $\{[T + (T^2 - 4)^{1/2}]/2\} \{[T - (T^2 - 4)^{1/2}]/2\} = 1$ , as raízes dessa equação são recíprocas uma à outra, como é exigido para mapas que preservam a área. Assim, são possíveis os seguintes casos:

1.  $T > 2$  : as raízes são reais e positivas ( $\lambda, 1/\lambda > 0$ );
2.  $T < -2$  : as raízes são reais e negativas ( $\lambda, 1/\lambda < 0$ );
3.  $-2 < T < 2$  : as raízes são complexas ( $\lambda, 1/\lambda = \exp(\pm i\alpha)$ ),

sendo que para os casos (1) e (2) as órbitas são hiperbólicas e hiperbólicas com reflexão, respectivamente, e no caso (3) as órbitas são elípticas. Nas órbitas

hiperbólicas, as órbitas próximas a um ponto fixo divergem exponencialmente deste. Neste caso, o ponto fixo é denominado de linearmente instável. Enquanto isso, para as órbitas elípticas na aproximação linear, as órbitas que começam próximas a um ponto fixo permanecerão sempre próximas ao ponto fixo. Estas órbitas também são chamadas de órbitas linearmente estáveis. Quando  $T = \pm 2$  as órbitas são ditas parabólicas. No exemplo do pêndulo, o ponto  $(\theta, \dot{\theta}) = (0, 0)$  é um ponto elíptico linearmente estável, enquanto que os pontos  $(\theta, \dot{\theta}) = (\pm\pi, 0)$  são pontos hiperbólicos linearmente instáveis. Veja a figura (2.3). Voltaremos a discutir esta questão na seção (2.9).

## 2.9 Teorema KAM

Este teorema importante tem papel central na teoria de sistemas dinâmicos Hamiltonianos [37]. Ele diz que se um sistema integrável é modificado por uma perturbação suficientemente pequena, então a maioria das trajetórias possíveis são ainda estáveis. A maioria dos físicos, quando pensaram sobre o problema, tenderam a pensar como Fermi, que uma pequena perturbação de um sistema integrável iria destruir o toro, ou seja, destruiria a sua integrabilidade. A confirmação desta opinião tenderia a validar a hipótese ergódica, e deste maneira, a Mecânica Estatística. Na realidade, o que acontece é que *a maioria* dos toros sobrevivem a uma perturbação, embora em forma distorcida. Alguns são destruídos, e estes não formam um *conjunto de medida zero*, mas um conjunto finito e que cresce com a perturbação. Os toros destruídos distribuem-se entre os que são preservados de maneira irregular [32, 34]. Estas questões foram provadas rigorosamente por Moser em 1962 e Arnold em 1964, com base nas sugestões de Kolmogorov em 1954. Estas provas formam o que conhecemos como teorema KAM, que são longas, intrincadas e sutis, por isso apresentam-se, a seguir, apenas as idéias, que são muito instrutivas. Estas duas provas diferem em alguns detalhes. A prova

de Moser é válida para o mapa *twist*, discutido a seguir, enquanto que Arnold forneceu a prova para sistemas Hamiltonianos [34].

### 2.9.1 Teorema de Moser

Inicialmente, considera-se o mapa *twist* [37], que é um mapeador plano correspondendo a um sistema integrável e dado em coordenadas polares

$$\begin{aligned} P_{t+1} &= P_t \\ Q_{t+1} &= Q_t + 2\pi\nu(P_t) \end{aligned} \tag{2.16}$$

onde  $\nu$  é o *número de rotação*.

O mapa é definido dentro de um anel  $a \leq P_t \leq b$ , onde  $a$  e  $b$  são constantes positivas. Dentro deste intervalo o número de rotação  $\nu$  é assumido ser uma função monotonicamente crescente de  $P_t$ . Agora, perturbamos o mapa adicionando dois pequenos termos

$$\begin{aligned} P_{t+1} &= P_t + f(P_t, Q_t) \\ Q_{t+1} &= Q_t + 2\pi\nu(P_t) + g(P_t, Q_t) \end{aligned} \tag{2.17}$$

onde  $f$  e  $g$  precisam ser funções de  $Q$  com período  $2\pi$ . Supõe-se que estas funções são pequenas e diferenciáveis um número suficiente de vezes. O mapa dado pela equação (2.17) precisa continuar preservando a área. Podemos então fazer uma pergunta: As curvas invariantes do mapa (2.16) ainda existem no mapa levemente perturbado (2.17)? Assim formulada a questão é um tanto vaga e não se pode responder nem que sim, nem que não. É necessário que sejamos mais específicos. É importante saber que a propriedade essencial que caracteriza uma curva invariante é seu número de rotação, e que a maneira correta para responder a questão é como se segue: dada uma curva invariante particular do mapa (2.16),

com um número de rotação  $\nu$ , existe no mapa (2.17) uma curva invariante com forma ligeiramente diferente, e cujos pontos sucessivos são arranjados de acordo com o mesmo número de rotação  $\nu$ ?

O teorema de Moser responde particularmente este problema fornecendo uma condição *suficiente* para a existência das curvas invariantes perturbadas. A condição é que  $\nu$  precisa estar *suficientemente longe de valores racionais*. Isto significa que  $\nu$  precisa satisfazer a seguinte desigualdade:

$$\left| \nu - \frac{r}{s} \right| > \frac{\kappa(\epsilon)}{s^{2.5}} \quad (2.18)$$

para todos os números racionais  $r/s$ .  $\kappa$  é uma constante pequena que depende da amplitude da perturbação dos termos  $f$  e  $g$ . A condição dada pela equação (2.18) exclui um intervalo finito em torno de cada racional, e intuitivamente somos levados a pensar que ela exclui todos os números. Surpreendentemente, este não é o caso. Pelo contrário, a maioria dos valores de  $\nu$  não são excluídos. Pode-se mostrar isto. Primeiro note que  $\nu$  é definido sendo módulo 1, de maneira que é suficiente considerar o intervalo  $[0,1]$ . Para um dado valor de  $s$ , os valores possíveis de  $r$  estão no intervalo entre 0 e 1 e a soma de todos os intervalos excluídos pela equação (2.18) é  $2\kappa s^{-3/2}$ . Falta somente fazer a soma sobre  $s$ . Ao ser feita, superestimamos a medida  $L$  dos valores excluídos, porque contamos muitos intervalos mais de uma vez. Portanto, verifica-se para  $L$ :

$$L < \sum_{j=1}^{\infty} 2 \frac{\kappa}{s^{-3/2}} \simeq 5.224\kappa \quad (2.19)$$

Desta maneira o teorema de Moser especifica que a maioria das curvas invariantes será preservada sob uma pequena perturbação para valores de  $\nu$  suficientemente irracionais<sup>2</sup>.

---

<sup>2</sup>Falar em números suficientemente irracionais pode parecer um tanto estranho, pois como sabemos, existem os números racionais e os irracionais. No entanto, alguns números são realmente mais irracionais do que outros. Os mais irracionais são aqueles que se aproximam do

### 2.9.2 Teorema de Arnold

Em 1963, Arnold forneceu a prova do teorema KAM. Sua prova apresenta algumas diferenças em relação àquela apresentada por Moser

1. considera um sistema dinâmico, definido por uma Hamiltoniana.
2. é aplicada a qualquer número de graus de liberdade, enquanto o Teorema de Moser corresponde somente ao caso de dois graus de liberdade.
3. por outro lado, ele assume que a Hamiltoniana é analítica, enquanto o Teorema de Moser assume que o mapeador é diferenciável um número finito de vezes.

Na essência o teorema de Arnold e Moser são completamente similares [37]. Primeiramente, considera-se um sistema Hamiltoniano integrável  $H_o(I)$ , e neste sistema  $n$ -toros particulares, caracterizados por suas  $n$  freqüências  $\omega_1, \dots, \omega_n$ . Adiciona-se uma pequena perturbação ( $\varepsilon \rightarrow 0$ ) à Hamiltoniana  $H_o$  e pergunta-se quando os  $n$ -toros invariantes permanecem com estas freqüências?

A resposta será sim se os  $\omega_i$  estão suficientemente longe daquelas relações de comensarubidade, isto significa que:

$$\left| \sum_{k=1}^n m_k \omega_k \right| > \kappa(\varepsilon) \left( \sum_{k=1}^n |m_k| \right)^{-\gamma} \quad (2.20)$$

onde  $\kappa$  e  $\gamma$  são constantes para qualquer conjunto de inteiros  $m_i$  (não todos zero).  $\gamma$  é fixo, mas  $c$  depende da amplitude da perturbação.

Esta condição é menos restritiva do que a de Moser, e desta maneira, poucos pontos são excluídos.

No entanto precisa-se ter em mente que o teorema KAM somente dá condições suficientes para a existência de curvas invariantes ou toros invariantes. Ele nada

---

*número de ouro* [32] e, desta maneira o último toro a ser destruído será aquele com  $\nu$  mais irracional, ou seja, aquele cuja  $\nu$  mais se aproxima do número de ouro.

diz para as regiões excluídas pelas equações (2.18) e (2.20). Em outras palavras, ao contrário do que muitas vezes se acredita, o teorema não especifica quais curvas e toros invariantes são destruídos na vizinhança das ressonâncias, ou se a perturbação torna-se grande, embora sejamos levados a pensar que tal coisa aconteça quando analisamos resultados numéricos.

Uma das conseqüências do teorema KAM é a rigorosa prova da estabilidade dos pontos fixos elípticos, no caso, de um mapeador bidimensional correspondendo a um sistema dinâmico com dois graus de liberdade. Antes deste teorema ser provado, podia se dizer que eram linearmente estáveis na aproximação linear, mas nada podia ser dito sobre o que acontece quando a não linearidade é levada em conta. Do teorema KAM, pode ser deduzido (excluindo-se alguns casos) que curvas invariantes fechadas existem em qualquer vizinhança, entretanto pequena, de um ponto fixo elíptico. Por outro lado, uma trajetória que começa dentro de uma curva invariante fechada precisa permanecer dentro dela o tempo todo, porque a região interna é mapeada dentro dela mesma. Isto é suficiente para provar a estabilidade. Os casos excluídos são aqueles onde os autovalores são  $e^{\pm i\alpha}$  com  $\alpha = 2\pi p/q$ , onde  $p$  e  $q$  são inteiros e  $q \leq 4$  de acordo com Moser.

Mais geralmente, cada região anelar limitada por duas curvas invariantes concêntricas é por si mesma uma região invariante, que se mapeia sobre si mesma, e da qual as trajetórias não podem escapar. Para casos com mais de dois graus de liberdade a situação é diferente [37]. Lembremos que os sistemas com dois graus de liberdade têm uma propriedade especial: o toro (bidimensional) estratifica a superfície de energia  $E$  (tridimensional). Portanto, as órbitas irregulares, que passeiam através das regiões onde os toros racionais são destruídos, estão aprisionadas entre os toros irracionais remanescentes, e podem explorar uma região de  $E$  que, enquanto 3-D, é restrita e desconectada das outras regiões irregulares na  $E$  (fig. (2.6)). Para mais graus de liberdade, entretanto, o toro não estratifica  $E$ . Para três graus de liberdade o toro é tridimensional e a superfície de

energia é 5-dimensional. Então as lacunas formam uma única região conectada, e é concebível, embora não provado, que uma única órbita irregular pode cobri-la totalmente. Os toros são então como linhas em três dimensões, como podemos ver na figura (2.7). A possibilidade da assim chamada difusão de Arnold das órbitas irregulares significa que para  $N > 2$  a existência de toros invariantes não é garantia de estabilidade do movimento [34].

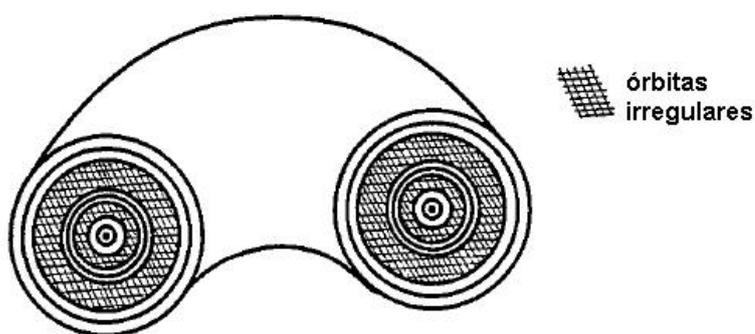


Figura 2.6: toro 2-D de um sistema com dois graus de liberdade.

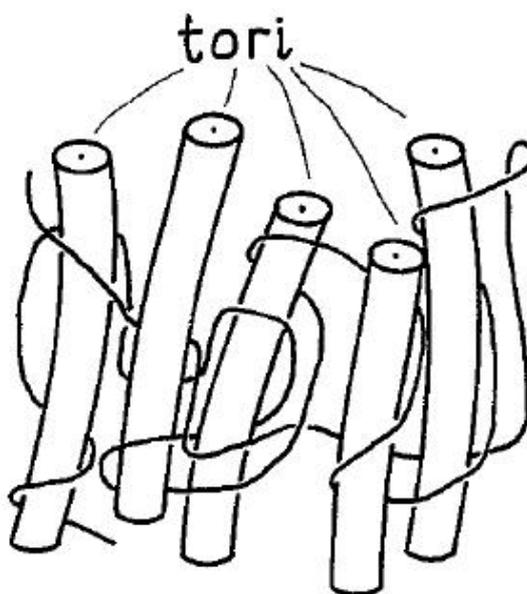


Figura 2.7: toro 3-D de um sistema com três graus de liberdade.

## Capítulo 3

### Caos Quântico

No final do século XIX e início do século XX estava claro que a Física precisava ser completamente reformulada. Um número crescente de fenômenos e observações não era adequadamente, ou nem mesmo aproximadamente, descrito pela Física Newtoniana e pelo Eletromagnetismo de Maxwell. Problemas geravam-se especialmente na tentativa de fornecer uma explicação para fenômenos envolvendo partículas *pequenas* tais como elétrons e átomos e suas interações com campos eletromagnéticos [41]. A Mecânica Quântica surgiu para explicar fenômenos microscópicos para os quais a Mecânica Newtoniana não fornecia resultados satisfatórios [42].

Por outro lado, em 1917, Einstein publicou um trabalho intitulado *Sobre o teorema quântico de Sommerfeld e de Epstein* [43], propondo uma generalização da regra de quantização de Bohr, Sommerfeld e Epstein para sistemas multidimensionais integráveis. Neste trabalho, Einstein nota que sistemas não-integráveis não podem ser quantizados dessa maneira. Essa observação indica pela primeira vez a não-trivialidade do limite semiclássico de sistemas caóticos, e pode ser considerado como pioneiro da teoria de Caos Quântico [44].

### 3.1 Integrabilidade Quântica

Como nos sistemas Hamiltonianos clássicos, há um sentido de integrabilidade nos sistemas quânticos. As simetrias também conduzem às grandezas conservadas na Mecânica Quântica na forma de números quânticos, que são os autovalores do operador que *geram* a transformação sob o qual o sistema é invariante (isto é, o operador contraparte das grandezas conservadas classicamente). Para um problema quântico  $n$ -dimensional, se há  $n$  operadores  $I_k$  associados com grandezas conservadas que comutam aos pares,

$$[I_j, I_k] = I_j I_k - I_k I_j = 0 (\forall j, k \in \{1, \dots, n\}) \quad (3.1)$$

os  $n$  (*simultaneamente*) autovalores do operador especificam completamente o estado do sistema bem como sua evolução temporal. (Como um exemplo, estes operadores são convencionalmente  $\mathbf{H}$ ,  $\mathbf{L}^2$  e  $\mathbf{L}_z$  para o problema de força central/átomo de hidrogênio). Ter os comutadores dos operadores nulos, é semelhante ao caso de *involução* clássico. Não integrabilidade quântica ocorre quando as simetrias são quebradas, conduzindo à perda de *bons* números quânticos (conservados). Devido a não-integrabilidade clássica conduzir ao comportamento caótico, pode-se esperar que algo similar aconteça para sistemas quânticos não-integráveis. Entretanto, como veremos a seguir, não há caos em sistemas quânticos (pelo menos quando há um limite clássico sensível e do ponto de vista de definição de caos clássico), mesmo na ausência das simetrias [2].

### 3.2 Caos em sistemas quânticos

Uma das razões para a dificuldade de se definir o caos em sistemas quânticos é que o caos está geralmente definido em termos da separação das trajetórias, ou seja, sensibilidade exponencial às condições iniciais (trajetórias vizinhas separam-

se exponencialmente uma das outras). Vamos considerar uma tentativa análoga em sistemas quânticos. Uma medida de uma *distância* entre dois pacotes de onda quânticos é o produto interno; ou seja, se temos dois estados quânticos  $|\psi_1\rangle$  e  $|\psi_2\rangle$ , então podemos considerar  $\langle\psi_2|\psi_1\rangle$  como uma medida de sua separação. Se considerarmos a evolução dos dois estados sob um Hamiltoniano  $\hat{H}$ , então podemos usar o fato que tal evolução quântica é unitária, significando que há um operador  $U(t, t_o)$  tal que:

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_o)|\psi(t_o)\rangle \quad (3.2)$$

Este é o *operador evolução temporal* e satisfaz  $U^\dagger U = 1$ .

$$\langle\psi_2(t)|\psi_1(t)\rangle = \langle\psi_2(0)|U^\dagger(t, 0)U(t, 0)|\psi_1(0)\rangle \quad (3.3)$$

$$= \langle\psi_2(0)|\psi_1(0)\rangle \quad (3.4)$$

Assim, a sobreposição é preservada pela evolução, implicando que os pacotes de onda não se afastam. Pode-se concluir daí que não há caos na Mecânica Quântica. A conclusão está certamente correta, mas o raciocínio é falho. A razão é que este mesmo argumento pode ser aplicado à integral de sobreposição de duas distribuições clássicas no espaço da fase; a sobreposição, neste caso, é preservada em consequência do Teorema de Liouville [29], que indica que as áreas são preservadas pela evolução Hamiltoniana. O ponto é que as funções de onda não são exatamente comparáveis às trajetórias, assim que a definição usual do caos não pode ser passada diretamente à Mecânica Quântica [42].

Portanto, nesses termos, não há caos quântico, mas certamente há caos clássico. Como fica então o Princípio da Correspondência? Esse princípio, formulado por Bohr em 1923 pode ser resumido na frase: “*A teoria quântica deve se aproximar da clássica assintoticamente no limite dos grandes números quânticos, ou seja, quando  $\hbar \rightarrow 0$* ”, [45, 46].

O ponto central dessa aparente inconsistência é discutido por Berry [47] e reside na não-analiticidade do limite  $\hbar \rightarrow 0$ . Berry [47] toma como exemplo, um sistema que não apresenta caos, a interferência entre duas fontes de luz coerente equidistantes do observador. A intensidade é dada pela superposição de duas ondas com momentos,  $\Psi_+$  com momento  $+p$  e  $\Psi_-$  com momento  $-p$ ,

$$\Psi_+ = e^{ipq/\hbar} \quad (3.5)$$

$$\Psi_- = e^{-ipq/\hbar} \quad (3.6)$$

$$|\Psi_+ + \Psi_-|^2 = 4 \cos^2\left(\frac{pq}{\hbar}\right) \quad (3.7)$$

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

$$I_{classica} = \lim_{\Delta q \rightarrow 0} \lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta q} \int_{q-\Delta q/2}^{q+\Delta q/2} 4 \cos^2\left(\frac{pq'}{\hbar}\right) dq' \quad (3.8)$$

$$= \lim_{\Delta q \rightarrow 0} \lim_{\hbar \rightarrow 0} \left[ 2 + 2 \frac{2\hbar}{p\Delta q} \sin\left(\frac{p\Delta q}{2\hbar}\right) \cos\left(\frac{pq}{\hbar}\right) \right] \quad (3.9)$$

$$= 2 \quad (3.10)$$

Deve-se notar que os limites  $\hbar \rightarrow 0$  e  $\Delta q \rightarrow 0$  não comutam. Um outro caso muito importante é a não comutatividade dos limites  $\hbar \rightarrow 0$  e  $t \rightarrow \infty$ . O estudo do espectro de energias está ligado aos estados estacionários e, nesse caso, o limite  $t \rightarrow \infty$  é inevitável. Por outro lado, caos clássico implica em ergodicidade<sup>1</sup> e *mistura*<sup>2</sup> (mixing), propriedades que só podem ser verificadas

<sup>1</sup>Hipótese ergódica: No decorrer do tempo o sistema explora toda a região do espaço de fase energeticamente disponível (a superfície de energia) e acaba por cobrir essa região uniformemente. Desta maneira, pode-se substituir médias temporais por médias sobre a superfície de energia no espaço de fase. Esta hipótese fundamenta a Física Estatística, mas em geral ela é falsa [34, 48].

<sup>2</sup>sistemas misturantes são sistemas ergódicos. Escolhendo duas regiões arbitrárias  $A$  e  $B$

num intervalo infinito de tempo. Aí parece residir a não-trivialidade do Princípio da Correspondência, pois para fazer aflorar o caos clássico a partir da dinâmica quântica, ambos os limites devem ser tomados simultaneamente [42].

A discussão acima sugere que Caos Quântico deve ser encarado como um estudo do limite semiclássico de sistemas cujos análogos clássicos sejam caóticos. Em particular, deve-se buscar propriedades que sejam típicas de sistemas caóticos e que não ocorram em sistemas integráveis. Uma dessas propriedades é fornecida pela distribuição dos primeiros vizinhos  $P(X)$  (NND<sup>3</sup>) dos níveis de energia, dada na figura (3.1). A NND é definida considerando um dado conjunto finito e ordenado de  $n$  níveis de energia  $E_1 = E_2 = \dots = E_n$ , e  $X$  é a distância entre os níveis vizinhos. Tipicamente  $P(X)$  segue a distribuição de Poisson,  $P(X) = e^{-X}$ , no caso integrável e distribuição GOE (Gaussian orthogonal ensemble),  $P(X) = \frac{\pi}{2} X e^{-\frac{\pi}{4} X^2}$ , ou GUE (Gaussian unitary ensemble),  $P(X) = \frac{32}{\pi} X^2 e^{-\frac{4}{\pi} X^2}$ , da Teoria de Matrizes Aleatórias (RMT), no caso caótico [12, 49].

### 3.3 Limite semiclássico

A integral de caminho de Feynman fornece um método ideal para se ir da Mecânica Quântica para o seu caso limite, a Mecânica Clássica. Esta possibilidade foi claramente vista por Dirac e Feynman. Eles também entenderam que a integral de caminho era capaz de dar uma interpretação sensível aos princípios variacionais da Mecânica Clássica [50, 51].

A integral de caminho calcula a amplitude de probabilidade  $K(q'', t''; q', t')$  para uma partícula sair de um posição inicial em  $q'$  no tempo  $t'$  e chegar na posição final em  $q''$  no tempo  $t''$ , onde  $q$  pode ser um vetor em qualquer número

sobre a superfície de energia  $e$ , assumimos que inicialmente todos os pontos estão em  $A$ . O sistema é misturante se, evoluindo no tempo, a fração de pontos que estão em  $A$  ou  $B$  no limite  $t \rightarrow \pm\infty$  serão iguais a fração da área na superfície de energia ocupadas por  $A$  e  $B$ , respectivamente [48].

<sup>3</sup>do inglês Nearest Neighbors Distribution [49].

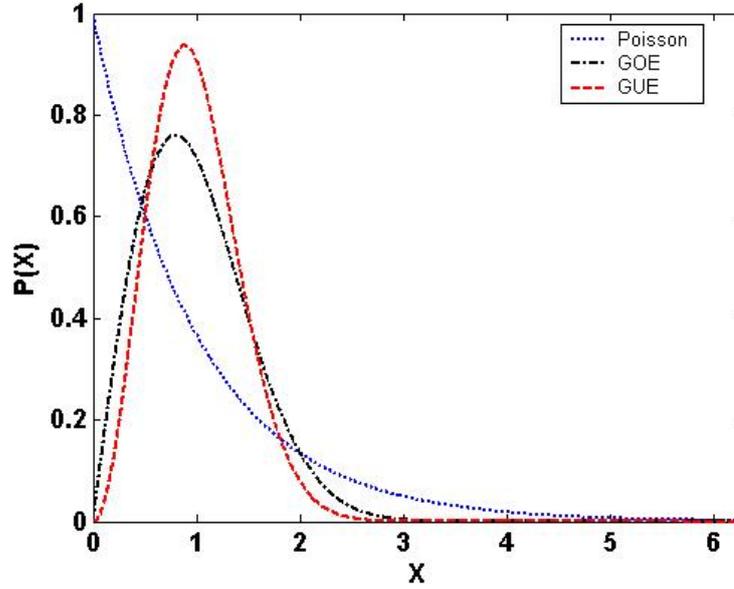


Figura 3.1: Previsões teóricas das NND para sistemas integráveis (linha pontilhada) e sistemas caóticos GOE (linha traço ponto) e GUE (linha tracejada)

de dimensões [52]. Este propagador  $K$  é dado por uma integral sobre todos os caminhos  $q(t)$  conectando os dois pontos finais no intervalo de tempo estipulado:

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \tau} \right)^{N/2} \int dq_1 \dots \int dq_{N-1} e^{i \int L(\dot{q}, q)} \quad (3.11)$$

quando  $N \rightarrow \infty$ . O intervalo de tempo de  $t'$  a  $t''$  é dividido em  $N$  passos de comprimento  $\tau = (t'' - t')/N$ . Os pontos intermediários no caminho são chamados de  $(q_j, t_j)$  com  $j = 0, 1, \dots, N$ , onde  $(q_0, t_0) = (q', t')$  e  $(q_N, t_N) = (q'', t'')$ . É importante notar que na equação (3.11) é a Lagrangeana que aparece no expoente do integrando e não a Hamiltoniana. As velocidades são expressas em termos de diferenças finitas.

Se a integral da Lagrangeana sobre todas as trajetórias clássicas entre dois pontos finais é grande comparada com a constante de Planck, somente os caminhos na sua vizinhança irão contribuir para a equação (3.11), porque os outros cancelam-se por interferência destrutiva [52].

A integral de caminho de Feynman dá informações básicas de como é o propa-

gador  $K$  e é válida para sistemas dependentes do tempo. Entretanto, o espectro pode ser somente obtido para sistemas independentes do tempo, e a transição requer uma transformada de Fourier com relação à variável temporal  $t = t'' - t'$ . Obtém-se assim a função de Green:

$$G(q'', q', E) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^{+\infty} dt K(q'', t; q', 0) e^{\frac{iEt}{\hbar}} \quad (3.12)$$

que converge para valores complexos de  $E$  com uma parte imaginária positiva. A expansão em termos das autofunções pode ser escrita da forma:

$$G(q'', q', E) = \sum_j \frac{\phi_j(q'') \phi_j^*(q')}{E - E_j} \quad (3.13)$$

onde  $H|\psi_j\rangle = E_j|\psi_j\rangle$ , sendo  $\hat{H}$  o operador Hamiltoniano quântico específico do problema.

Em qualquer caso, o limite semiclássico ( $\hbar \rightarrow 0$ ) na integral de caminho requer que a primeira variação seja nula, e portanto define as equações diferenciais ordinárias para as trajetórias clássicas. O limite clássico da integral de caminho exige a integração sobre todos os desvios possíveis da menor ordem depois da primeira, ou seja, da segunda variação da integral sobre a Lagrangeana. As duas características fornecem a aproximação semiclássica  $K_c$  do propagador como uma soma das trajetórias clássicas entre os pontos finais dados:

$$K_c(q'', q', t) = \sum_{traj.class.} \frac{\sqrt{C}}{(2\pi i\hbar)^{f/2}} e^{[iR(q'', t''; q', t')/\hbar - ik\pi/2]} \quad (3.14)$$

onde  $R(q'', t''; q', t')$  é a integral sobre a Lagrangeana ao longo de uma trajetória particular, e  $C$  é o determinante da segunda derivada com relação a  $q''$  e  $q'$  de  $R$ .

Na aproximação semiclássica para a função de Green  $G_c$ , é feita a transformada de Fourier substituindo a equação (3.14) na equação (3.12). O método de

fase estacionária parece ser compatível com o limite clássico. Assim obtemos:

$$G_c(q'', q', E) = \frac{2\pi}{(2\pi i \hbar)^{f/2}} \sum_{traj.class} \sqrt{(-1)^{f+1}} e^{iS(q'', q', E)/\hbar - i\lambda\pi/2} \quad (3.15)$$

onde  $S(q'', q', E)$  é a integral sobre  $\vec{p}d\vec{q}$  ao longo das trajetórias dadas pela energia  $E$ . O termo  $\lambda\pi/2$  representa a perda de fase e vem do número de pontos conjugados ao longo da trajetória na energia constante  $E$ , ou seja, quantas vezes as trajetórias que começam no mesmo lugar, mas em direções um pouco diferentes, cortam a trajetória original.

Para calcular o traço da função de Green  $g(E)$ , ou do propagador, os dois pontos finais precisam ser idênticos, ou seja,  $q'' = q' = q$ , e a integração sobre  $q$  é feita

$$g(E) = \int dq G(q, q, E) \quad (3.16)$$

Na aproximação clássica  $G_c$  ou  $K_c$ , as trajetórias clássicas agora começam e terminam no mesmo ponto  $q$ . Em geral, as trajetórias clássicas tornam-se *circuitos* fechados cujas tangentes (momentos) no início não coincidem com as tangentes (momentos) no final. Cada *circuito* contribui com uma integral para o traço clássico  $g_c(E)$

$$\frac{\partial}{\partial q} S(q, q, E) = \left[ \frac{\partial S(q'', q', E)}{\partial q''} + \frac{\partial S(q'', q', E)}{\partial q'} \right]_{q''=q'=q} = p'' - p' \quad (3.17)$$

ou seja, com a mudança no momento. O argumento de fase estacionária diz que a contribuição de um *circuito* fechado particular é grande quando o momento não muda, ou seja, a trajetória fecha-se suavemente como se a partícula continuasse na órbita periódica. O traço clássico torna-se uma soma sobre todas as órbitas periódicas em menor potência, de uma expansão em potências da constante de

Planck  $\hbar$ .

$$g_c(E) = g_o(E) + \frac{1}{i\hbar} \sum_p \sum_n T(E) A(E, n) \cos \left( n \left( \frac{S(E)}{\hbar} - \frac{\pi\mu}{2} \right) \right) \quad (3.18)$$

sendo que

$$A(E, n) = \frac{1}{\pi\hbar \sqrt{|Det(M_p^n - 1)|}} \quad (3.19)$$

é a amplitude de estabilidade onde  $\sqrt{|Det(M_p^n - 1)|}$  é a raiz do determinante da matriz monodromia. Ela depende se os autovalores do mapa linear são: parabólico (integrável), elíptico (localmente estável) ou hiperbólico (instável);  $T$  é o período da órbita primitiva,  $S$  é a ação clássica dada por  $S(E) = \int \vec{p}d\vec{q}$  e  $\mu$  é o número de pontos conjugados, ou seja, ele conta o número de pontos ao longo da trajetória onde a aproximação semiclássica não pode ser aplicada. O primeiro termo  $g_o(E)$  vem das órbitas periódicas de comprimento zero, e dá um número que vai aumentando suavemente de acordo com a lei de Weyl [53].

De uma forma geral a eq. (3.18) pode ser escrita como a soma de duas partes

$$g_c(E) = g_o(E) + g^{fl}(E) \quad (3.20)$$

ou seja, a soma de uma parte média da densidade de níveis mais uma parte flutuante que depende da soma sobre todas as órbitas periódicas primitivas<sup>4</sup> ( $p$ ) e suas repetições<sup>5</sup> ( $n$ ). Essencialmente a densidade de estados, no limite semiclássico, é dada por uma parte média (densidade de estado clássica) mais correções que dependem de uma soma sobre todas as órbitas periódicas clássicas, ou seja, a parte flutuante somente depende de quantidades clássicas.

---

<sup>4</sup>Uma órbita periódica primitiva é uma órbita que não é um múltiplo de uma órbita periódica mais curta.

<sup>5</sup> $n$  voltas sobre a mesma órbita primitiva.

# Capítulo 4

## Dinâmica do Mapa

Em nosso trabalho usaremos o modelo simetrizado do mapa padrão de Chirikov [4, 23, 54] para o estudo do *time delay* no capítulo 5 e da condutância no capítulo 6. Antes, porém, achamos conveniente analisar a dinâmica clássica e quântica deste sistema *fechado e aberto* de acordo com os aspectos teóricos que discutimos nos capítulos anteriores, capítulo 2 e capítulo 3. Trataremos brevemente das definições, para em seguida fazer os cálculos dos pontos fixos, órbitas de período 1 e 2, bifurcações, estabilidade destes pontos fixos, quantização de mapa e operador evolução temporal, que são importantes para as análises dos capítulos 5 e 6. Para uma revisão mais detalhada, o leitor pode consultar a bibliografia citada ao longo do texto.

### 4.1 Sistema Fechado

#### 4.1.1 *Kicked rotator*

Começaremos com a descrição do modelo. O sistema não perturbado e fechado é uma partícula movendo-se ao longo de um círculo. A Hamiltoniana deste sis-

tema é dada por [33]:

$$H_o = \frac{J^2}{2I} \quad (4.1)$$

onde  $J$  é o momento angular da partícula e  $I$  seu momento de inércia. Este é um sistema dinâmico integrável onde  $J$  é uma constante de movimento, e o toro no qual o movimento ocorre é unidimensional. São círculos com  $J$  constante, conforme discutido na seção (2.6).

Agora supomos que o sistema seja perturbado por uma força  $\vec{F}$  externa, periódica, aplicada em  $t = 0, \tau, 2\tau, \dots$ , de magnitude e direção fixa. A força é sempre aplicada à uma distância  $l$  do pivô, e seu período é  $\tau$ . Isto significa que entre os *chutes* o momento angular  $J$  é constante, e a cada *chute* ele aumenta de acordo com o torque aplicado. O torque neste caso é  $Fl \sin \theta \equiv \kappa \sin \theta$ , onde  $\kappa$  pode ser definido como um parâmetro de perturbação. A Hamiltoniana perturbada e explicitamente dependente do tempo que fornece as equações de movimento corretas é:

$$H = \frac{J^2}{2I} + \kappa \cos \theta \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(t - n\tau) \quad (4.2)$$

onde a variável  $\theta$  é a coordenada angular da partícula.

Por conveniência usa-se  $I/\tau = 1$  e reescrevendo a Hamiltoniana (4.2) em termos das variáveis reescaladas  $q$  e  $p$ , onde:

$$q = \frac{\theta}{2\pi} \quad (4.3)$$

$$p = \frac{J\tau}{2\pi I} \quad (4.4)$$

pode-se escrever a Hamiltoniana adimensional:

$$H = \frac{p^2}{2} + \frac{\kappa}{(2\pi)^2} \cos(2\pi q) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(t - n) \quad (4.5)$$

Usando as equações de Hamilton, as equações (2.1) e (2.2) e a equação (4.5) obtemos:

$$\dot{p} = \frac{dp}{dt} = \frac{\kappa}{2\pi} \sin(2\pi q) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(t - n) \quad (4.6)$$

$$\dot{q} = \frac{dq}{dt} = p \quad (4.7)$$

Estas equações nos informam que  $\dot{p}$  e conseqüentemente  $\dot{q}$  são constantes entre os *chutes*. Elas também fornecem a correta mudança de  $p$  em cada *chute*. Além disso, supõe-se que no tempo  $t = n$  o rotor chega em  $q = q_t$  com momento  $p_{t+1}$  dado através da integração da equação (4.6):

$$\begin{aligned} \int dp &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{n-\epsilon}^{n+\epsilon} \frac{\kappa}{2\pi} \sin(2\pi q) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(t - n) dt \\ p_{t+1} - p_t &= \frac{\kappa}{2\pi} \sin(2\pi q_t) \\ p_{t+1} &= p_t + \frac{\kappa}{2\pi} \sin(2\pi q_t) \end{aligned} \quad (4.8)$$

onde  $\epsilon$  é uma quantidade infinitesimal e a integração da equação (4.7) obtemos:

$$\begin{aligned} \int dq &= \int p dt \\ q_{t+1} - q_t &= p_{t+1} \\ q_{t+1} &= q_t + p_{t+1} \end{aligned} \quad (4.9)$$

Desta forma, o mapa padrão de Chirikov é dado por:

$$\begin{aligned} q_{t+1} &= q_t + p_{t+1} && (\text{mod } 1) \\ p_{t+1} &= p_t + \frac{\kappa}{2\pi} \sin(2\pi q_t) && (\text{mod } 1) \end{aligned} \quad (4.10)$$

onde (mod1) significa que o resto da divisão de  $q_{t+1}$  e  $p_{t+1}$  por 1 são os valores assumidos por estas grandezas, isto é,  $\{q, p \in [0, 1)\}$ .

Portanto, classicamente, o mapa padrão descreve uma partícula movendo-se livremente sobre um círculo sujeita a uma perturbação periódica, em intervalos  $\tau$ , com intensidade  $\kappa$ . Dependendo do valor do parâmetro  $\kappa$ , o regime de movimento pode ser regular ou caótico. Neste trabalho, porém, utilizamos uma versão simetrizada do mapa padrão. Neste caso, representa-se o *chute* por uma função delta simetrizada dada por:

$$\delta_s(t) = \frac{1}{2}\delta(t - \epsilon) + \frac{1}{2}\delta(t + \epsilon) \quad (4.11)$$

Repetindo os cálculos de integração das equações (4.7) e (4.6), com a função delta simetrizada, a equação (4.11), de forma análoga ao que foi feito anteriormente, obtemos a versão simetrizada do mapa padrão com o qual faremos todos os cálculos numéricos

$$\begin{aligned} q_{t+1} &= q_t + p_t + \frac{\kappa}{4\pi} \sin(2\pi q_t) && (mod\ 1) \\ p_{t+1} &= p_t + \frac{\kappa}{4\pi} [\sin(2\pi q_t) + \sin(2\pi q_{t+1})] && (mod\ 1) \end{aligned} \quad (4.12)$$

A seção de Poincaré do mapa (4.12) pode ser visualizada na figura (4.1), na qual mostramos algumas seções para diferentes valores do parâmetro de perturbação  $\kappa$ . Lembrando da discussão na seção (2.6), em sistemas com 1 grau de liberdade a forma dos toros é um cilindro com  $\{q, p \in [0, 1)\}$ . Para  $\kappa = 0$  o sistema é integrável e todas as trajetórias permanecem no toro unidimensional no espaço de fase. Para  $\kappa > 0$  o sistema começa sua transição para o caos. Para  $\kappa$  suficientemente pequeno as curvas seguem suavemente. E aumentando  $\kappa$ , as curvas vão sendo quebradas de maneira como é descrito pelo teorema KAM na seção (2.9).

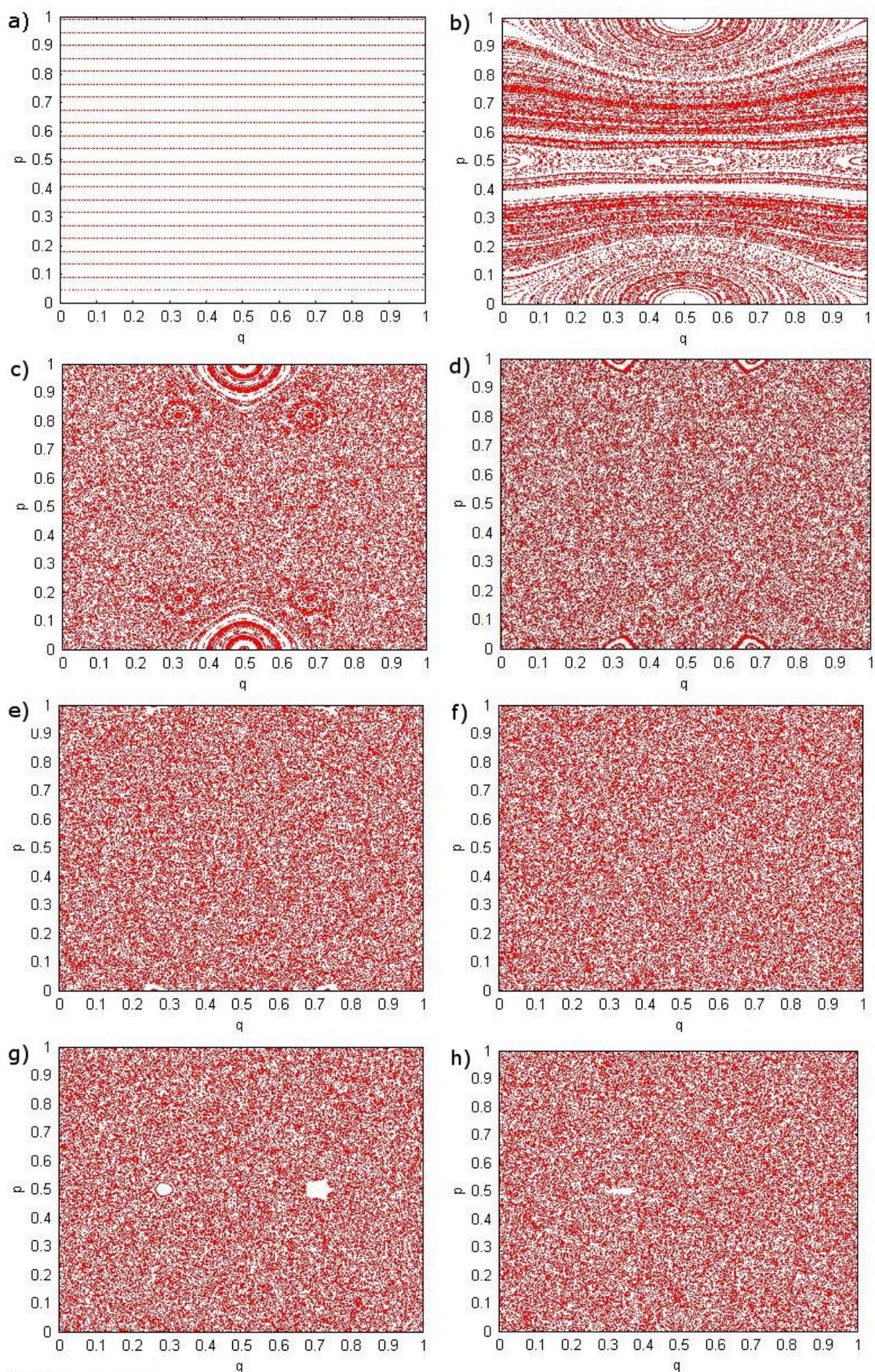


Figura 4.1: Espaço de fase do mapa (4.12); a)  $\kappa = 0$ , b)  $\kappa = 0.5$ , c)  $\kappa = 2.5$ , d)  $\kappa = 5$ , e)  $\kappa = 6$ , f)  $\kappa = 2\pi$ , g)  $\kappa = 6.5$  e h)  $\kappa = 7.5$ .

## 4.2 Pontos Fixos

Suponhamos que  $f(q)$  seja uma função real e que  $q$  pertença ao domínio desta função. A seqüência de números  $q, f(q), f(f(q)), f(f(f(q))), \dots$ , conhecida como *as iteradas* de  $q$ , constituem o que chamamos de *órbita* do ponto  $q$ . Desta maneira, se todos os pontos  $q, f(q), f^{(2)}(q), f^{(3)}(q), \dots, f^{(n-1)}(q)$  são distintos, eles formam a *órbita periódica* de *período- $n$*  ou *ciclo- $n$*  de  $q$ . Sendo assim, os pontos que se repetem a cada iterada são ditos serem de período 1 e, usualmente são denominados de *pontos fixos*, os pontos que se repetem a cada duas iteradas são de período 2 e assim sucessivamente [38].

Analisando a equação da coordenada de posição  $q_{t+1}$  do mapa (4.12), ou seja, a primeira equação do mapa e usando o fato que para as órbitas de período 1 temos:

$$\begin{aligned} q_{t+1} &= q_t = q_o \\ p_{t+1} &= p_t = p_o \end{aligned} \quad (4.13)$$

obtemos a seguinte relação:

$$p_o + \frac{\kappa}{4\pi} \sin(2\pi q_o) = 0 \pmod{1} \quad (4.14)$$

mas como a equação acima é ( $\pmod{1}$ ) pode ser reescrita como

$$p_o + \frac{\kappa}{4\pi} \sin(2\pi q_o) = l \quad (4.15)$$

onde  $l$  é qualquer número inteiro. Esta equação pode ser escrita como:

$$p_o = l - \frac{\kappa}{4\pi} \sin(2\pi q_o) \quad (4.16)$$

Analisando a equação do momento  $p_{t+1}$  do mapa (4.12), ou seja, a segunda

equação do mapa e substituindo as relações (4.13) obtemos a seguinte equação:

$$\frac{\kappa}{4\pi} [\sin(2\pi q_t) + \sin(2\pi q_{t+1})] = 0 \pmod{1} \quad (4.17)$$

$$\frac{\kappa}{2\pi} \sin(2\pi q_o) = 0 \pmod{1}; \quad (4.18)$$

mas como a equação acima também é  $(\text{mod}1)$  pode ser reescrita como

$$\frac{\kappa}{2\pi} \sin(2\pi q_o) = m \quad (4.19)$$

$$\sin(2\pi q_o) = m \frac{2\pi}{\kappa} \quad (4.20)$$

onde  $m$  é qualquer número inteiro.

No entanto, sabemos que a função  $\sin(\theta)$  assume somente valores entre  $-1$  e  $1$ . Portanto, agora, vamos estudar as soluções possíveis para as duas equações obtidas:

$$\sin(2\pi q_o) = m \frac{2\pi}{\kappa} \quad (4.21)$$

$$p_o = l - \frac{\kappa}{4\pi} \sin(2\pi q_o) \quad (4.22)$$

### 4.2.1 Determinando os Pontos de período 1

Os pontos de período 1, para o mapa (4.12), podem ser determinados a partir das soluções reais possíveis para as equações (4.21) e (4.22).

1) Soluções para  $\kappa < 2\pi$ :

Neste caso, o lado direito da equação (4.21) é sempre  $> 1$  de maneira que as únicas soluções possíveis são para  $m = 0$ . Assim, temos que

$$\sin(2\pi q_o) = 0 \quad (4.23)$$

A condição para que a equação (4.23) seja satisfeita é que

$$2\pi q_o = n\pi \quad n = 0, 2, 4, \dots \quad (4.24)$$

$$q_o = \frac{n}{2} \quad n = 0 \quad (4.25)$$

Lembramos que  $\{q, p \in [0, 1)\}$  e da equação (4.22) temos que

$$p_o = l \quad l = 0 \quad (4.26)$$

Desta maneira, para todos os inteiros possíveis das equações (4.25) e (4.26), obtemos os seguintes pontos fixos:

$$(q_o, p_o) = (0, 0)$$

$$(q_o, p_o) = \left(\frac{1}{2}, 0\right)$$

2) Soluções para  $\kappa = 2\pi$ :

Neste caso, a equação (4.21) é  $\sin(2\pi q_o) = m$  de maneira que as soluções possíveis são para  $m = -1, 0, 1$ .

a. Para  $m = 0$

$$\sin(2\pi q_o) = 0 \quad (4.27)$$

que é a condição (4.23) e de forma análoga ao que foi feito anteriormente para determinar os pontos fixos obtém-se

$$(q_o, p_o) = (0, 0)$$

$$(q_o, p_o) = \left(\frac{1}{2}, 0\right)$$

b. Para  $m = 1$  temos que

$$\sin(2\pi q_o) = 1 \quad (4.28)$$

Para satisfazer a equação acima é necessário que

$$2\pi q_o = n\frac{\pi}{2} \quad n = 1, 5, 9, \dots \quad (4.29)$$

$$q_o = \frac{n}{4} \quad n = 1 \quad (4.30)$$

pois  $0 < q_o \leq 1$  e da eq. (4.22) temos que

$$p_o = l - \frac{1}{2} \quad l = 0 \quad (4.31)$$

porque  $0 < p_o \leq 1$ . Então, para  $m = 1$  obtemos  $(q_o, p_o) = (\frac{1}{4}, \frac{1}{2})$ .

c. Para  $m = -1$

$$\sin(2\pi q_o) = -1 \quad (4.32)$$

que é satisfeita pela condição

$$2\pi q_o = n\frac{3\pi}{2} \quad n = 1, 5, 9, \dots \quad (4.33)$$

$$q_o = \frac{3n}{4} \quad n = 1 \quad (4.34)$$

E, a partir da equação (4.22) obtemos:

$$p_o = l + \frac{1}{2} \quad l = 0 \quad (4.35)$$

Então, para  $m = -1$  obtemos que  $(q_o, p_o) = (\frac{3}{4}, \frac{1}{2})$ .

3) Soluções para  $\kappa > 2\pi$ :

Por exemplo  $\kappa = 4\pi$ . Neste caso o lado direito da equação

$$\sin(2\pi q_o) = \frac{m}{2} \quad m = -2, -1, 0, 1, 2 \quad (4.36)$$

Aplicando o mesmo procedimento, encontramos os seguintes pontos fixos:

$\kappa$	pontos fixos $(q_o, p_o)$
$< 2\pi$	$(0,0)$ $(\frac{1}{2}, 0)$
$2\pi$	$(0,0)$ $(\frac{1}{2}, 0)$ $(\frac{1}{4}, \frac{1}{2})$ $(\frac{3}{4}, \frac{1}{2})$

Tabela 4.1: Tabela de pontos fixos da versão simetrizada do mapa padrão de Chirikov.

Para  $m = 0 \Rightarrow (q_o, p_o) = (0, 0)$  e  $(q_o, p_o) = (\frac{1}{2}, 0)$

Para  $m = 1 \Rightarrow (q_o, p_o) = (\frac{1}{12}, \frac{1}{2})$  e  $(q_o, p_o) = (\frac{5}{12}, \frac{1}{2})$

Para  $m = -1 \Rightarrow (q_o, p_o) = (\frac{7}{12}, \frac{1}{2})$  e  $(q_o, p_o) = (\frac{11}{12}, \frac{1}{2})$

Para  $m = 2 \Rightarrow (q_o, p_o) = (\frac{1}{4}, 0)$

Para  $m = -2 \Rightarrow (q_o, p_o) = (\frac{3}{4}, 0)$

A tabela (4.1) segue com alguns dos pontos fixos encontrados, relevantes para as análises que serão feitas nos capítulos 5 e 6.

## 4.3 Estabilidade das Órbitas

Na seção (2.8) discutimos como se determina a estabilidade das órbitas. Agora, faremos uso desta discussão para determinar a estabilidade dos pontos de período 1 e de período 2 da versão simetrizada do mapa padrão de Chirikov. Como vimos, para determinar a estabilidade das órbitas calculamos o traço da matriz Jacobiana.

### 4.3.1 Estabilidade das órbitas de período 1

De acordo com a discussão na seção (2.8), para órbitas de período 1, a matriz Jacobiana pode ser escrita como:

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial q_1}{\partial q_o} & \frac{\partial q_1}{\partial p_o} \\ \frac{\partial p_1}{\partial q_o} & \frac{\partial p_1}{\partial p_o} \end{bmatrix}$$

Como estamos interessados no traço da matriz Jacobiana, precisamos calcular apenas a seguinte expressão:

$$T = \frac{\partial q_1}{\partial q_o} + \frac{\partial p_1}{\partial p_o} \quad (4.37)$$

A partir das equações da versão simetrizada do mapa padrão (4.12), pode-se escrever:

$$\begin{aligned} q_1 &= q_o + p_o + \frac{\kappa}{4\pi} \sin(2\pi q_o) \\ p_1 &= p_o + \frac{\kappa}{4\pi} [\sin(2\pi q_1) + \sin(2\pi q_o)] \end{aligned} \quad (4.38)$$

Substituindo as equações do mapa (4.38) em (4.37) obtemos:

$$\frac{\partial q_1}{\partial q_o} = 1 + \frac{\kappa}{2} \cos(2\pi q_o) \quad (4.39)$$

$$\frac{\partial p_1}{\partial p_o} = 1 \quad (4.40)$$

Dessa forma, obtemos que o traço das órbitas de período 1 é dado pela seguinte expressão:

$$T = 2 + \frac{\kappa}{2} \cos(2\pi q_o) \quad (4.41)$$

Agora, podemos verificar a estabilidade dos pontos, inserindo-os na equação acima.

pontos $(q_o, p_o)$	T
$(0,0)$	$2 + \frac{\kappa}{2}$
$(1/2,0)$	$2 - \frac{\kappa}{2}$
$(1/4,1/2)$	2
$(3/4,1/2)$	2

Tabela 4.2: Tabela com o traço de  $J$  para pontos de período 1.

Pontos:

$$(q_o, p_o) = (0, 0) \Rightarrow T = 2 + \frac{\kappa}{2} \quad (4.42)$$

$$(q_o, p_o) = \left(\frac{1}{2}, 0\right) \Rightarrow T = 2 - \frac{\kappa}{2} \quad (4.43)$$

$$(q_o, p_o) = \left(\frac{1}{4}, \frac{1}{2}\right) \Rightarrow T = 2 \quad (4.44)$$

$$(q_o, p_o) = \left(\frac{3}{4}, \frac{1}{2}\right) \Rightarrow T = 2 \quad (4.45)$$

Fizemos todos estes cálculos para determinar a estabilidade dos pontos. Conforme discutiu-se na seção (2.8), para os casos onde  $-2 < T < 2$  as órbitas são elípticas, ou seja, linearmente estáveis, enquanto que para as situações em que  $T < -2$  ou  $T > 2$  as órbitas são hiperbólicas, isto é, linearmente instáveis. Portanto, podemos concluir que o ponto  $(0, 0)$  é linearmente instável (órbita hiperbólica) para qualquer  $\kappa \neq 0$ . O ponto  $(1/2, 0)$  será um ponto elíptico para  $\kappa \neq 0$  e enquanto  $\kappa < 8$ . Já os pontos  $(1/4, 1/2)$  e  $(3/4, 1/2)$  são parabólicos. Através da figura (4.3) podemos ver que nestes pontos, quando  $\kappa = 2\pi$ , ocorrem as bifurcações, que discutiremos na seção (4.4), onde *nasce* uma órbita de período 1 estável e outra instável.

### 4.3.2 Estabilidade das órbitas de período 2

Para órbitas de período 2, podemos escrever que

$$J = \begin{bmatrix} \frac{\partial q_2}{\partial q_o} & \frac{\partial q_2}{\partial p_o} \\ \frac{\partial p_2}{\partial q_o} & \frac{\partial p_2}{\partial p_o} \end{bmatrix}$$

Analogamente ao que foi feito na seção (4.3.1), vamos calcular o traço do determinante do Jacobiano dado por:

$$T = \frac{\partial q_2}{\partial q_o} + \frac{\partial p_2}{\partial p_o} \quad (4.46)$$

Para fazer este cálculo escreve-se  $q_2$  e  $p_2$  em função de  $q_o$  e  $p_o$ . Com ajuda das equações dadas por (4.12) e (4.38) obtém-se:

$$\begin{aligned} q_2 &= q_1 + p_1 + \frac{\kappa}{4\pi} \sin(2\pi q_1) \\ p_2 &= p_1 + \frac{\kappa}{4\pi} [\sin(2\pi q_2) + \sin(2\pi q_1)] \end{aligned} \quad (4.47)$$

$$\begin{aligned} q_2 &= q_o + 2p_o + 2\frac{\kappa}{4\pi} \sin(2\pi q_o) + 2\frac{\kappa}{4\pi} \sin 2\pi(q_o + p_o + \frac{\kappa}{4\pi} \sin(2\pi q_o)) \\ p_2 &= p_o + 2\frac{\kappa}{4\pi} \sin(2\pi(q_o + p_o + \frac{\kappa}{4\pi} \sin(2\pi q_o))) \\ &+ \frac{\kappa}{4\pi} \sin(2\pi q_o) + \frac{\kappa}{4\pi} \sin(2\pi(q_o + 2p_o + 2\frac{\kappa}{4\pi} \sin 2\pi q_o) + 2\frac{\kappa}{4\pi} \\ &\quad \sin 2\pi(q_o + p_o + \frac{\kappa}{4\pi} \sin(2\pi q_o))) \end{aligned} \quad (4.48)$$

Fazendo as derivadas indicadas na expressão (4.46) obtemos que:

$$\begin{aligned} T &= 2 + \kappa \cos(2\pi q_o) + 2\kappa \cos(2\pi(q_o + p_o + \frac{\kappa}{4\pi} \sin(2\pi q_o))) \\ &\quad + \frac{\kappa^2}{2} \cos(2\pi q_o) \cos(2\pi(q_o + p_o + \frac{\kappa}{4\pi} \sin(2\pi q_o))) \\ &+ \kappa \cos(2\pi(q_o + 2p_o + 2\frac{\kappa}{4\pi} \sin(2\pi(q_o + p_o + \frac{\kappa}{4\pi} \sin(2\pi q_o)))) \\ &\quad + \frac{\kappa}{2} \cos(2\pi(q_o + p_o + \frac{\kappa}{4\pi} \sin(2\pi q_o))) \cos 2\pi(q_o + 2p_o + 2\frac{\kappa}{4\pi} \\ &\quad \sin 2\pi(q_o + p_o + \frac{\kappa}{4\pi} \sin(2\pi q_o))) \end{aligned} \quad (4.49)$$

Agora, podemos verificar a estabilidade dos pontos de período 2, inserindo-os na equação (4.49). Na tabela (4.3) apresentamos os pontos de período 2 e seu respectivo traço. Dependendo do valor do traço, pode-se classificar o ponto em

pontos $(q_o, p_o)$	T
$(0, 0.5)$	$-\frac{\kappa^2}{2} - \frac{\kappa}{2} + 2$
$(0.5, 0.5)$	$-\frac{\kappa^2}{2} + \frac{\kappa}{2} + 2$

Tabela 4.3: Tabela com o traço de  $J$  para pontos de período 2.

questão como elíptico, hiperbólico ou parabólico.

Pode-se notar através da tabela (4.3) que o valor do traço depende do parâmetro de perturbação  $\kappa$ . Desta forma, para alguns valores deste, o ponto fixo será instável, enquanto que para outros valores será estável ou ainda pode haver uma mudança de estabilidade quando o parâmetro é variado, caracterizando um tipo de bifurcação.

A determinação das órbitas de período 2 é muito trabalhosa, pois nos leva a cálculos extensos. Apenas discutimos aqui um pouco sobre eles de forma ilustrativa e não é nossa intenção considerá-los nas análises que serão feitas nos próximos capítulos. A figura (4.4) ilustra as órbitas de período 2 da versão simetrizada do mapa de Chirikov.

## 4.4 Bifurcações

Bifurcação significa uma divisão em dois, quebrar, uma mudança. Em sistemas dinâmicos, o objeto da teoria de bifurcação é estudar as mudanças que mapas apresentam quando parâmetros variam. Estas mudanças geralmente envolvem a estrutura dos pontos periódicos [38].

Segundo Berry et al [15], bifurcações são eventos críticos onde órbitas são criadas e destruídas por *coalescência*. Este processo é um fenômeno característico em sistemas nos quais o espaço de fase é *mixed*, isto é, no qual movimento regular e caótico coexistem, quando um parâmetro é mudado.

As bifurcações genéricas que ocorrem em sistemas conservativos bidimensionais, ou, equivalentemente, em mapas unidimensionais que preservam área, foram classificados por Meyer [55]. Pode-se distinguir 5 casos qualitativamente diferen-

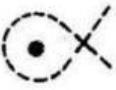
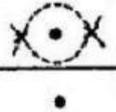
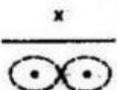
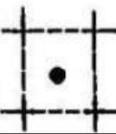
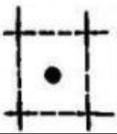
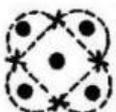
Período $m$	Pontos fixos do verdadeiro $M^m$ da ressonância, $E > 0$	Pontos fixos do verdadeiro $M^m$ da ressonância, $E < 0$
1	 2	 0
2	 2	 1
3	 2	 2
4a	 2	 2
4b	 3	 1
5	 3	 1
> 5	Caso 5	

Figura 4.2: Bifurcações genéricas. Adaptada de [53].

tes correspondendo a períodos de  $m$ -uplas com  $1 \leq m \leq 5$ , conforme figura (4.2) baseada na tabela apresentada em [53].

Semiclassicamente, a importância destes eventos é que a amplitude de Gutzwiller (equação (3.18)), diverge para as órbitas envolvidas. A equação (3.19) vai a zero. Isto ocorre porque na dedução da fórmula traço as órbitas periódicas, que aparecem como pontos estacionários na ação da integral de caminho, são assumidas isoladas. Obviamente, a aproximação de fase estacionária falha quando eles coalescem, veja seção (5.5.2). A solução é então fazer uma expansão assintótica válida através dos processos de bifurcação. O resultado disto é substituir a divergência na amplitude por uma série de potências em torno da

bifurcação. Especialmente, cada bifurcação tem expoente de amplitude e largura característicos [15]. Para fazer a uniformização ou expansão, é importante determinar onde ocorrem estas bifurcações. Na figura (4.3) construímos o diagrama de bifurcações da versão simetrizada do mapa de Chirikov, equação (4.12), para as órbitas periódicas de período 1, que corresponde ao primeiro caso da tabela da figura (4.2).

No próximo capítulo estudaremos a influência das bifurcações nas estatísticas de flutuações quânticas do *time delay*.

## 4.5 Quantização do mapa

A quantização de mapas preservando área foi considerada inicialmente para o mapa padrão de Chirikov, dado pela equação (4.10). Impondo-se a regra de quantização [56]:

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar_{eff} \quad (4.50)$$

na Hamiltoniana (4.5), onde  $\hat{q}$  e  $\hat{p}$  são os operadores de posição e momento, respectivamente,  $\hbar_{eff}$  é a constante de Planck efetiva definida por:

$$\hbar_{eff} = \frac{h\tau}{(2\pi)^2 I} = 2\pi\hbar_{eff} \quad (4.51)$$

O operador Hamiltoniano quântico para este problema é:

$$H = -\frac{\hbar_{eff}^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{\kappa}{(2\pi)^2} \cos(2\pi q) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(t - n) \quad (4.52)$$

onde  $t$  é medida em unidades de tempo estroboscópico  $\tau$ .

A função de onda  $\psi(t)$ , para múltiplos do tempo estroboscópico, é dada por  $\psi(n) = \mathcal{F}^n \psi_o$  em termos do operador Floquet (que nada mais é que o operador

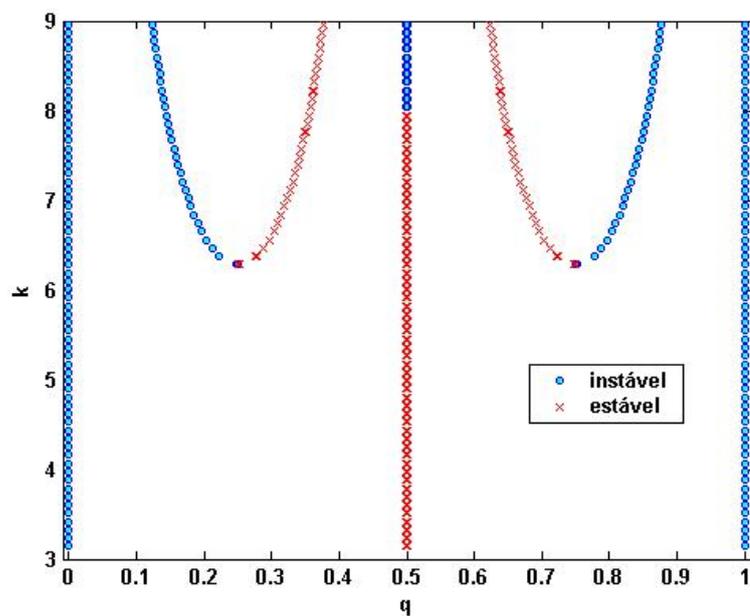


Figura 4.3: Diagrama de bifurcações para as órbitas de período 1 do mapa (4.12).

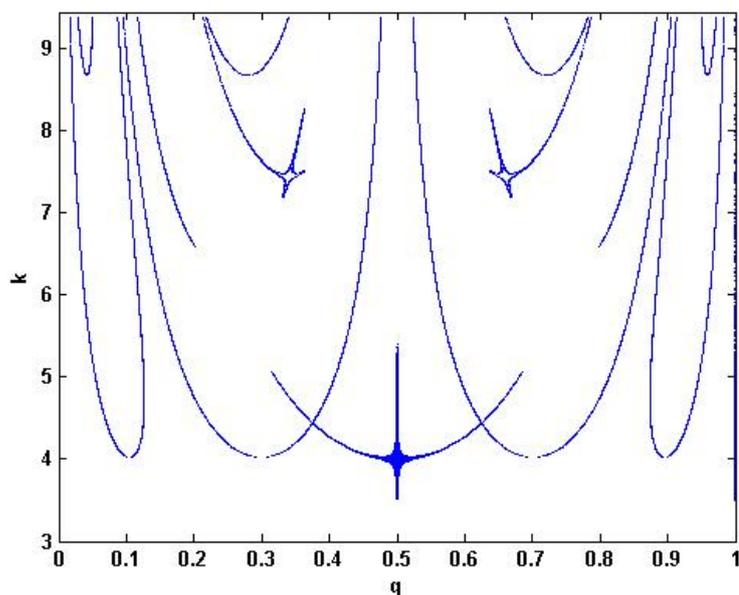


Figura 4.4: Diagrama de bifurcações para as órbitas de período 2 do mapa da equação (4.12).

evolução temporal):

$$\mathcal{F} = e^{-\frac{i}{\hbar_{eff}} \int_0^1 dt' H(t')} \quad (4.53)$$

Na representação de Heisenberg sabemos que:

$$q(t+1) = \mathcal{F}^\dagger q(t) \mathcal{F} \quad (4.54)$$

$$p(t+1) = \mathcal{F}^\dagger p(t) \mathcal{F} \quad (4.55)$$

onde  $\mathcal{F}^\dagger = \mathcal{F}^{-1}$  é a inversa do operador de evolução temporal  $\mathcal{F}$ . O operador Floquet tem autovetores ortonormais  $|\mu\rangle$  e autovalores unimodulares  $e^{-i\varepsilon_\mu}$ :

$$\mathcal{F}|\mu\rangle = e^{-i\varepsilon_\mu}|\mu\rangle \quad (4.56)$$

onde  $\varepsilon$  é a quase energia.

Na representação de Schrödinger, uma função de onda evolui como:

$$\psi(q, t+n) = \sum_{\mu} e^{-i\varepsilon_\mu} \langle \mu | \psi(t) \rangle \langle q | \mu \rangle \quad (4.57)$$

Devido a interação da força externa ser instântanea, pode-se fatorar o operador Floquet no produto de operadores evolução onde um corresponde a livre rotação e o outro a interação:

$$\mathcal{F} = B(\hat{q})G(\hat{p}) \quad (4.58)$$

$$B(\hat{q}) = e^{-\frac{i}{\hbar_{eff}} \frac{\kappa}{(2\pi)^2} \cos(2\pi\hat{q})} \quad (4.59)$$

$$G(\hat{p}) = e^{-\frac{i}{\hbar_{eff}} \frac{\hat{p}^2}{2}} \quad (4.60)$$

A periodicidade da variável angular dá um conjunto discreto de autovalores

de momento definidos por [56], [4]:

$$\hat{p}|n\rangle = 2\pi\hbar_{eff}n|n\rangle \quad n = \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (4.61)$$

$$\langle q|n\rangle = e^{i2\pi nq} \quad (4.62)$$

Na representação do momento, o operador da rotação livre  $G$  tem a forma diagonal com os elementos da matriz:

$$G_{nn'} = e^{-i2\pi^2\hbar n^2} \delta_{nn'} \quad (4.63)$$

e os elementos da matriz do operador de rotação livre  $B$  são dados em termos de uma função de Bessel:

$$B_{nn'} = i^{n-n'} J_{n-n'}\left(\frac{\kappa}{(2\pi)^2\hbar_{eff}}\right) \quad (4.64)$$

Escolhendo um parâmetro especial  $1/2\pi\hbar_{eff} \equiv N$  um número inteiro, o operador de evolução temporal reduz-se a uma matriz unitária de dimensão  $N \times N$ . Esta escolha é conhecida como condição de ressonância. Neste espaço finito-dimensional os estados bases de posição e momento são os vetores  $|q_m\rangle$  e  $|p_m\rangle$  onde  $m = 0, 1, \dots, N-1$  que obedecem a:

$$\hat{q}|q_m\rangle = \frac{m}{N}|q_m\rangle = (mh)|q_m\rangle \quad (4.65)$$

$$\hat{p}|p_m\rangle = \frac{m}{N}|p_m\rangle = (mh)|p_m\rangle \quad (4.66)$$

e que estão relacionados através da transformada de Fourier discreta:

$$\langle q_m|p_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\frac{2\pi}{N}nm} \quad (4.67)$$

O espaço de fase clássico consiste do toro  $\{q \in (0, 1), p \in (0, 1)\}$ , com condições de contorno periódicas nas direções  $q$  e  $p$ . O número  $N$  é o número de células de

Planck (de área  $2\pi\hbar_{eff}$ ) que estão contidas dentro do toro.

Para a versão simetrizada do mapa de Chirikov dado pela equação (4.12),  $\mathcal{F}$  pode ser fatorado em produtos de operadores evolução correspondendo à meia-interação, propagação livre e meia-interação [4]:

$$\mathcal{F} = Q(\hat{q})G(\hat{p})Q(\hat{q}) \quad (4.68)$$

onde:

$$Q(\hat{q}) = e^{-\frac{i}{\hbar_{eff}} \frac{\kappa}{8\pi^2} \cos(2\pi\hat{q})} \quad (4.69)$$

$$G(\hat{p}) = e^{-\frac{i}{\hbar_{eff}} \frac{\hat{p}^2}{2}} \quad (4.70)$$

Na representação de coordenadas, a matriz dos elementos de  $\mathcal{F}$  pode ser dada por:

$$\mathcal{F}_{nn'} = (QG^\dagger\Pi GQ)_{nn'} \quad (4.71)$$

onde:

$$G_{nn'} = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-\frac{i2\pi nn'}{N}} \quad (4.72)$$

$$Q_{nn'} = \delta_{nn'} e^{\frac{-iN\kappa}{\sqrt{4\pi}} \cos(\frac{2\pi n}{N})} \quad (4.73)$$

$$\Pi_{nn'} = \delta_{nn'} e^{\frac{-i\pi n^2}{N}} \quad (4.74)$$

E, finalmente se obtém:

$$\mathcal{F}_{nn'} = \frac{1}{\sqrt{iN}} e^{\frac{i\pi}{N}(n-n')^2 - \frac{iN}{\hbar_{eff}} \frac{\kappa}{4\pi} [\cos(2\pi q) + \cos(2\pi q')]} \quad (4.75)$$

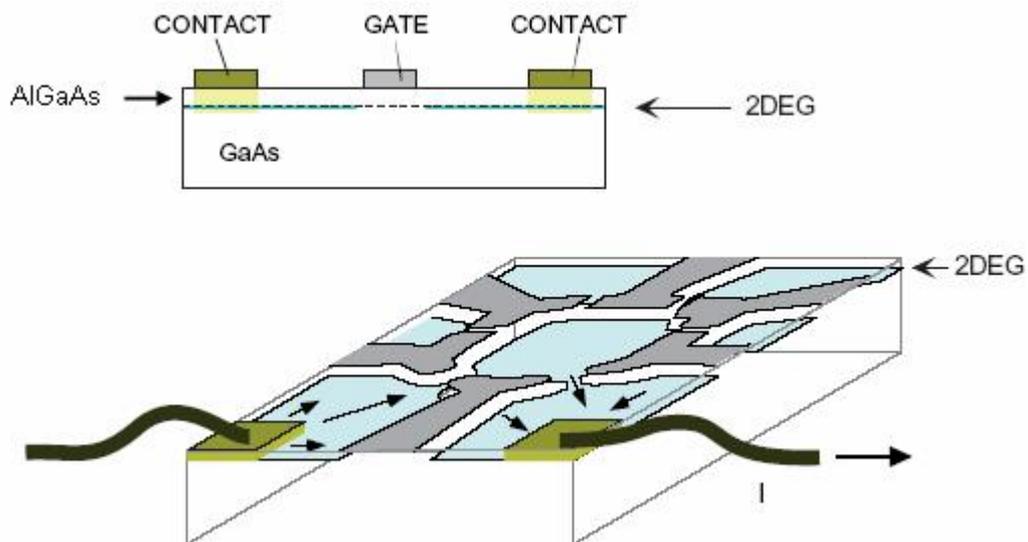


Figura 4.5: Visão lateral e perspectiva da estrutura de um ponto quântico. Adaptada de [6].

## 4.6 Sistema Aberto

Como discutimos no capítulo 1, nosso objetivo é estudar as propriedades estatísticas do *time delay* e da *condutância* em pontos quânticos abertos, ou seja, uma cavidade acoplada a dois reservatórios por meio de fios condutores<sup>1</sup>. Para isso, usaremos o modelo da versão simetrizada do mapa de Chirikov. Até aqui, falamos da dinâmica do mapa *fechado*. Vamos discutir, agora, o mapa *aberto*.

O que queremos descrever, de fato, é um sistema, no qual os elétrons podem entrar e sair do ponto quântico através dos pontos de contato (dreno e fonte), o que caracteriza o sistema como *aberto*, figura (4.5), e que os diferem do jogo do bilhar, sem caçapas, que é um sistema *fechado*, figuras (1.2) e (1.3). Para simular o *mapa aberto* clássico, *tiras*, também chamadas de *faixas*, são inseridas no espaço de fase, dado pela equação (4.12), para simular os fios condutores. Sendo assim, partículas injetadas no sistema através da faixa 1 deixam o mesmo através da faixa 2, conforme figuras (4.6) e (4.7).

Quanticamente, para modelar um par de  $M$ -modos de fios balísticos, impõe-

<sup>1</sup>observe a figura (6.2) na seção 6.4

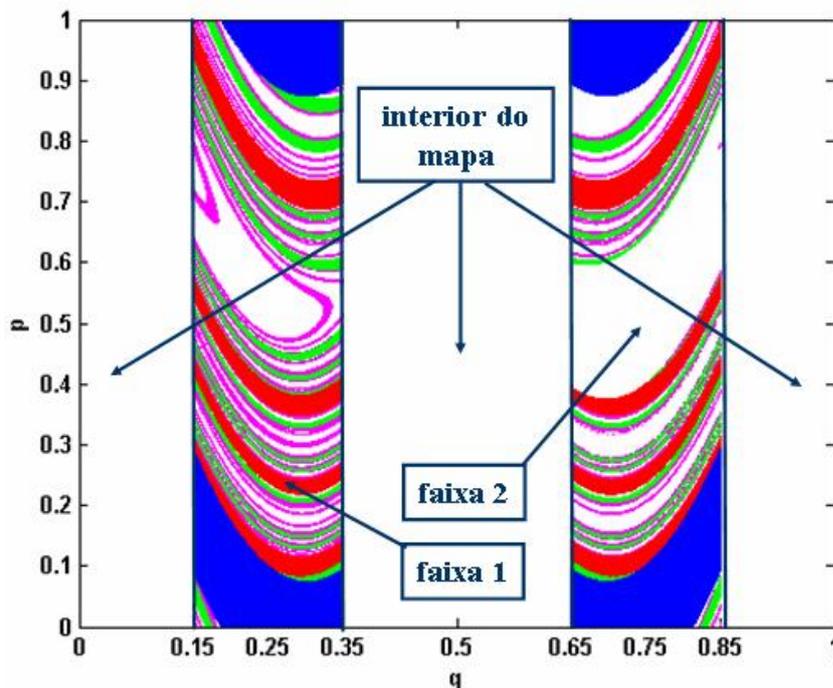


Figura 4.6: Espaço de fase com duas aberturas centradas nos pontos que bifurcam. Na faixa 1 pontos que escapam através da faixa 2 depois de uma (azul), duas (vermelho), três (verde) e quatro (magenta) iteradas do mapa (4.12). O interior do mapa é a parte do espaço de fase fora das faixas.

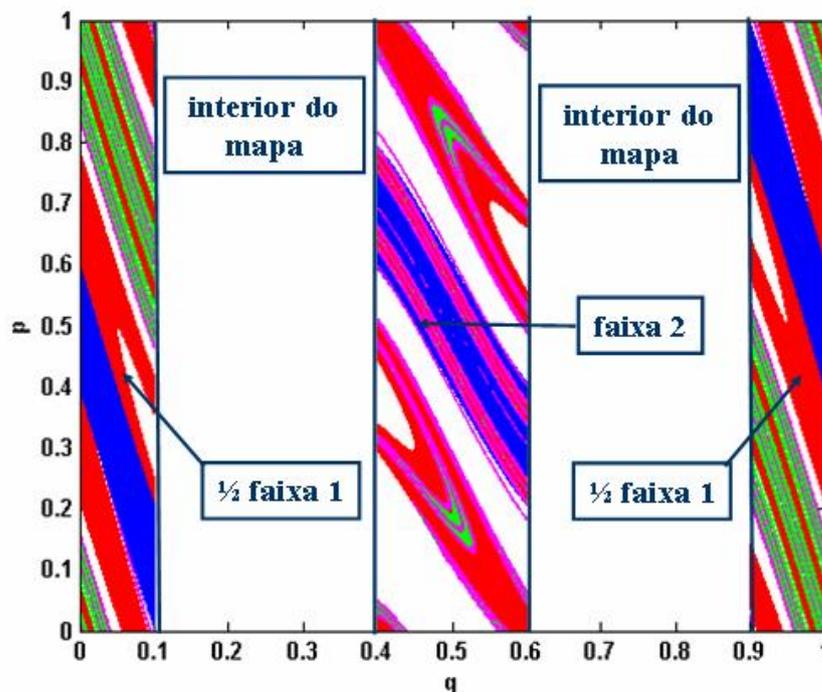


Figura 4.7: Espaço de fase com duas aberturas centradas nas órbitas isoladas. Na faixa 1 pontos que escapam através da faixa 2 depois de uma (azul), duas (vermelho), três (verde) e quatro (magenta) iteradas do mapa (4.12). Note que a faixa 1 é centrada em 0 e por isso é dividida em duas partes.

se condições de contorno abertas em um subespaço do Espaço de Hilbert representados pelos índices  $n_m^\alpha$  na coordenada de representação. O subscrito  $m = 1, 2, \dots, M$  identifica os modos e o superescrito  $\alpha = 1, 2$  identifica os fios condutores. Uma matriz projeção  $P$  de dimensões  $2M \times N$  descreve o acoplamento aos fios balísticos. Seus elementos são:

$$P_{mn} = \begin{cases} 1 & , \text{ se } n = m \in n_m^\alpha \\ 0 & , \text{ caso contrário.} \end{cases}$$

Dessa maneira, fica definido uma matriz  $Q = I - P^T P$  de dimensões  $N \times N$ , que indica todos os modos que não estão nos fios, onde  $I$  é uma matriz identidade de dimensões  $N \times N$ . Partículas são injetadas para o interior do sistema pelos fios e, em cada iteração, algumas delas deixam o sistema, enquanto outras permanecem no interior do sistema. Eventualmente todas as partículas deixam os fios depois de um número suficiente de iterações. Com esta figura em mente, a matriz de espalhamento  $S$  de dimensões  $2M \times 2M$  é formada via uma série de espalhamentos

$$S(\varepsilon) = PFP^T + PFQFP^T + P(FQ)^2FP^T + \dots \quad (4.76)$$

onde  $F = Ue^{i\varepsilon}$  é a matriz evolução temporal do sistema fechado dependente da quase energia  $\varepsilon$ . O primeiro termo do lado direito da equação acima está relacionado a transmissão e reflexão diretas da partícula, ou seja, a partícula sai de um fio condutor e é transmitida diretamente para o outro fio condutor ou é refletida diretamente de volta ao fio condutor no qual se encontrava. O segundo termo, por sua vez, está relacionado com a transmissão ou reflexão da partícula após uma iteração com a cavidade e assim sucessivamente. A equação (4.76) pode

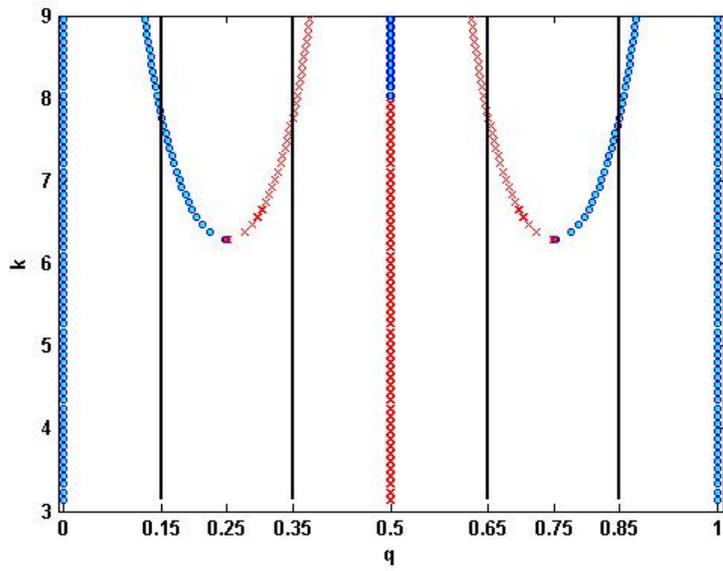


Figura 4.8: Sistema aberto: Faixas centradas nas bifurcações.

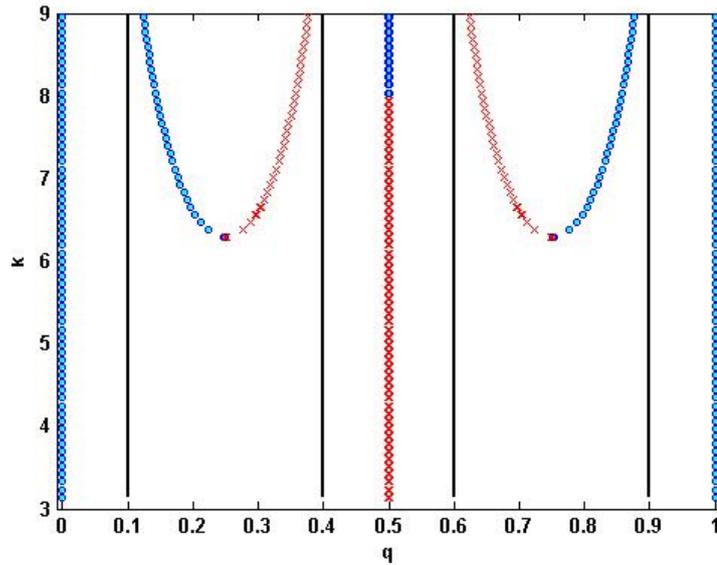


Figura 4.9: Sistema aberto: Faixas centradas órbitas isoladas.

ser reescrita como:

$$S(\varepsilon) = P \frac{1}{[1 - F]} F P^T \quad (4.77)$$

As figuras (4.8) e (4.9) ilustram as faixas centradas nas bifurcações e órbitas isoladas, respectivamente, no diagrama  $q \times \kappa$ . Portanto, as configurações re-

presentadas nas figuras (4.8) e (4.9) *bloqueiam* as bifurcações e órbitas isoladas, respectivamente. Quando estudarmos a influência das bifurcações no *time delay* e na condutância, nos próximos capítulos, é de extrema importância ter esta figura em mente: quando as faixas estão centradas nas órbitas isoladas, temos somente a contribuição das bifurcações e vice-versa.

# Capítulo 5

## Time Delay

Neste capítulo temos o objetivo de investigar a influência das bifurcações no *time delay*, para sistemas abertos. Pode-se interpretá-lo como sendo o tempo típico gasto por uma partícula espalhada na região de interação [64].

### 5.1 Eisenbud-Wigner *Time Delay*

Eisenbud [57] e Wigner [58] introduziram o conceito de *time delay*, no espalhamento quântico, no contexto de espalhamento de ondas esféricas de um único canal. Obtém-se o *time delay* a partir da velocidade de grupo do pacote de ondas esféricas, ou seja, essencialmente segue-se o pico de um pacote de onda. Inicialmente, considera-se, por simplicidade, um centro espalhador de raio  $a$ , e assume-se que a partícula incidente comporta-se como uma partícula livre fora da esfera deste raio e um feixe incidente que é a superposição de duas ondas monocromáticas de energia  $\hbar(\nu + \nu')$  e  $\hbar(\nu - \nu')$ , na região de interação. O número de onda correspondente será dado por  $k + k'$  e  $k - k'$ . Então a onda incidente pode ser escrita como:

$$r\Psi_{in} = e^{-i(k+k')r-i(\nu+\nu')t} + e^{-i(k-k')r-i(\nu-\nu')t} \quad (5.1)$$

onde ambos  $k'$  e  $\nu'$  são infinitesimalmente pequenos, de maneira que a equação (5.1) é substituída por um pacote de ondas<sup>1</sup>, ou seja, ao invés da superposição de somente duas ondas monocromáticas utiliza-se um pacote de ondas. O centro do pacote de ondas é um ponto onde as duas ondas esféricas da equação (5.1) estão em fase, portanto:

$$2k'r + 2\nu't = 0 \quad (5.2)$$

Desde que  $\nu'/k' = d\nu/dk = v$  é a velocidade da partícula, a partícula incidente move-se com velocidade  $v$  através do centro espalhador. Se  $\eta + \eta'$  e  $\eta - \eta'$  são os deslocamentos de fase correspondentes aos valores de energia  $\hbar(\nu + \nu')$  e  $\hbar(\nu - \nu')$ , a onda emergente será:

$$r\Psi_{out} = e^{-i(k+k')r - i(\nu+\nu')t + 2i(\eta+\eta')} + e^{-i(k-k')r - i(\nu-\nu')t + 2i(\eta-\eta')} \quad (5.3)$$

As duas ondas na equação (5.3) estão em fase, de maneira que

$$2k'r - 2\nu't + 4\eta' = 0 \quad (5.4)$$

Rearranjando os termos algebricamente obtém-se

$$r = -2\frac{\eta'}{k'} + \frac{\nu'}{k'}t \quad (5.5)$$

$$r = -2\frac{d\eta}{dk} + \frac{d\nu}{dk}t \quad (5.6)$$

O tempo gasto para chegar em  $r - 2d\eta/dk$  é o mesmo que se gasta para chegar em  $r$  quando não há interação com o centro espalhador. Visto que  $\eta = 0$  e  $d\eta/dk = 0$  quando não há nenhuma interação, a equação (5.6) mostra que a

---

<sup>1</sup>em vez da superposição de somente duas ondas monocromáticas, pode-se usar um pacote de ondas regular nesta consideração. Neste caso,  $r$ , nas eq. (5.1) e (5.3) torna-se a coordenada do centro de massa do pacote de ondas.

interação *atrasa* a onda por um tempo [59, 60]:

$$\Delta t = 2v^{-1} \frac{d\eta}{dk} = 2\hbar \frac{d\eta}{dE} \quad (5.7)$$

que é o *Eisenbud-Wigner time delay*, onde  $E$  é a energia. Portanto, o *time delay* é a diferença entre o tempo gasto por uma onda espalhada e uma que se propaga livremente.

## 5.2 Smith *time delay*

Smith [59] introduziu o conceito de *tempo de residência* de uma partícula em uma região espacial, e restringiu sua análise ao espalhamento estacionário reescrevendo o *Eisenbud-Wigner time delay* de somente um canal, para  $n$  canais, como uma diferença entre o *tempo médio de residência* de uma partícula livre e de uma que sofre interação.

Na Mecânica Quântica, usando funções de onda estacionárias, o tempo médio de residência numa região é a integral da densidade dividido pelo fluxo total dentro (ou fora), e o tempo de vida é definido como a diferença entre a residência com e sem interação. Propriedades de transformação requerem a construção da matriz tempo de vida  $Q$ . Se as funções de onda  $\psi_i$  estão normalizadas para um fluxo unitário que entra e sai de uma esfera em  $R \rightarrow \infty$ , os elementos da matriz são

$$Q_{ii} = \lim_{R \rightarrow \infty} \left[ \int_{r < R} \psi_i \psi_j^* d\tau - R(v_i^{-1}) \delta_{ij} + \sum_k S_{ik} v_k^{-1} S_{jk}^* \right]_{Av}, \quad (5.8)$$

onde  $Av$  indica uma média que é feita para eliminar os termos oscilantes para  $R$  grandes,  $S_{ik}$  é um elemento da matriz de espalhamento unitária  $S$  e  $v$  é a velocidade no  $i$ -ésimo canal. A matriz  $Q$  é Hermitiana e o elemento  $Q_{ii}$  é tempo médio de vida de uma interação começando no  $i$ -ésimo canal. Smith [59] provou

que *Eisenbud–Wigner time delay*  $\Delta t$  e o tempo de vida  $Q_{ii}$  são de fato idênticos.

Desta forma, se  $S = e^{2i\eta(E)}$ , então:

$$Q = 2\hbar \frac{d\eta}{dE} = -i\hbar S^\dagger \frac{dS}{dE} \quad (5.9)$$

$Q$  e  $S$  contêm, essencialmente, as mesmas informações de um ponto de vista complementar. A prova fornecida por Smith [59] fornece a pista de que existe uma relação geral entre a matriz de espalhamento  $S$  e a matriz tempo de vida  $Q$ .

### 5.3 Wigner-Smith *time delay*

A equação (5.9) pode ser escrita como:

$$Q_{ij} = -i\hbar \sum_{c=1}^M S_{ic}^\dagger \frac{dS(E)_{cj}}{dE} \quad (5.10)$$

onde a soma acontece sobre  $M$  canais abertos indexados por  $c$ . Fazendo a média sobre todos os autovalores de  $Q$ , obtém-se o *Wigner-Smith time delay*

$$\tau(E) = -\frac{i\hbar}{M} \text{Tr} \left[ S^\dagger(E) \frac{d}{dE} S(E) \right] \quad (5.11)$$

$$\tau(E) = -\frac{i\hbar}{M} \frac{d}{dE} \ln \det S(E) \quad (5.12)$$

O formalismo de Friedel [61], que conecta o *time delay* e a densidade de estados, foi usado por Balian et al. [62] para obter uma expressão semiclássica para o *time delay*. Esta expressão é idêntica à *fórmula traço de Gutzwiller*, equação (3.18). Ela é a soma de duas partes. A primeira parte da equação é suave, representa a média  $\langle d(E) \rangle$ . A segunda parte é flutuante e depende das órbitas periódicas, ou seja:

$$\tau(E) = \frac{2\pi\hbar}{M} d(E) \approx \frac{2\pi\hbar}{M} (\langle d(E) \rangle + d^f(E)) \quad (5.13)$$

onde  $d(E)$  é a densidade de estados renormalizada.

## 5.4 *Time delay* semiclássico para mapas

A teoria do *time delay* pode ser ilustrada usando-se mapas quânticos. Utilizam-se mapas que atuam num espaço de fase correspondente ao toro unitário. Sua quantização é definida por um operador de evolução temporal  $U$ , com dimensão  $N \times N$ , conforme vimos na seção (4.5), e é dada pela expressão [63]:

$$U_{Q,Q'} = \sqrt{\frac{N}{i}} e^{2\pi i N \mathcal{S}(Q'/N, Q/N)}, \quad (5.14)$$

onde o inteiro  $N$  define a constante de Planck  $\hbar = 1/(2\pi N)$  e  $\mathcal{S}(Q'/N, Q/N)$  é a função geratriz do mapa.

Estes mapas são muito úteis, pois permitem simular fios balísticos numa cavidade, sem maiores complicações matemáticas. Para isso, removem-se faixas verticais do espaço de fase e obtém-se o chamado *mapa aberto* como vimos na seção (4.6). A matriz de espalhamento correspondente  $S(\varepsilon)$  é uma matriz  $M$ -dimensional, onde  $\varepsilon$  são as quase-energias do mapa e  $M < N$  é o número total de posições especificadas na abertura. Ela é uma matriz unitária que contém informações sobre a transmissão e reflexão dos pontos ou canais nas aberturas e é dada por:

$$S(\varepsilon) = P_o [1 - V(1 - P_o^T P_o)]^{-1} V P_o^T \quad (5.15)$$

onde  $P_o$  é a matriz com dimensões  $M \times N$  que projeta os pontos nas aberturas e  $P_o^T$  é a sua transposta. Temos então que  $P_o^T P_o$  é uma matriz com dimensão  $N \times N$ . Definindo  $P_i$  com dimensões  $(N - M) \times N$  sendo a matriz que projeta os pontos no interior do mapa e  $P_i^T$  sua transposta. Os operadores projeção satisfazem  $P_o^T P_o + P_i^T P_i = I$  onde  $I$  é a matriz identidade de ordem  $N \times N$ . A

matriz  $V$  de dimensões  $N \times N$  está relacionada com a matriz evolução temporal do mapa por  $V = e^{i\varepsilon U}$ . Portanto, como:

$$I - P_o^T P_o = P_i^T P_i, \quad (5.16)$$

sustituindo (5.16) em (5.15) obtemos:

$$S(\varepsilon) = P_o [1 - V P_i^T P_i]^{-1} V P_o^T \quad (5.17)$$

Como  $V P_i^T P_i = V_o$ , a equação (5.17) pode ser reescrita:

$$S(\varepsilon) = P_o [1 - V_o]^{-1} V P_o^T \quad (5.18)$$

A constante de Planck para mapas quânticos é dada por  $\hbar = 1/2\pi N$  e o *time delay* dada pela equação (5.12) pode ser escrito como:

$$\tau(\varepsilon) = -\frac{i}{2\pi MN} \frac{d}{d\varepsilon} \ln(\det(S(\varepsilon))) \quad (5.19)$$

Keating et al [64] deduziram a equação do *time delay* em termos das órbitas periódicas para mapas quânticos. Para tanto, utilizaram a identidade de Jacobi para determinantes [65]. Sendo  $A$  uma matriz  $N \times N$  dada em termos de matrizes blocos auxiliares  $B, C, D$  e  $E$  e a inversa  $A^{-1}$  dada em termos de  $W, X, Y$  e  $Z$ , ou seja:

$$A = \begin{pmatrix} B & C \\ D & E \end{pmatrix} \quad A^{-1} = \begin{pmatrix} W & X \\ Y & Z \end{pmatrix}$$

onde  $B$  e  $W$  são matrizes quadradas com mesma dimensão, a identidade de Jacobi diz que:

$$\det B = \det Z \det A \quad (5.20)$$

Podemos identificar as matrizes  $A$ ,  $B$  e  $Z$  com as seguintes matrizes:

$$A = [1 - U(1 - P_o^T P_o)e^{i\epsilon}]^{-1} U e^{i\epsilon} \quad (5.21)$$

$$B = P_o A P_o^T = S \quad (5.22)$$

$$Z = P_i A^{-1} P_i^T \quad (5.23)$$

Desta forma, a partir da identidade de Jacobi para determinantes e com (5.21), (5.22) e (5.23) podemos escrever

$$\det S = \frac{\det(U e^{i\epsilon})}{\det[1 - U(1 - P_o^T P_o)e^{i\epsilon}]} \det(P_i^T U^\dagger e^{-i\epsilon} [1 - U P_i^T P_i e^{+i\epsilon}] P_i) \quad (5.24)$$

$$\det S = \frac{\det(U e^{i\epsilon})}{\det[1 - U_i e^{i\epsilon}]} \det(U_i^\dagger e^{-i\epsilon} - 1) \quad (5.25)$$

Uma propriedade dos determinantes muito útil é a seguinte:

$$\det(U_i^\dagger e^{-i\epsilon} - 1) = (-1)^{N-M} \det(1 - U_i^\dagger e^{-i\epsilon}) \quad (5.26)$$

Desta maneira, podemos escrever:

$$\det S = \det(U e^{i\epsilon}) (-1)^{N-M} \frac{\det(1 - U_i^\dagger e^{-i\epsilon})}{\det(1 - U_i e^{i\epsilon})} \quad (5.27)$$

Agora, podemos aplicar o logaritmo no determinante de  $S$

$$\ln\{\det S\} = \ln \left\{ \det(U e^{i\epsilon}) (-1)^{N-M} \frac{\det(1 - U_i^\dagger e^{-i\epsilon})}{\det(1 - U_i e^{i\epsilon})} \right\} \quad (5.28)$$

Como  $\det(U e^{i\epsilon}) = e^{iN\epsilon} \det(U)$ , onde  $N$  é a dimensão da matriz  $U$ , temos:

$$\ln\{\det S\} = \ln \left\{ e^{iN\epsilon} \det(U) (-1)^{N-M} \frac{\det(1 - U_i^\dagger e^{-i\epsilon})}{\det(1 - U_i e^{i\epsilon})} \right\} \quad (5.29)$$

$$\begin{aligned} \ln(\det S) = \ln(e^{iN\varepsilon}) + \ln \det U + (N - M) \ln(e^{i\pi}) + \ln \det(1 - U_i^\dagger e^{-i\varepsilon}) + \\ - \ln \det(1 - U_i e^{i\varepsilon}) \end{aligned} \quad (5.30)$$

Como:

$$\ln \det(1 - U_i) = \ln[(1 - \lambda_1)(1 - \lambda_2)\dots(1 - \lambda_n)] \quad (5.31)$$

$$= - \sum_n \frac{1}{n} \text{tr}(U_i)^n \quad (5.32)$$

Agora podemos fazer a derivada em relação à  $\varepsilon$  da expressão (5.30):

$$\frac{d}{d\varepsilon} \ln(\det S) = iN + \frac{d}{d\varepsilon} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-in\varepsilon}}{n} \text{tr}(U_i^\dagger)^n - \frac{d}{d\varepsilon} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{+in\varepsilon}}{n} \text{tr}(U_i)^n \quad (5.33)$$

$$= iN + i \sum_{n=1}^{\infty} \frac{ne^{-in\varepsilon}}{n} \text{tr}(U_i^\dagger)^n + i \sum_{n=1}^{\infty} \frac{ne^{+in\varepsilon}}{n} \text{tr}(U_i)^n \quad (5.34)$$

Substituindo a expressão obtida (5.34) na equação (5.19) obtemos:

$$\tau = -\frac{i^2 N}{2\pi N} + \frac{1}{2\pi N} \sum_n \text{tr}(U_i^\dagger)^n e^{-in\varepsilon} + \frac{1}{2\pi N} \sum_n \text{tr}(U_i)^n e^{in\varepsilon} \quad (5.35)$$

$$\tau = \frac{1}{2\pi} + \frac{1}{2\pi N} 2\text{Re} \sum_n \text{tr}(U_i)^n e^{in\varepsilon} \quad (5.36)$$

Portanto:

$$\tau(\varepsilon) = \frac{1}{MN} \left( \frac{N}{2\pi} + \frac{1}{\pi} \text{Re} \sum_{n=1}^{\infty} e^{in\varepsilon} \text{tr} U_i^n \right) \quad (5.37)$$

O resultado está em concordância com a eq. (5.13). O primeiro termo da equação (5.37) representa o tempo médio gasto na região do espalhamento,  $\langle \tau(\varepsilon) \rangle$ . Enquanto o segundo termo é a parte flutuante do *time delay*  $\tau^{fl}(\varepsilon)$ . Deve-se notar que este termo é escrito em termos de  $U_i$ , o operador evolução temporal que descreve o interior do mapa<sup>2</sup>. As potências do traço de  $U_i$  estão semiclassicamente

<sup>2</sup>O interior do mapa deve ser entendido como o espaço de fase fora das faixas (já que as faixas simulam os fios condutores), veja as figuras (4.6) e (4.7).

relacionadas as órbitas periódicas que estão no interior do mapa aberto, ou seja, órbitas periódicas *aprisionadas* na região de espalhamento.

## 5.5 Resultados numéricos

Com o intuito de ilustrar as idéias acima expostas, se fará uso da versão simetrizada do mapa de Chirikov [23] dada pela equação (4.12). O operador evolução temporal para mapas pode ser escrito como [63]:

$$U_{Q,Q'} = \sqrt{N} e^{-i\pi/4} e^{2\pi i N \mathcal{S}(Q'/N, Q/N)} \quad (5.38)$$

onde  $\mathcal{S}(Q'/N, Q/N)$  é a ação, que para o caso do mapa (4.12) é:

$$\mathcal{S}(q', q) = \frac{1}{2}(q' - q)^2 - \frac{\kappa}{8\pi^2} (\cos(2\pi q') + \cos(2\pi q)) \quad (5.39)$$

onde  $\kappa$  é a intensidade do parâmetro de perturbação e  $q = Q/N; Q = 0, 1, \dots, N-1$  e  $q' = Q'/N; Q' = 0, 1, \dots, N-1$  são as coordenadas de posição.

Queremos investigar a influência das bifurcações no segundo momento do *time delay*, utilizando (5.13) e (5.37) e a definição para o segundo momento suavizado por uma gaussiana de largura  $\Delta$

$$\mathcal{M}_2 \equiv \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varepsilon (\tau^{fl})^2 e^{-n^2 \Delta^2} \quad (5.40)$$

$$\mathcal{M}_2 \approx \frac{1}{2\pi^2} \sum_n |tr U_i^n|^2 e^{-n^2 \Delta^2} \quad (5.41)$$

onde  $\tau^{fl}$  é a parte flutuante do *time delay*. A suavização permite explicitar a contribuição dos pontos fixos de menores períodos, isto é, menores  $n$ .

### 5.5.1 Derivada da ação do mapa clássico

Para a versão simetrizada do mapa de Chirikov, a ação dada pela equação (5.39) pode ser reescrita como:

$$\mathcal{S}(q'', q') = \frac{(q'' - q')^2}{2} - \frac{\kappa}{8\pi^2} [\cos(2\pi q') + \cos(2\pi q'')] \quad (5.42)$$

A primeira derivada da ação,  $\mathcal{S}'$ , é dada por:

$$\mathcal{S}'(q'', q') = \frac{\partial}{\partial q} \mathcal{S} = \left[ \frac{\partial \mathcal{S}(q'', q')}{\partial q''} + \frac{\partial \mathcal{S}(q'', q')}{\partial q'} \right]_{q''=q'=q} = p'' - p' \quad (5.43)$$

$$\frac{\partial}{\partial q'} \mathcal{S} = -(q'' - q') + \frac{\kappa}{4\pi} \sin(2\pi q') \quad (5.44)$$

$$\frac{\partial}{\partial q''} \mathcal{S} = (q'' - q') + \frac{\kappa}{4\pi} \sin(2\pi q'') \quad (5.45)$$

$$\mathcal{S}'(q'', q') = \frac{\partial}{\partial q} \mathcal{S}(q, q) = p'' - p' = 0 \quad (5.46)$$

A segunda derivada da ação,  $\mathcal{S}''$ , é:

$$\mathcal{S}''(q'', q') = \left[ \frac{\partial^2 \mathcal{S}(q'', q')}{\partial q''^2} - 2 \frac{\partial^2 \mathcal{S}(q'', q')}{\partial q' \partial q''} + \frac{\partial^2 \mathcal{S}(q'', q')}{\partial q'^2} \right]_{q''=q'=q} \quad (5.47)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial q'^2} \mathcal{S} = 1 + \frac{\kappa}{2} \cos(2\pi q') \quad (5.48)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial q''^2} \mathcal{S} = 1 + \frac{\kappa}{2} \cos(2\pi q'') \quad (5.49)$$

$$2 \frac{\partial^2}{\partial q' \partial q''} \mathcal{S} = -2 \quad (5.50)$$

A segunda derivada da ação vai a zero nas bifurcações.

A terceira derivada da ação,  $\mathcal{S}'''$ , é obtida da seguinte expressão:

$$\mathcal{S}'''(q'', q') = \left[ \frac{\partial^3 \mathcal{S}(q'', q')}{\partial q''^3} + 3 \frac{\partial^3 \mathcal{S}(q'', q')}{\partial q' \partial q''^2} + 3 \frac{\partial^3 \mathcal{S}(q'', q')}{\partial q'' \partial q'^2} + \frac{\partial^3 \mathcal{S}(q'', q')}{\partial q'^3} \right]_{q''=q'=q} \quad (5.51)$$

$$\frac{\partial^3 \mathcal{S}(q'', q')}{\partial q''^3} = -\kappa\pi \sin(2\pi q'') \quad (5.52)$$

$$3 \frac{\partial^3 \mathcal{S}(q'', q')}{\partial q' \partial q''^2} = 3 \frac{\partial^3 \mathcal{S}(q'', q')}{\partial q'' \partial q'^2} = 0 \quad (5.53)$$

$$\frac{\partial^3 \mathcal{S}(q'', q')}{\partial q'^3} = -\kappa\pi \sin(2\pi q') \quad (5.54)$$

### 5.5.2 Expansão de fase estacionária

Para mapas pode-se mostrar que [63]:

$$trU = \sqrt{\frac{N}{i}} \sum_{j=0}^1 \int_{-\infty}^{\infty} dq e^{2\pi i N \mathcal{S}_j(q)} \quad (5.55)$$

Para resolver a integral acima, utiliza-se a aproximação de fase estacionária, que tem como idéia básica levar em consideração os pontos que mais contribuem para o cálculo da integral. Em média, como ela oscila muito rapidamente ela é zero, exceto nas regiões onde não há variação significativa da fase  $\mathcal{S}$ , ou seja, quando  $\mathcal{S}$  for uma fase estacionária [42]. Supõe-se, então, a existência da solução  $\mathcal{S}(q_j)$ , e se faz uma expansão em torno de  $\mathcal{S}$  [66]:

$$\mathcal{S}(q) = \mathcal{S}(q_j) + \mathcal{S}'(q_j)(q - q_j) + \frac{\mathcal{S}''(q_j)}{2!}(q - q_j)^2 + \frac{\mathcal{S}'''(q_j)}{3!}(q - q_j)^3 + \dots \quad (5.56)$$

onde,  $\mathcal{S}'$  é a primeira derivada,  $\mathcal{S}''$  é a segunda derivada e  $\mathcal{S}'''$  é a terceira derivada, calculadas na seção 5.5.1. Para nosso cálculo, inicialmente faz-se a expansão até a segunda ordem. Na seção (5.5.1) vimos que  $\mathcal{S}'(q'', q')_{q''=q'=q} = 0$ . Desta maneira,

a integral dada pela equação (5.55), pode ser reescrita como:

$$trU = \sqrt{\frac{N}{i}} \sum_{j=0}^1 \int_{-\infty}^{\infty} dq e^{2\pi i N (\mathcal{S}(q_j) + \mathcal{S}''(q_j)(q-q_j)^2/2)} \quad (5.57)$$

Como  $\mathcal{S}'(q_j)$  é uma constante podemos escrever:

$$trU = \sqrt{\frac{N}{i}} \sum_{j=0}^1 e^{2\pi i N \mathcal{S}'(q_j)} \int_{-\infty}^{\infty} dq e^{2\pi i N \mathcal{S}''(q_j)(q-q_j)^2/2} \quad (5.58)$$

Definindo  $a = \pi i N \mathcal{S}''(q_j)$ , temos uma integral do tipo:

$$trU = \sqrt{\frac{N}{i}} \sum_{j=0}^1 e^{2\pi i N \mathcal{S}'(q_j)} \int_{-\infty}^{\infty} dq e^{a(q-q_j)^2} \quad (5.59)$$

$$trU = \sqrt{\frac{N}{i}} \sum_{j=0}^1 e^{2\pi i N \mathcal{S}'(q_j)} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (5.60)$$

Manipulando algebricamente, obtemos que:

$$trU \sim \sum_{j=0}^1 \frac{e^{2\pi i N \mathcal{S}_j(q_j)}}{\sqrt{|\mathcal{S}''(q_j)|}} \quad (5.61)$$

Nas bifurcações temos que  $\mathcal{S}''(q_j) = 0$  e  $trU$ , equação (5.61), diverge. A solução, então, é fazer a expansão de  $\mathcal{S}$  até a terceira ordem. Desta forma:

$$trU = \sqrt{\frac{N}{i}} \sum_{j=0}^1 \int_{-\infty}^{\infty} dq e^{2\pi i N \mathcal{S}_j(q_j)} e^{2\pi i N \mathcal{S}_j'''(q_j)(q-q_j)^3/6} \quad (5.62)$$

como  $\mathcal{S}'(q_j)$  é uma constante, e definindo  $a = 2\pi i N \mathcal{S}_j'''(q_j)/6$ , resulta a integral:

$$trU = \sqrt{\frac{N}{i}} \sum_{j=0}^1 e^{2\pi i N \mathcal{S}_j(q_j)} \int_{-\infty}^{\infty} dq e^{a(q-q_j)^3} \quad (5.63)$$

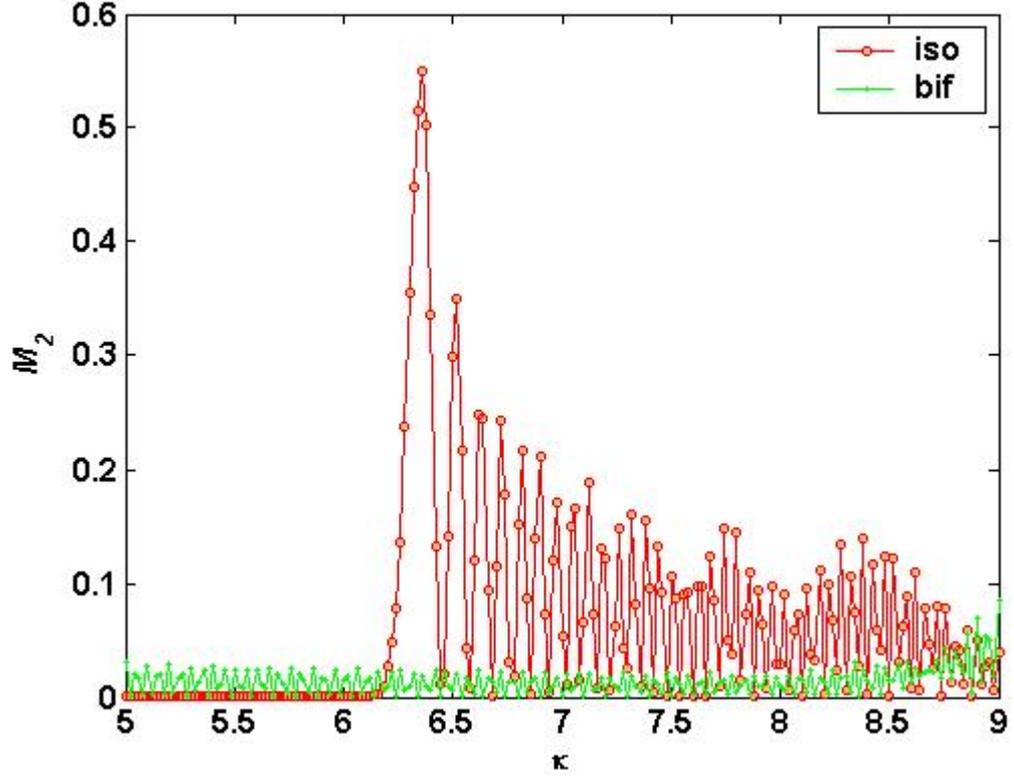


Figura 5.1: Segundo momento *versus*  $\kappa$  com  $\Delta = 2.0$ ,  $N = 597$ . A curva em verde (cruzes) para as faixas centradas nas bifurcações e a curva em vermelho (círculos) para as faixas centradas nas órbitas isoladas.

cuja solução tem a forma:

$$trU = \sqrt{\frac{N}{i}} \sum_{j=0}^1 e^{2\pi i N S_j(q_j)} \frac{2\pi\sqrt{3}[a^{1/3} + (-a)^{1/3}]}{9 a^{1/3}(-a)^{1/3}\Gamma(2/3)} \quad (5.64)$$

Substituindo o valor de  $a$  e rearranjando a equação acima, obtém-se:

$$trU \sim \sum_{j=0}^1 \frac{N^{1/6}}{\Gamma(2/3)} \left( \frac{6(2\pi)^2}{S'''(q_j)} \right)^{1/3} e^{(2\pi i N S_j(q_j) - i\frac{\pi}{4})} \quad (5.65)$$

Para ver quais pontos periódicos que mais contribuem para o momento, equação (5.41), calcula-se  $|trU_i|^2$  para duas configurações distintas. Primeiro, duas faixas serão colocadas no espaço de fase do mapa, de tal maneira que *bloqueiam* as *órbitas isoladas*, que para o mapa (4.12) são  $q = 0$  e  $q = 0.5$ . Segundo, as duas faixas serão inseridas no mapa de forma que *bloqueiam* as *bifurcações*, os

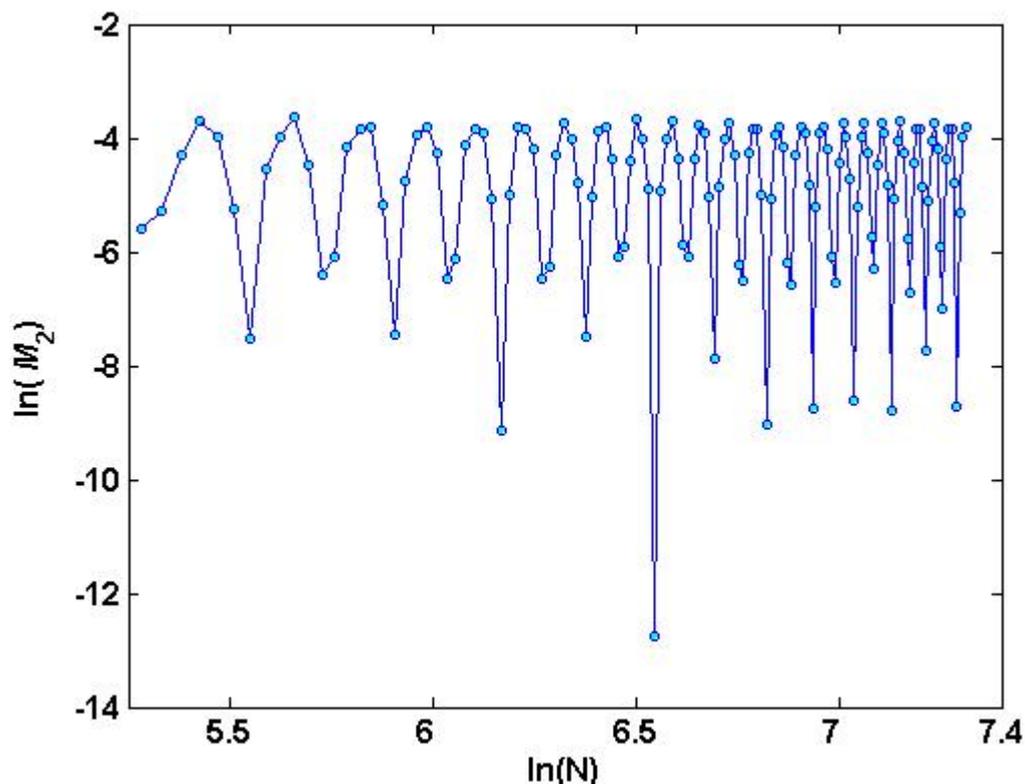


Figura 5.2: Logaritmo do segundo momento *versus* o logaritmo de  $N$  com  $\Delta = 2.0$ ,  $\kappa = 2\pi$  e faixas centradas nas bifurcações.

pontos  $q = 0.25$  e  $0.75$ . O gráfico (5.1) ilustra o segundo momento  $\mathcal{M}_2$  como função de  $\kappa$  que é o parâmetro de perturbação. A curva em vermelho (círculos) é obtida quando centramos as faixas nas órbitas isoladas e a curva em verde (cruzes) quando centramos as faixas nas bifurcações. Quando  $\kappa = \kappa_{bif} = 2\pi$  a contribuição das bifurcações à  $\mathcal{M}_2$  mostra-se dominante.

Na figura (5.2) temos o logaritmo do segundo momento  $\mathcal{M}_2$  como função da dimensão  $N$  do operador evolução temporal  $U$ . Para observar a contribuição das órbitas isoladas ao  $\mathcal{M}_2$  as faixas foram centradas nas bifurcações. No gráfico (5.3) centrou-se as faixas nas órbitas isoladas de maneira que se possa observar a contribuição das bifurcações ao  $\mathcal{M}_2$  e traçou-se o logaritmo do segundo momento  $\mathcal{M}_2$  como função da dimensão  $N$  do operador evolução temporal  $U$ . O gráfico (5.2) mostra que a contribuição das bifurcações cresce semiclassicamente com  $N^{0.29}$ . Este valor é bem próximo ao valor teórico estimado pela equação

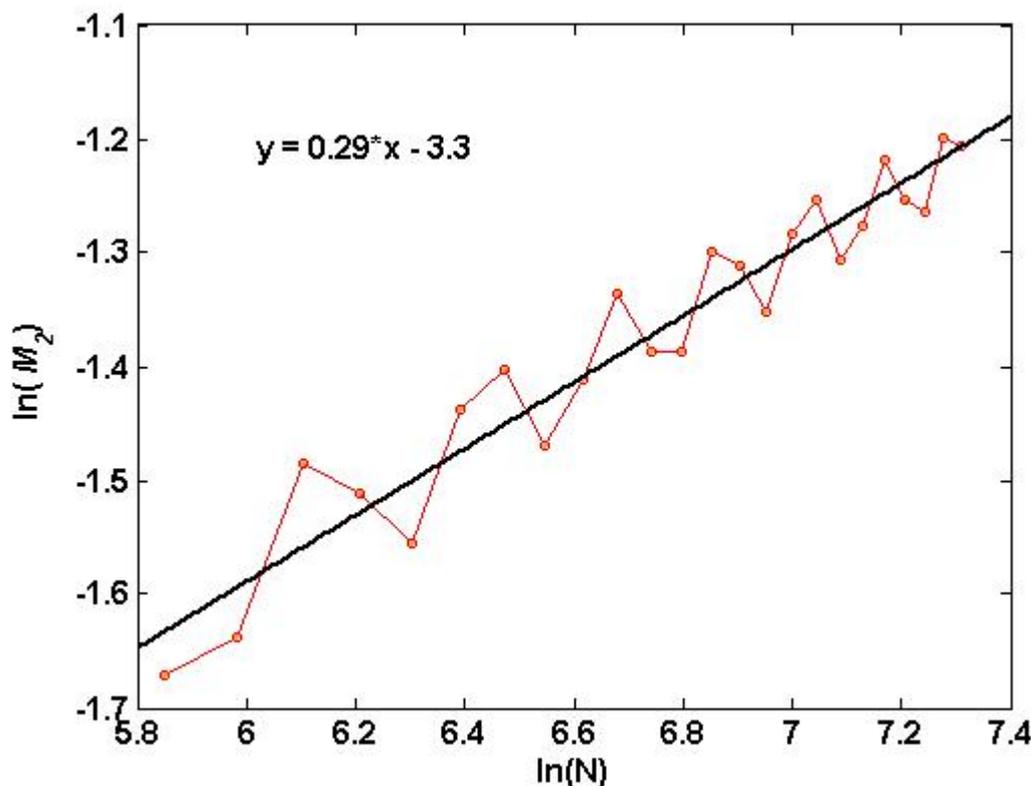


Figura 5.3: Logaritmo do segundo momento *versus* o logaritmo de  $N$  com  $\Delta = 2.0$ ,  $\kappa = 2\pi$  e faixas centradas nas órbitas isoladas. Gráfico mostrando a inclinação da reta.

(5.61),  $N^{1/3}$ . Por outro lado, as contribuições das órbitas isoladas não indicam dependência com  $N$ , gráfico (5.3), o que também está de acordo com cálculo analítico, equação (5.65). Estes gráficos ilustram claramente como as bifurcações das órbitas periódicas dominam as flutuações do *time delay* [64].

Outra análise que pode ser feita é a influência das bifurcações sobre a distribuição dos *proper delay times*. Os autovalores  $\tau_1, \tau_2, \dots, \tau_M$  da matriz do Wigner-Smith time delay  $Q$  são chamados de *proper delay times*. Uma cavidade acoplada ao mundo exterior através de uma onda guia com  $M$  canais propagadores a energia  $\varepsilon$  é caracterizada por  $M$  *proper delay times*. No limite semiclássico de grandes  $M$ , o sistema é descrito pela densidade  $P(\tau)$  dos delay times [67].

Os trabalhos [67, 68] têm o objetivo de comparar  $P(\tau)$  para casos onde a dinâmica clássica do sistema é integrável ou caótico. Estes mostraram que para

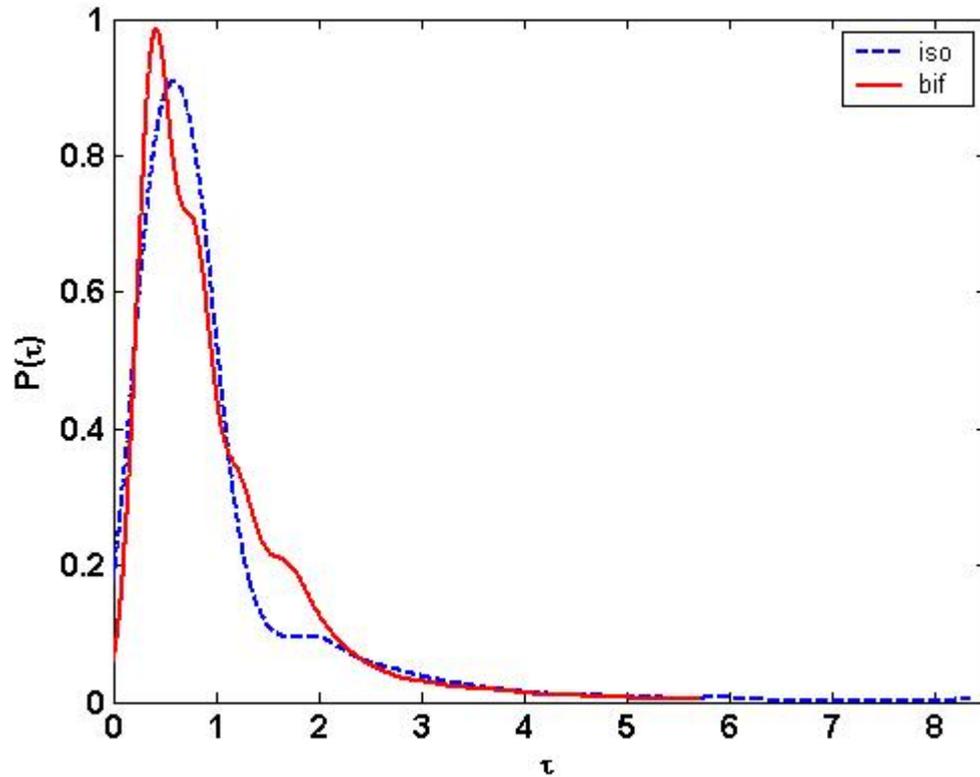


Figura 5.4: Densidade *versus*  $\tau$  para as faixas centradas nas bifurcações (linha cheia) e nas órbitas isoladas (linha tracejada) para  $\kappa = 2\pi$ .

o delay times clássico que a distribuição do delay time é diferente para os dois casos: para o sistema integrável  $P_{class}(\tau) = \tau^{-\gamma}$  tem uma cauda algébrica para grandes  $\tau$ , enquanto que  $P_{class}(\tau)$  decay exponencialmente para grandes  $\tau$  se a dinâmica do sistema for caótica.

Porém, nenhum destes estudos têm se focado no efeito das bifurcações. Com intuito de analisar se há alguma influência das bifurcações, no gráfico (5.4) temos a densidade  $P(\tau)$  dos *delay times* em função dos *delay times*  $\tau$ , para duas configurações distintas, de forma análoga ao que foi feito nos gráficos anteriores. No entanto, um outro tipo de análise deverá ser feita para respondermos a esta questão e, como esta foge do escopo deste trabalho, será feita futuramente.

# Capítulo 6

## Condutância

O objetivo deste capítulo é mostrar como se obtém a condutância a partir da fórmula de Landauer, através da matriz de espalhamento. Em seguida, apresentam-se os cálculos numéricos da condutância clássica e quântica.

### 6.1 Considerações Iniciais

A condutância  $G$  de um condutor bidimensional retangular é dado pela expressão [7]:

$$G = \frac{W}{L}\sigma \quad (6.1)$$

ou seja, a condutância é diretamente proporcional à largura  $W$  e inversamente proporcional ao comprimento  $L$  do condutor, e  $\sigma$  é a condutividade, uma propriedade do material.

Uma questão que intrigou os cientistas por um bom tempo foi: Quão pequenas pode-se fazer as dimensões  $W$  e  $L$  para que o condutor deixe de ter o comportamento ôhmico?

Somente nos anos de 1980 foi possível a fabricação de *pequenos* condutores

para pesquisar experimentalmente esta questão. Hoje existem os condutores mesoscópicos, cujas dimensões são intermediárias entre as dimensões microscópica e macroscópica, isto é, eles são muito maiores do que objetos microscópicos como átomos, mas não grandes suficientes para serem ôhmicos. Um condutor é ôhmico quando suas dimensões são maiores do que cada uma das seguintes grandezas: 1) comprimento de onda de de Broglie; 2) livre caminho médio; 3) comprimento de relaxação-fase, explicadas a seguir. Estas escalas de comprimento variam largamente de material para material e são também fortemente afetadas pela temperatura e campo magnético, por exemplo. Desta forma, o transporte mesoscópico pode ser observado em condutores com dimensões de poucos nanômetros a micrometros.

## 6.2 Comprimentos Característicos

Conforme discutiu-se na seção (6.1), um condutor possui comportamento ôhmico se suas dimensões são muito maiores que certos comprimentos característicos, a saber [7] :

1. **Comprimento de onda  $\lambda$** : O número de onda de Fermi é dado por:

$$\kappa_f = \sqrt{2\pi n_s} \quad (6.2)$$

onde  $n_s$  é a densidade de elétrons por unidade de área e o comprimento de onda relacionado é então:

$$\lambda_f = \frac{2\pi}{k_f} \quad (6.3)$$

$$= \sqrt{2\pi/n_s} \quad (6.4)$$

Para uma densidade de elétrons de, por exemplo,  $5 \times 10^{11} \text{cm}^{-2}$ , o comprimento de onda de Fermi é aproximadamente  $35 \text{nm}$ . Em baixas tem-

peraturas a corrente é carregada principalmente por elétrons que possuem aproximadamente a energia de Fermi de maneira que o  $\lambda_f$  é um comprimento relevante. Elétrons com energia cinética menor têm comprimentos de onda maiores e não contribuem para a condutância.

2. **Livre caminho médio  $l$ :** Um elétron em um cristal perfeito move-se como se estivesse no vácuo, mas com uma massa diferente. Qualquer desvio da perfeita cristalinidade, tais como impurezas, vibrações da rede (fônons) ou outros elétrons, conduz a colisões que espalham o elétron de um estado para outro e dessa forma mudam seu momento. O tempo de relaxação do momento  $\tau_m$  está relacionado com o tempo de colisão  $\tau_c$  pela relação:

$$\frac{1}{\tau_m} \rightarrow \frac{1}{\tau_c} \alpha_m \quad (6.5)$$

onde  $\alpha_m$  varia de 0 a 1 e denota a *efetividade* de uma colisão individual para mudar o momento.

Por definição o *livre caminho médio  $l$*  é a distância que um elétron viaja antes de seu momento inicial ser alterado. Portanto, sabendo-se a velocidade do elétron e o tempo que ele gasta para percorrer esta distância, temos que:

$$l = v_f \tau_m \quad (6.6)$$

onde  $v_f$  é a velocidade de Fermi dada por

$$v_f = \frac{\hbar \kappa_f}{m} \quad (6.7)$$

$$= \frac{\hbar}{m} \sqrt{2\pi n_s} \quad (6.8)$$

se  $v_f \rightarrow 3 \times 10^7 \text{ cm/s}$  e  $n_s = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$  e assumindo que  $\tau_m = 100 \text{ ps}$  obtém-se um livre caminho médio  $l = 30 \mu\text{m}$ .

3. **Comprimento de relaxação de fase  $l_\phi$ :** Em analogia com o tempo de relaxação do momento pode-se escrever:

$$\frac{1}{\tau_\phi} \rightarrow \frac{1}{\tau_c} \alpha_\phi \quad (6.9)$$

onde o fator  $\alpha_\phi$  denota a *efetividade* de uma colisão individual para modificar a fase. A alteração da fase é, no entanto, mais sutil do que a mudança do momento. Uma discussão cuidadosa é necessária para definir qual a efetividade do fator  $\alpha_\phi$  para diferentes tipos de processos de espalhamento. Para calcular o comprimento de relaxação de fase, multiplica-se o tempo de relaxação de fase  $\tau_\phi$  pela velocidade de Fermi  $v_f$ , ou seja:

$$l_\phi = v_f \tau_\phi \quad (6.10)$$

Esta relação vale para os casos onde  $\tau_\phi$  é da mesma ordem ou menor que  $\tau_m$ , ou seja,  $\tau_\phi \sim \tau_m$  que é freqüentemente o caso para os semicondutores com alta mobilidade.

Mas para semicondutores com baixa mobilidade ou filmes de metais policristalinos, por exemplo,  $\tau_m \ll \tau_\phi$ . Depois de um tempo  $\tau_m$  a velocidade dos elétrons é completamente randomizada, de modo que a trajetória eletrônica sobre um comprimento de tempo  $\tau_\phi$  pode ser visualizada como a soma de um número de trajetórias curtas, cada uma de comprimento  $\sim v_f \tau_m$ . Desde que as trajetórias individuais são retilíneas em direções randômicas ( $\theta$ ), a média da distância ao quadrado percorrida pelos elétrons em uma direção específica é obtida somando-se os quadrados de seus comprimentos:

$$l_\phi^2 = \frac{\tau_\phi}{\tau_m} (v_f \tau_m)^2 \langle \cos^2 \theta \rangle \quad (6.11)$$

onde

$$\langle \cos^2 \theta \rangle = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \cos^2 \theta \quad (6.12)$$

$$= \frac{1}{2} \quad (6.13)$$

Tem-se então que:

$$l_{\phi}^2 = \frac{v_f^2 \tau_m \tau_{\phi}}{2} \quad (6.14)$$

Reconhecendo que o coeficiente de difusão seja dado por:

$$D = \frac{v_f^2 \tau_m}{2} \quad (6.15)$$

tem-se que:

$$l_{\phi}^2 = D \tau_{\phi} \quad (6.16)$$

## 6.3 Regimes de Transporte

Em um experimento mede-se a condutância mais do que a condutividade. A condutividade relaciona a densidade local ao campo elétrico [9]:

$$\vec{j} = \sigma \vec{E} \quad (6.17)$$

onde  $\vec{j}$  é a densidade de corrente e  $\vec{E}$  é o campo elétrico aplicado. Enquanto a condutância  $G$  relaciona a corrente total a uma diferença de potencial:

$$I = GV \quad (6.18)$$

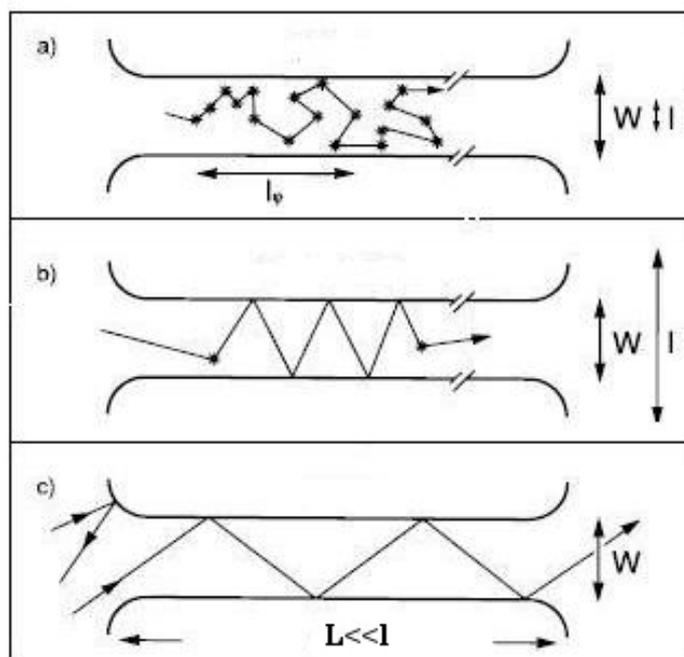


Figura 6.1: Regimes de transporte a) difusivo, b) quase balístico e c) balístico. Adaptada de [9].

Para um gás de elétrons bidimensional (2-DEG), a largura  $W$  e comprimento  $L$  estão na direção da corrente. Se para o momento pode-se negligenciar o efeito da fase coerente, então o escalonamento da equação (6.1) fornece que ambos  $W$  e  $L$  são muito maiores do que o livre caminho médio  $l$ . Este é o regime de transporte difusivo. Quando as dimensões da amostra são menores que o livre caminho médio, temos o regime de transporte balístico. Além disso, existe um regime intermediário entre estes dois, o regime quase balístico, caracterizado por  $W < l < L$ . Estes regimes podem ser visualizados na figura (6.1).

No nosso estudo, vamos nos concentrar somente no regime balístico. No transporte balístico somente a condutância tem papel importante, e não a condutividade [9]. A fórmula de Landauer [9, 69]:

$$G = \frac{e^2}{h} T \quad (6.19)$$

tem papel central no estudo do transporte balístico, porque expressa a condutân-

cia em termos de uma propriedade do nível de Fermi da amostra, a probabilidade de transmissão  $T$ , onde  $e$  é a carga elementar e  $h$  a constante de Planck.

## 6.4 Condutância e a Matriz Espalhamento

Segundo Jalabert [10, 70] dentro da aproximação de Landauer-Büttiker, no regime de fase coerente a resistência não está relacionada a uma resistividade intensiva do tipo definido nos livros padrões de matéria condensada (como, por exemplo, uma interação de elétron-fônon), mas obtém-se do espalhamento elástico que estes elétrons sofrem ao atravessar a amostra mesoscópica entre os dispositivos de medição. Os dispositivos de medição são macroscópicos e comportam-se como reservatórios de elétrons. São caracterizados por um potencial eletroquímico  $\mu$ , que não varia ao ceder e ao receber elétrons. O papel dos reservatórios é crucial porque tornam o sistema total infinito, e o espectro contínuo. É somente nos reservatórios que as fases do elétron são assumidas aleatórias.

O experimento mais simples está esquematizado na figura (6.2), onde a amostra (cavidade) é conectada entre dois reservatórios, cujos os potenciais eletroquímicos diferem pelo valor da tensão aplicada  $V$ , que é suposta ser muito pequena ( $\mu_1 - \mu_2 = eV \ll \mu_1$ ). Os cálculos estão baseados exclusivamente em experimentos ideais com duas sondas (ou seja, dois reservatórios). O exemplo das multisondas não apresenta questões fundamentais novas, mas a descrição teórica torna-se mais complicada, desde que uma matriz dos coeficientes da condutância deve ser introduzida. Estas condutâncias são expressas também em termos dos coeficientes da transmissão, que podem ser tratados com a aproximação semiclassical da mesma maneira como no caso das duas sondas.

A descrição do espalhamento precisa de um conjunto de estados assintóticos. Tal conjunto é fornecido pelos canais propagadores dos fios condutores que conectam a amostra aos reservatórios. A amostra, os reservatórios e os fios condutores

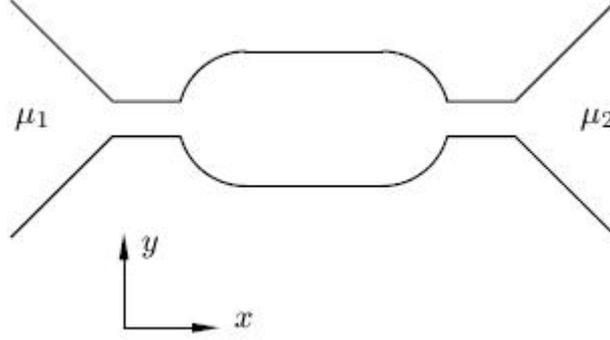


Figura 6.2: Cavidade balística típica acoplada a dois reservatórios caracterizados pelos potenciais químicos  $\mu_1$  e  $\mu_2$ . Adaptada de [10].

são os três elementos chaves do transporte balístico.

Supondo que os fios condutores são livres de desordem, com paredes rígidas (de largura  $W$ ) na direção  $y$  e infinitos na direção  $x$ , seus autoestados com energia  $\varepsilon$  são produtos das funções de onda das partículas em caixas:

$$\phi_a(y) = \sqrt{\frac{2}{W}} \sin\left(\frac{\pi a y}{W}\right) \quad (6.20)$$

( $a$  inteiro) na direção transversal e ondas planas propagando-se na direção longitudinal, com vetores de onda  $k_a$  tal que:

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{(a\pi)^2}{W^2} + k_a^2 \right) \quad (6.21)$$

Os  $M$  momenta transversais que satisfazem esta relação com  $k_a^2 > 0$  definem os  $2M$  canais propagadores dos fios condutores com energia  $\varepsilon$ . Os estados dos fios incidentes (incoming) são:

$$\varphi_{1(2),\varepsilon,a}^{(-)}(\vec{r}) = \frac{1}{v_a^{1/2}} e^{\pm i k_a x} \phi_a(y) \quad (6.22)$$

onde  $\vec{r} = (x, y)$  e  $a = 1, \dots, M$  o fator de normalização  $v_a^{1/2} = (m/\hbar k_a)^{1/2}$  é escolhido de maneira que o fluxo incidente em cada canal seja unitário. O índice 1(2) corresponde aos canais propagadores do reservatório da esquerda (direita)

## Capítulo 6. Condutância 6.4. Condutância e a Matriz Espalhamento

com momenta longitudinal  $k_a(-k_a)$ , e  $k_a$  explicitamente positivo. Os estados dos fios emergentes (outgoing) são definidos do mesmo modo da equação (6.22), entretanto com  $\pm$  do expoente invertido. A ordem de tempo dos estados dos fios emergentes e incidentes é obtida dando uma parte imaginária positiva (negativa) infinitesimal ao  $k_a$ .

Os estados espalhados correspondendo a um elétron incidente no fio 1(2) com a energia  $\varepsilon$ , no nível  $a$  são dados, nas regiões assintóticas, por [10]:

$$\Psi(\vec{r})_{1,\varepsilon,a}^+ = \begin{cases} \varphi_{1,\varepsilon,a}^{(-)}(\vec{r}) + \sum_{b=1}^M r_{ba} \varphi_{1,\varepsilon,b}^{(+)}(\vec{r}) & , \text{ se } x < 0 \\ \sum_{b=1}^M t_{ba} \varphi_{2,\varepsilon,b}^{(+)}(\vec{r}) & , \text{ se } x > 0 \end{cases}$$

e

$$\Psi(\vec{r})_{2,\varepsilon,a}^+ = \begin{cases} \sum_{b=1}^M t'_{ba} \varphi_{1,\varepsilon,b}^{(+)}(\vec{r}) & , \text{ se } x < 0 \\ \varphi_{2,\varepsilon,a}^{(-)}(\vec{r}) + \sum_{b=1}^M r'_{ba} \varphi_{2,\varepsilon,b}^{(+)}(\vec{r}) & , \text{ se } x > 0 \end{cases}$$

A matriz de espalhamento  $S$  de dimensões  $2M \times 2M$ , relacionando o fluxo incidente e o fluxo emergente, pode ser escrita em termos das matrizes reflexão  $r(r')$  e transmissão  $t(t')$  da esquerda (direita) como:

$$S = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix}$$

A conservação de corrente implica que o fluxo incidente deve ser igual ao fluxo emergente, e conseqüentemente  $S$  é unitário ( $SS^\dagger = I$ ). Em termos da transmissão total os coeficientes de transmissão ( $T = \sum_{a,b} |t_{ba}|^2$ ) e reflexão ( $R = \sum_{a,b} |r_{ba}|^2$ ), a condição de unitariedade é expressa como  $T + R = M$ . Também, a unitariedade dita que  $T = T'$  e  $R = R'$ . Além disso, na ausência do campo magnético, o invariância de reversão temporal diz que  $S$  é simétrica ( $S = S^T$ ). As cavidades com simetrias geométricas (“up-down” ou “right-left”) são descritas por matrizes de espalhamento com uma estrutura de bloco. O conjunto  $\Psi_{1(2)\varepsilon,a}^{(+)}(\vec{r})$

## Capítulo 6. Condutância 6.4. Condutância e a Matriz Espalhamento

constitui uma base ortogonal (mas não ortonormal)

$$\int d\vec{r} \Psi_{l,\varepsilon,a}^{(+)*}(\vec{r}) \Psi_{l',\varepsilon',a'}^{(+)}(\vec{r}) = \frac{2\pi}{v_a} \delta_{aa'} \delta(k_a - k'_a) \delta_{ll'} \quad (6.23)$$

Usando a decomposição espectral da função de Green retardada nesta base e levando em conta as propriedades analíticas das amplitudes de transmissão no plano complexo  $k$ , podemos relacionar a função de Green às amplitudes de espalhamento. Alternativamente, a teoria formal do espalhamento (Lippmann-Schinger) pode ser adaptada às ondas-guias e obtemos [10]:

$$t_{ba} = i\hbar(v_a v_b)^{1/2} e^{-i(k_b x' - k_a x)} \int_{\mathcal{S}_{x'}} dy' \int_{\mathcal{S}_x} dy \phi_b^*(y') \phi_a(y) G(\vec{r}', \vec{r}; E) \quad (6.24)$$

e

$$r_{ba} = -\delta_{ab} e^{2ik_b x'} + i\hbar(v_a v_b)^{1/2} e^{-i(k_b x' + k_a x)} \int_{\mathcal{S}_{x'}} dy' \int_{\mathcal{S}_x} dy \phi_b^*(y') \phi_a(y) G(\vec{r}', \vec{r}; E) \quad (6.25)$$

onde as integrações ocorrem nas seções transversais transversais  $\mathcal{S}_x$  no fio esquerdo  $\mathcal{S}_{x'}$  no fio direito (esquerdo) para as amplitudes de transmissão (reflexão). Os observáveis físicos são obtidos dos coeficientes da transmissão e de reflexão ( $T_{ba} = |t_{ba}|^2$ ) e ( $R_{ba} = |r_{ba}|^2$ ) entre os níveis, que, por conservação de corrente, não dependem da escolha das seções de choque transversais. Usa-se esta liberdade para fazer  $\mathcal{S}_x$  e  $\mathcal{S}_{x'}$  na entrada e na saída da cavidade (ou ambos na entrada para a equação (6.25)), e omite-se as dependências de  $x$  e de  $x'$  doravante.

A interpretação intuitiva das equações acima, como uma partícula que entra na cavidade no nível  $a$ , propagando-se no interior (através da função de Green), e saindo no nível  $b$ , é completamente direta. Expressar as amplitudes de espa-

## Capítulo 6. Condutância 6.4. Condutância e a Matriz Espalhamento

lhamento em termos das funções de Green é extremamente útil para cálculos analíticos e numéricos. A teoria da perturbação diagramática, bem como as expansões semiclássicas, são construídas a partir das funções de Green.

Vamos apresentar, agora, o argumento de contagem padrão para relacionar a condutância com espalhamento. Para isso, supõe-se que o reservatório esquerdo tem um potencial eletroquímico  $\mu_1$  ligeiramente maior do que o reservatório da direita de maneira que  $\mu_1 - \mu_2 = eV$ .

No intervalo de energia  $eV$  entre  $\mu_1$  e  $\mu_2$ , elétrons são injetados nos estados indo para a direita que emergem do reservatório 1, mas nenhum é injetado nos estados indo para a esquerda que emergem do reservatório 2. Conseqüentemente, temos uma corrente líquida indo para a direita proporcional ao número de estados no intervalo  $\mu_1 - \mu_2$ , dado por

$$I = g_s e \sum_{a=1}^M v_a \frac{dn_a}{d\varepsilon} eV \sum_{b=1}^M T_{ba} \quad (6.26)$$

$$I = g_s \frac{e^2}{h} \left( \sum_{a,b=1}^M T_{ba} \right) V \quad (6.27)$$

onde  $M$  é o número de canais propagadores com energia  $\mu_1$ , o fator  $g_s = 2$  leva em conta a degenerescência do spin,  $\sum_{b=1}^M T_{ba}$  é a probabilidade de transmissão de  $a$  para  $b$ ,  $dn_a/d\varepsilon$  densidade de estados quase unidimensional (que para partículas não interagentes satisfaz  $dn_a/d\varepsilon = 1/hv_a$ ). Então, a condutância de duas sondas é proporcional ao coeficiente total da transmissão da microestrutura, e pode ser escrita como:

$$G = \frac{I}{V} \quad (6.28)$$

$$= g_s \frac{e^2}{h} \left( \sum_{a,b=1}^M T_{ba} \right) \equiv g_s \frac{e^2}{h} T \quad (6.29)$$

$$G = g_s \frac{e^2}{h} \text{tr}(tt^\dagger) \quad (6.30)$$

onde  $tr$  é o traço da matriz  $(tt^\dagger)$ .

## 6.5 Distribuições de Comprimentos e áreas

A partir de argumentos analíticos e numéricos, têm-se encontrado que a distribuição de áreas  $\Theta$  para órbitas longas tem uma forma universal:

$$N(\Theta) = e^{-\alpha_{cl}|\Theta|} \quad (6.31)$$

conforme figura (6.3), para bilhares caóticos simples [10, 70, 71], onde o único parâmetro que caracteriza o espaço de fase clássico é  $\alpha_{cl}$ , que pode ser interpretado como o inverso da área fechada típica por uma trajetória espalhada.

A origem desta forma universal pode ser entendida qualitativamente dos seguintes argumentos [70]:

1. o número de órbitas que sobram na região de espalhamento, suficientemente longas para cobrir uma distância  $L$ , decai exponencialmente com  $L$ . Aproximadamente a razão é que, para órbitas caóticas longas, a probabilidade de escapar toda vez que bate na parede é uma constante  $p \ll 1$ , dada aproximadamente pela razão do tamanho da abertura pelo perímetro do bilhar e não está correlacionado com o batida anterior. Desta maneira, depois de  $n$  choques com a parede  $P(n) \sim e^{-n \ln p}$ , e se  $d$  é o comprimento médio transversal entre as batidas,  $P(L) \sim e^{-(L/d) \ln p} = e^{-\gamma_{cl} L}$ , onde  $\gamma_{cl} = \gamma/v$ , e  $\gamma$  é a taxa de escape que pode ser interpretada como o tempo típico gasto pelas partículas na região de espalhamento [10] e  $v$  é a velocidade constante das partículas espalhadas.

O aparecimento de uma escala única não é surpreendente desde que no espalhamento caótico a partícula se move ergodicamente sobre toda a superfície de energia, quando na região de espalhamento. O valor da taxa do es-

cape pode ser estimado dos argumentos gerais da ergodicidade no caso de cavidades caóticas com aberturas pequenas, em que a trajetória típica bate muitas vezes antes que escape. Supondo que a distribuição instantânea das trajetórias é uniforme na superfície da energia, a taxa do escape é dada simplesmente por  $\gamma = F/A$ , onde  $F$  é o fluxo através das aberturas (igual ao tamanho das aberturas vezes  $v/\pi$ , o fator  $\pi$  vem da integração sobre os ângulos de iniciais),  $A$  é a área do domínio do espalhamento bidimensional. No caso de aberturas pequenas, esta simples estimativa reproduz consideravelmente bem a taxa de escape obtida da determinação numérica da probabilidade de sobrevivência usando trajetórias clássicas.

O interesse na taxa de escape é devido ao fato de que as escalas de energia das flutuações de condutância é dada por esta grandeza clássica.

2. Além do mais, estas flutuações em função do campo magnético são governadas pela distribuição da área. Trajetórias espalhadas são abertas, e conseqüentemente não têm uma área bem definida. É definida uma *área efetiva* de uma trajetória  $s$ , a partir da circulação do potencial vetor ao longo do caminho  $\mathcal{C}_s$ . Assumindo um campo magnético perpendicular  $\vec{B} = Bz$  gerado por um potencial vetor  $\vec{A}$ , pode-se definir a área efetiva:

$$\Theta_s = \frac{2\pi}{B} \int_{\mathcal{C}_s} \vec{A} \cdot d\vec{r} \quad (6.32)$$

Explorando as propriedades ergódicas da dinâmica caótica no domínio do espalhamento e assumindo que a área é acumulada no modelo do caminhante aleatório (random walk), o parâmetro  $\alpha_{cl}$  pode estar relacionado à taxa do escape e à escala típica do comprimento da cavidade.

No caso integrável, a partícula move-se somente sobre parte da superfície de energia, consistente com a quantidade conservada. Conseqüentemente, não há mais uma única escala. Uma característica genérica dos bilhares regulares

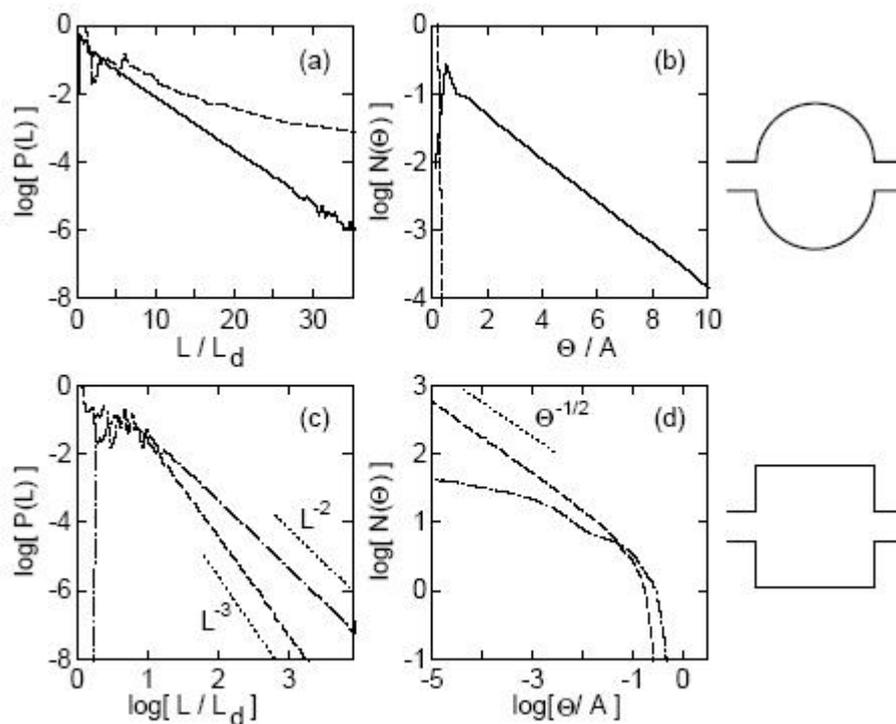


Figura 6.3: Distribuições clássicas de comprimentos [a),c)] e áreas efetivas [b),d)] para o bilhar *stadium* (caótico) e o bilhar retangular (integrável). Adaptada de [70].

é a existência de famílias de trajetórias que visitam lugares do espaço de fase diferentes no tempo. Nestas situações, com escalas múltiplas, espera-se observar as distribuições da lei de potência. Entretanto, para cavidades integráveis o conceito de distribuição não é completamente rigoroso, desde que a probabilidade de sobrevivência depende das condições iniciais escolhidas para as trajetórias.

## 6.6 Cálculo numérico

O entendimento de transporte quântico deve-se grandemente à aproximação de Landauer-Büttiker que vê a condutância como um problema de espalhamento. A interpretação das medidas de condutância no regime balístico de um ponto de vista de Caos Quântico envolverá o estudo de sistemas abertos da Mecânica Quântica e Mecânica Clássica [10].

Neste trabalho faremos uso de um modelo matemático, discutido no capítulo 4 para estudar a condutância. Mapas com aberturas têm sido propostos para simular as propriedades de transporte desses sistemas. A analogia com mapas abertos torna os sistemas físicos reais matematicamente tratáveis. A seguir, veremos como obtemos a condutância quântica e clássica a partir deste modelo.

### Condutância clássica

Para fazer os cálculos numéricos, utilizam-se a equação (4.12) que define o mapa clássico da versão simetrizada do mapa de Chirikov e inserem-se faixas verticais no espaço de fase, conforme seção 4.6. Para obter a condutância clássica, determina-se a probabilidade de uma partícula injetada na faixa 1 escapar através da faixa 2.

### Condutância quântica

Para fazer o cálculo da condutância quântica, utiliza-se a matriz de espalhamento  $S$ , equação (4.77), que depende do operador evolução temporal. Da expressão (6.30) vemos que a condutância quântica depende, essencialmente, do cálculo do traço da matriz  $(tt^\dagger)$ , onde  $t$  é uma matriz subloco de  $S$ .

Nas figuras (6.4), (6.5) as faixas estão centradas nas órbitas isoladas (pontos  $q = 0$  e  $q = 0.5$ ). Neste caso, temos somente contribuição das órbitas periódicas que bifurcam para a transmissão ( $T$ ) e reflexão ( $R$ ) clássica e quântica, respectivamente. Os gráficos são típicos de curvas de transmissão e reflexão. A soma de  $T + R = 1$ . Quando  $T$  aumenta,  $R$  diminui e vice-versa.  $T$  ( $R$ ) começa pequeno (grande) e vai crescendo (decrecendo) até aproximadamente  $\kappa = 2\pi$  quando ocorrem as bifurcações das órbitas periódicas. A partir deste ponto  $T$  e  $R$  permanecem com valores em torno de 0.5.

Nas figuras (6.6), (6.7) as faixas estão centradas nas bifurcações (pontos  $q = 0.25$  e  $q = 0.75$ ). Neste caso, temos somente contribuição das órbitas periódicas

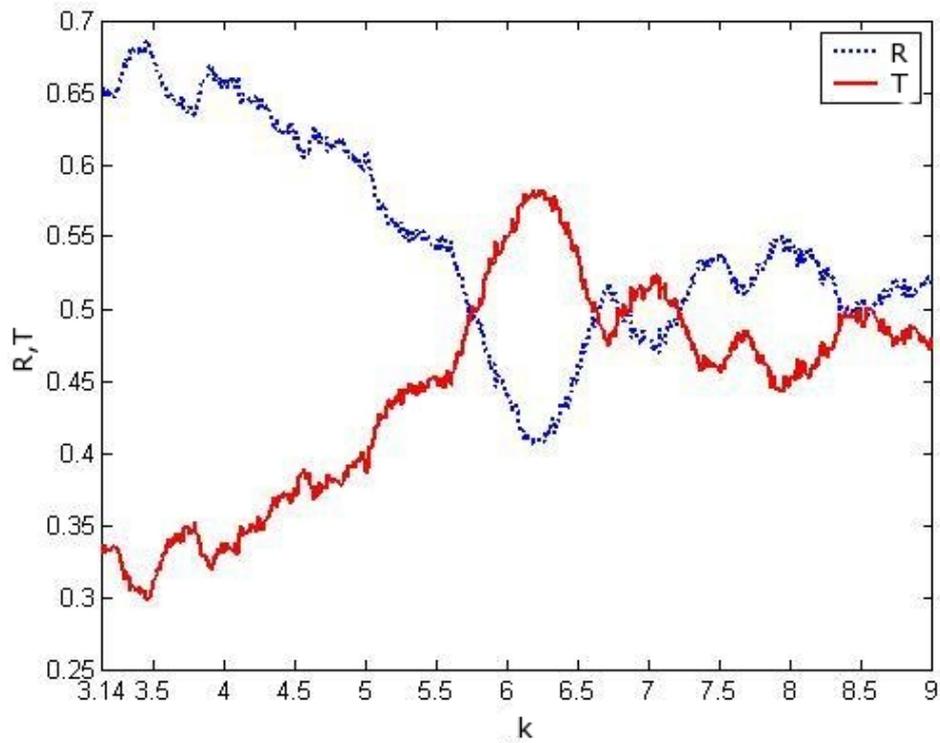


Figura 6.4: Transmissão (linha cheia) e reflexão (linha tracejada) para as faixas centradas nas órbitas isoladas para o mapa clássico. Quando  $\kappa = 2\pi$  ocorrem as bifurcações.

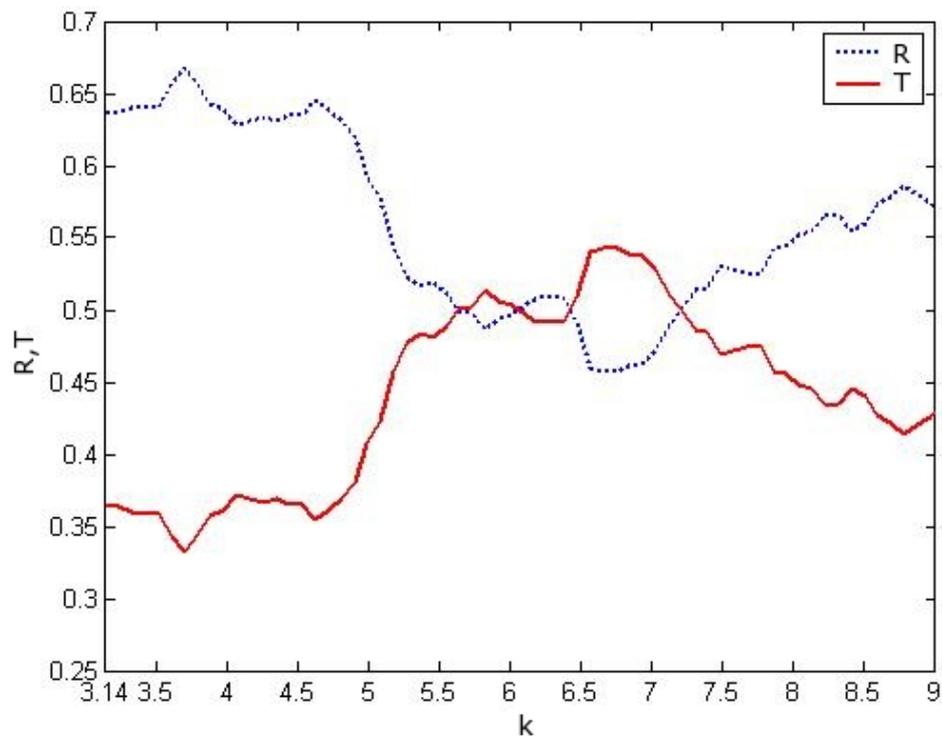


Figura 6.5: Transmissão (linha cheia) e reflexão (linha tracejada) quântica para as faixas centradas nas órbitas isoladas para  $N = 997$  e  $2M = 198$ . Quando  $\kappa = 2\pi$  ocorrem as bifurcações.

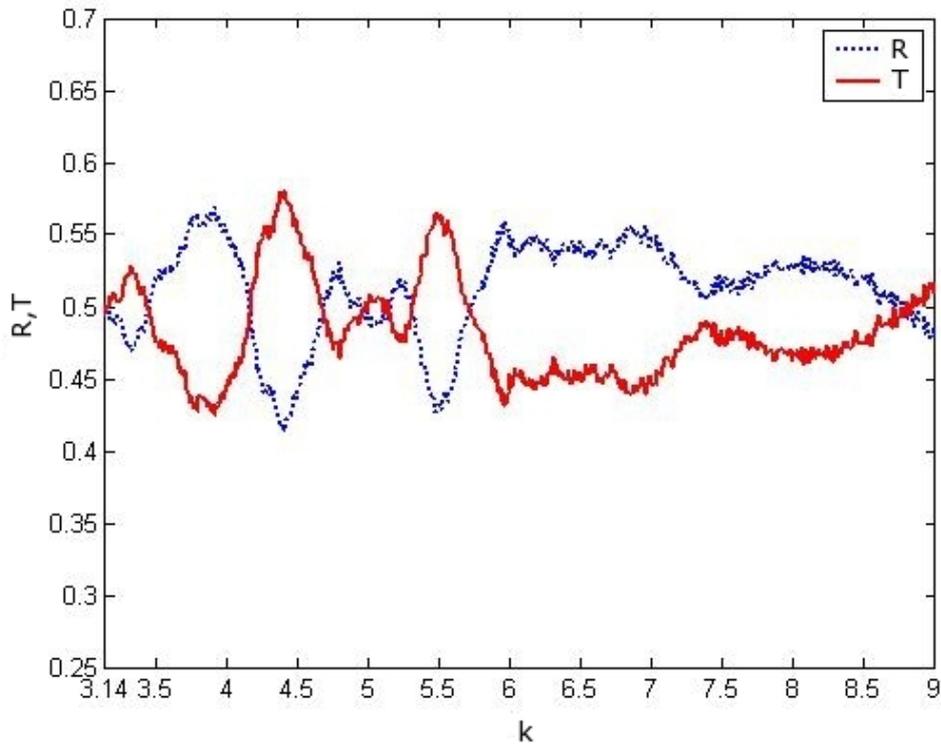


Figura 6.6: Transmissão (linha cheia) e reflexão (linha tracejada) para as faixas centradas nas bifurcações para o mapa clássico. Quando  $\kappa = 2\pi$  ocorrem as bifurcações.

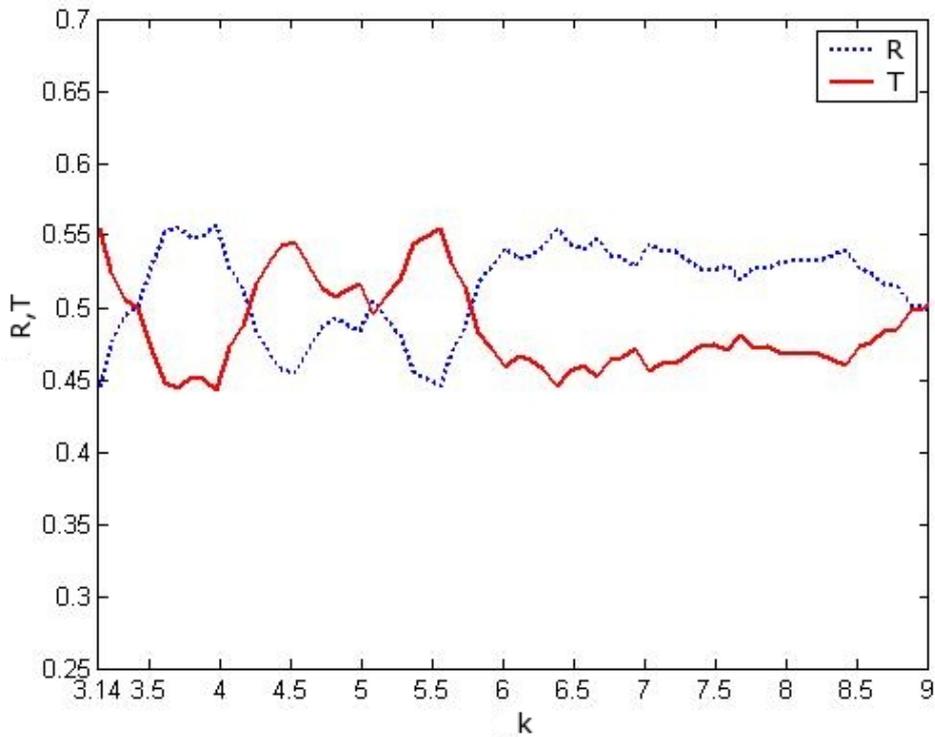


Figura 6.7: Transmissão (linha cheia) e reflexão (linha tracejada) quântica para as faixas centradas nas bifurcações para  $N = 997$  e  $2M = 198$ . Quando  $\kappa = 2\pi$  ocorrem as bifurcações.

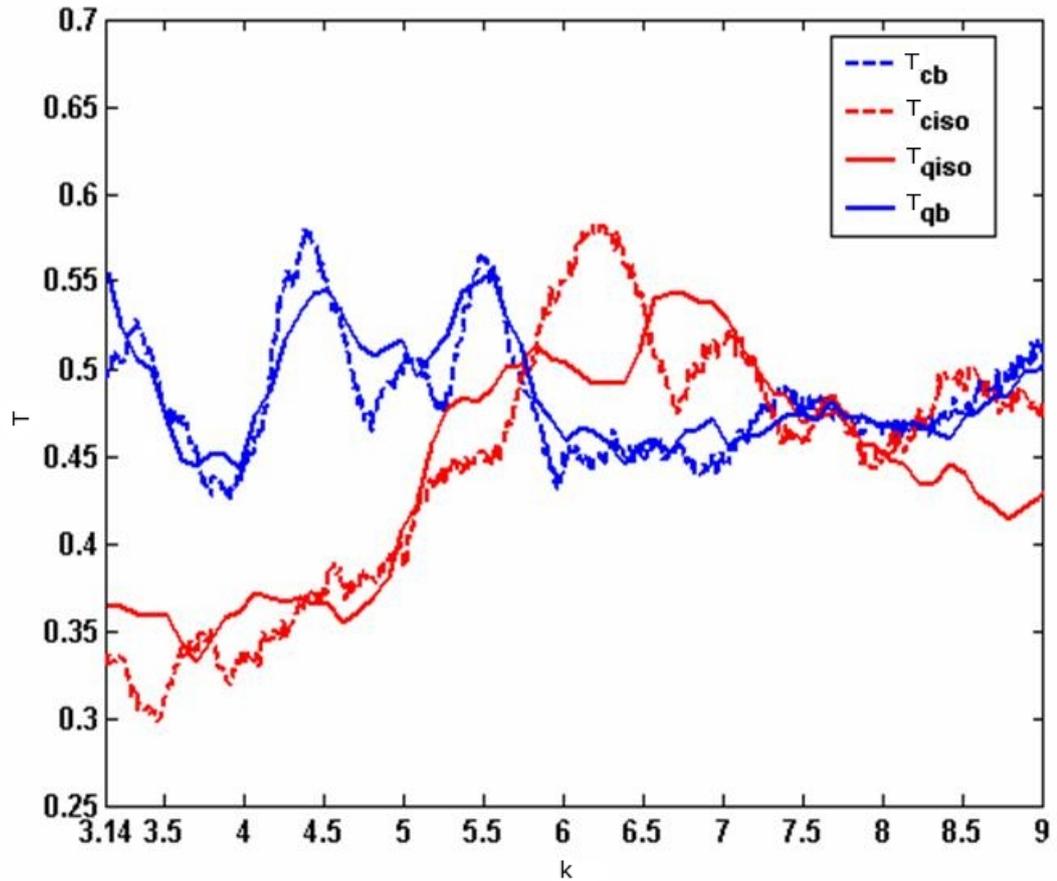


Figura 6.8: Condutância clássica (linha tracejada) e quântica (linha cheia) para as faixas centradas nas órbitas isoladas (linha vermelha) e bifurcações (linha azul). Quando  $\kappa = 2\pi$  ocorrem as bifurcações.

dicas isoladas para a transmissão e reflexão clássica e quântica, respectivamente. Os valores de  $T$  e  $R$  permanecem em torno de 0.5, independentemente do valor de  $\kappa$ . Vale a pena ressaltar, que nestes dois gráficos mesmo quando ocorrem as bifurcações, em  $\kappa = 2\pi$ , somente as órbitas isoladas contribuem, porque bloqueamos as bifurcações com as faixas.

No gráfico (6.8) temos a condutância para as duas configurações (faixas centradas nas órbitas isoladas e faixas centradas nas bifurcações) para o caso clássico e quântico. Estas são as mesmas curvas de transmissão dos gráficos anteriores, mas para visualizarmos melhor o que acontece com a condutância, as colocamos na mesma figura. Pode-se ver claramente que quando há a contribuição das bifurcações, a condutância cresce até  $\kappa = 2\pi$ , onde ocorrem as bifurcações. Enquanto

que para as curvas da condutância em que somente as órbitas isoladas contribuem seu valor permanece em torno de 0.5. Portanto, estes gráficos apontam uma influência das bifurcações na condutância.

## 6.7 Considerações finais

A condutância para sistemas abertos é um problema para o qual ainda há inúmeras questões não respondidas. Muitas pesquisas têm sido feitas para abordar estas questões [8–10, 22, 70, 72–75]. Desta maneira, o que discutimos até aqui, serve de base para estudarmos o problema da condutância em sistemas abertos, em particular em heteroestruturas semicondutoras (GaAs/AlGaAs), para o qual espalhamentos relacionados a desordens podem ser negligenciados em comparação ao espalhamento devido as características geométricas ao longo do condutor. O objetivo é, posteriormente, fazer uma revisão mais detalhada deste assunto e analisar as flutuações universais da condutância de maneira similar ao que foi feito no capítulo 5, onde apresentamos a dedução [64] do *time delay* em termos das órbitas periódicas, veja a equação (5.37). Os gráficos apresentadas apontam que a condutância também é sensível às trajetórias periódicas clássicas, no limite semiclássico. No entanto, não podemos concluir nada, porque para a condutância ainda não se tem uma teoria semiclássica. O objetivo é investigar a possibilidade de obtê-la. A aplicação de métodos semiclássicos a problemas quânticos é interessante, antes de mais nada, como um meio de associar propriedades quânticas à características específicas da dinâmica clássica do sistema, as trajetórias periódicas clássicas. Com as trajetórias periódicas clássicas, além do resultado do *time delay*, se obteve a dedução da fórmula traço de Gutzwiller (que atualmente é a única maneira de se quantizar sistemas físicos que são classicamente caóticos).

# Capítulo 7

## Conclusão

Nesta dissertação estudamos as propriedades de transporte em nanocavidades. Propriedades de transporte em nanocavidades balísticas bidimensionais em regime de baixa densidade eletrônica e baixas temperaturas, como é o caso do gás de elétrons bidimensional (2-DEG), têm sido objetos de estudo desde os primórdios da década de 90. Hoje, a maioria dos estudos nesta área baseia-se em modelos de mapas, como por exemplo, o mapa do gato [63] e o mapa padrão de Chirikov [4], com aberturas para simular as propriedades de transporte desses sistemas. Estes mapas, quando abertos, podem modelar o comportamento de uma cavidade balística acoplada a reservatórios de elétrons, no limite semiclássico, tornando os sistemas físicos reais matematicamente tratáveis.

No capítulo 4 apresentamos e estudamos a versão simetrizada do mapa de Chirikov, usado neste trabalho para estudar as flutuações universais do *time delay*, no capítulo 5, e da condutância, no capítulo 6. O mapa clássico é dado por

$$\begin{aligned}q_{t+1} &= q_t + p_t + \frac{\kappa}{4\pi} \sin(2\pi q_t) && (mod\ 1) \\p_{t+1} &= p_t + \frac{\kappa}{4\pi} [\sin(2\pi q_t) + \sin(2\pi q_{t+1})] && (mod\ 1)\end{aligned}\tag{7.1}$$

cujas formas dos toros é cilíndrica com  $\{q, p \in [0, 1)\}$ . Para  $\kappa = 0$  o sistema é

integrável e todas as trajetórias permanecem no toro unidimensional no espaço de fase. Para  $\kappa > 0$  o sistema começa sua transição para o caos. Para  $\kappa$  suficientemente pequeno as curvas seguem suavemente. E aumentando  $\kappa$ , as curvas vão sendo quebradas de maneira como é descrito pelo teorema KAM (2.9). Os pontos fixos de período 1 e sua estabilidade, relevantes para nossas análises, foram determinados. As tabelas (4.1) e (4.2) contêm os pontos fixos e sua estabilidade, respectivamente.

O operador evolução temporal para este mapa é obtido da quantização do mapa clássico, equação (7.1) e é dado por [4]:

$$\mathcal{F}_{nn'} = \frac{1}{\sqrt{iN}} e^{\frac{i\pi}{N}(n-n')^2 - \frac{iN}{\hbar_{eff}} \frac{\kappa}{4\pi} [\cos(2\pi q) + \cos(2\pi q')]} \quad (7.2)$$

No capítulo 5 estudamos o *time delay* e as flutuações universais do *time delay* com base na versão simetrizada do mapa padrão de Chirikov, que exhibe dinâmica que vai de regular a caótica, podendo apresentar regiões regulares dentro de um mar de caos, dependendo do valor do parâmetro de perturbação  $\kappa$ , no limite clássico. Vimos que as flutuações do *time delay* têm uma distribuição não-Gaussiana e segundo momento tem uma lei de potência dependente de um parâmetro semi-clássico, com expoente fracional. No limite semiclássico, este expoente é obtido das órbitas periódicas que bifurcam e permanecem *aprisionadas* no sistema. Apresentamos a dedução do *time delay* em termos das órbitas periódicas [64]:

$$\tau(\epsilon) = \frac{1}{MN} \left( \frac{N}{2\pi} + \frac{1}{\pi} \text{Re} \sum_{n=1}^{\infty} e^{in\epsilon} \text{tr} U_i^n \right) \quad (7.3)$$

No capítulo 6 iniciamos o estudo da condutância. A aproximação de Landauer-Büttiker [9] vê a condutância como um problema de espalhamento. A interpretação das medidas de condutância no regime balístico, de um ponto de vista de Caos Quântico, envolve o estudo de sistemas abertos da Mecânica Quântica e Mecânica Clássica. A condutância quântica é obtida através da matriz de espa-

lhamento  $S$  do mapa e é dada por:

$$G = \frac{e^2}{h} \text{Tr}(tt^\dagger) \quad (7.4)$$

Calculamos numericamente a condutância quântica e clássica. Os gráficos apresentados, apontam que a condutância também é sensível às trajetórias periódicas clássicas, no limite semiclássico. No entanto, nada podemos concluir, porque para a condutância ainda não se tem uma teoria semiclássica. O objetivo é investigar a possibilidade de obtê-la. A aplicação de métodos semiclássicos a problemas quânticos é interessante, antes de mais nada, como um meio de associar propriedades quânticas à características específicas da dinâmica clássica do sistema, as trajetórias periódicas clássicas. Com as trajetórias periódicas clássicas, além do resultado do *time delay*, foram obtidos resultados como dedução da fórmula traço de Gutzwiller (que atualmente é a única maneira de se quantizar sistemas físicos que são classicamente caóticos).

Desta forma, um dos trabalhos futuros será o de investigar uma maneira de escrever a condutância em termos de trajetórias periódicas e o outro será investigar o efeito das bifurcações na densidade  $P(\tau)$  dos proper delay times, como discutido na seção (5.5).

# Referências

- [1] OZORIO de ALMEIDA, A. M., VALLEJOS, R. O. Caos e mecânica quântica. Disponível em: <<http://www.cbpf.br/RevistaCBPF/pdf/CaosQuant.pdf>>. Acesso em: 12 set. 2005.
- [2] STECK, D. A. *Quantum chaos, transport, and decoherence in atom optics*. Austin, 2001. Ph.D. Thesis (Doctor of Philosophy). Faculty of the Graduate School, University of Texas at Austin, Austin.
- [3] GLEICK, J. *Caos A criação de uma nova ciência*. Rio de Janeiro: Campus, 1989.
- [4] TAJIC, A. *Study of a stroboscopic model of a quantum dot*. Leiden, 2005. Ph.D. Thesis (Doctor of Philosophy). Instituut-Lorenz for Theoretical Physics, Universiteit Leiden, Leiden.
- [5] KOUWENHOVEN, L. P., MARCUS, C. M. , McEUEEN P. L., TARUCHA, S., WESTERVELT R. M., WINGREEN, N. S. Electron transport in quantum dots. In: KOUWENHOVEN, L. P., SCHON, G, SOHN, L.L. (Eds.). *Mesoscopic electron transport*. Dordrecht: Kluwer, 1997. p. 105–214. (Nato ASI Conference Proceedings).
- [6] HUIBERS, A. *Electron transport and dephasing in semiconductor quantum dots*. Stanford, 1999. Ph.D. Thesis (Doctor of Philosophy). Department of Electrical Engineering, Stanford University, Stanford.
- [7] DATTA, S. *Electronic transport in mesoscopic systems*. Cambridge: Cambridge University Press, 1995.
- [8] BEENAKKER, C. W. J. Random-matrix theory of quantum transport. *Rev. Mod. Phys.*, v. 69, n. 3, p. 731–808, July 1997.
- [9] BEENAKKER, C. W. J., HOUTEN, H. van, Quantum transport in semiconductor nanostructures. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/cond-mat/0412664>>. Acesso em: 13 jan. 2006.
- [10] JALABERT, R. A. The semiclassical tool in mesoscopic physics. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/cond-mat/9912038>>. Acesso em: 07 nov. 2005.
- [11] BERRY, M. V., TABOR, M. Level clustering in the regular spectrum. *Proc. R. Soc. Lon. A*, v. 356, n. 1686, p. 375–394, Sept. 1977.

## Referências

---

- [12] MEHTA, M. L. *Random Matrices*. 2nd ed. San Diego: Academic Press, 1991.
- [13] BERRY, M. V. Regular and irregular semiclassical wave functions. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 10, n. 12, p. 2083–2091, Dec. 1977.
- [14] BERRY, M. V., ROBNICK, M. Semiclassical level spacings when regular and chaotic orbits coexist. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 17, n. 12, p. 2413–2421, Aug. 1984.
- [15] BERRY, M. V., KEATING, J. P., PRADO, S. D. Orbit bifurcations and spectral statistics. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 31, n. 13, p. 245–254, Apr. 1998.
- [16] OZORIO de ALMEIDA, A. M., HANNAY, J. H. Resonant periodic orbits and the semiclassical energy spectrum. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 20, n. 17, p. 5873–5883, Dec. 1987.
- [17] SIEBER, M. Uniform approximation for bifurcations of periodic orbits with high repetition numbers. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 29, n. 15, p. 4715–4732, Aug. 1996.
- [18] BERRY, M. V. Focusing and twinkling: critical exponents from catastrophes in non-Gaussian random short waves. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 10, n. 12, p. 2061–2081, Dec. 1977.
- [19] BERRY, M. V., KEATING, J. P., SCHOMERUS, H., Universal twinkling exponents for spectral fluctuations associated with mixed chaology. *Proc. R. Soc. Lond. A*, v. 456, n. 1999, p. 1659–1668, July 2000.
- [20] KEATING, J. P., PRADO, S. D. Orbit bifurcations and the scarring of wave functions. *Proc. R. Soc. Lond. A*, v. 457, n. 2012, p. 1855–1872, Aug. 2001.
- [21] KEATING, J. P., PRADO, S. D., SIEBER, M. Universal quantum signature of mixed dynamics in antidot lattices. *Phys. Rev. B: Condensed Matter and Materials Physics*, v. 72, n. 24, art. 245334, Dec. 2005.
- [22] TWORZYDLO, J., TAJIC, A., BEENAKKER, C. W. J. Quantum-to-classical crossover of mesoscopic conductance fluctuations. *Phys. Rev. B: Condensed Matter and Materials Physics*, v. 69, n. 16, art. 165318, Apr. 2004.
- [23] SCHOMERUS, H., TWORZYDLO, J. Quantum-to-classical crossover of quasi-bound states in open quantum systems. *Phys. Rev. Lett.*, v. 93, n. 15, art. 154102, Oct. 2004.
- [24] MOSER, J. Is the solar system stable? *Math. Intell.*, v. 1, p. 65–71, 1978.
- [25] GUTZWILLER, M. C. *Chaos in classical and quantum mechanics*. New York: Springer-Verlag, 1990.

## Referências

---

- [26] KEPLER, S. O, SARAIVA, M., F. O. *Fundamentos de Astronomia e Astrofísica*. Porto Alegre: UFRGS, 1999.
- [27] PIERRE Simon Laplace. Disponível em: <[http://en.wikipedia.org/wiki/Pierre-Simon\\_Laplace](http://en.wikipedia.org/wiki/Pierre-Simon_Laplace)>. Acesso: 01 jun. 2007.
- [28] MURRAY, C. Is the solar system stable? Disponível em: <<http://www.fortunecity.com/emachines/e11/86/solarsys.html>>. Acesso em: 08 jun. 2007.
- [29] LANDAU, L., LIFSHITZ, E. *Mecânica*. Moscou: Mir, 1978. Tradução: Braga, E. da S.
- [30] GOLDSTEIN, H., POOLE, C., SAFKO, J. *Classical mechanics*. 3rd ed. San Francisco: Addison-Wesley, 2002.
- [31] HAND, L. N., FINCH, J. D. *Analytical Mechanics*. Cambridge: Cambridge University Press, 1998.
- [32] OTT, E. *Chaos in dynamical systems*. Cambridge: Cambridge University Press, 1993.
- [33] JOSÉ, J. V, SALETAN, E. J. *Classical dynamics: a contemporary approach*. Cambridge: Cambridge University Press, 1998.
- [34] BERRY, M. V. Regular and irregular motion. In: JORNA, S. (Ed.). *Topics in nonlinear dynamics: a tribute to Sir Edward Bullard*. New York: American Institute of Physics, 1978. p. 16–120. (AIP Conference Proceedings, n. 46).
- [35] LICHTENBERG, A. J, LIEBERMAN, M. A. *Regular and stochastic motion*. New York: Springer-Verlag, 1983.
- [36] MARION, J. B., THORNTON, S. T. *Classical dynamics of particles and systems*. 4th ed. Orlando: Harcourt, 1995.
- [37] HÉNON, M. Numerical exploration of Hamiltonian systems. In: GIANNONI, M. J, VOROS, A., ZINN-JUSTIN, J. (Eds.). *Les Houches Lecture Series Session XXXVI*. Amsterdam: North-Holland, 1983. p. 52–170.
- [38] DEVANEY, R. L. *An introduction to chaotic dynamical systems*. 2nd ed. New York: Addison-Wesley, 1989.
- [39] NEWTON, I. *Principia: princípios matemáticos de filosofia natural*. São Paulo, Nova Stella Editorial, 1990. Tradução: Trieste, S. F. R., Brunet, L., G., Ghering, S., T., Celia, M. H. C.
- [40] GUTZWILLER, M. C. Quantum chaos. Disponível em: <<http://www.maths.ex.ac.uk/mwatkins/zeta/quantumchaos.html>>. Acesso em: 08 jul. 2004.

## Referências

---

- [41] YARIV, A. *An introduction to theory and applications of quantum mechanics*. New York: John Wiley, 1982.
- [42] AGUIAR, M. A. M. *O limite semiclássico da mecânica quântica*. Notas de aula. Disponível em <<http://www.ifi.unicamp.br/aguiar/Notas/notas.html>>. Acesso em: 01 out. 2005.
- [43] EINSTEIN, A. Sobre o teorema quântico de Sommerfeld e de Epstein. *Rev. Bras. Ens. de Fís.*, v. 27, n. 1, p. 103–107, mar. 2005. Tradução: Werckmeister, J.
- [44] AGUIAR, M. A. M. Einstein e a teoria do caos quântico. *Rev. Bras. Ens. de Fís.*, v. 27, n. 1, p. 101–102, mar. 2005.
- [45] COHEN, T. C. *Quantum mechanics*. New York: John Wiley, 1977.
- [46] SAKURAI, J. J. *Modern quantum mechanics*. Rev. ed. New York: Addison-Wesley, 1994.
- [47] BERRY, M. V. Some quantum-to-classical asymptotics. In: GIANNONI, M. J, VOROS, A., ZINN-JUSTIN, J. (Eds.). *Les Houches Lecture Series Session LII*. Amsterdam: Elsevier, 1991. p. 201–303.
- [48] REICHL, L. E. *A modern course in statistical physics*. 2nd ed. New York: John Wiley, 1998.
- [49] BOHIGAS, O. Random matrix theories and chaotic dynamics. In: GIANNONI, M. J, VOROS, A., ZINN-JUSTIN, J. (Eds.). *Les Houches Lecture Series Session LII*. Amsterdam: Elsevier, 1991. p. 87–199.
- [50] GUTZWILLER, M. C. Chaos in classical and quantum systems. In: CHUDNOVSKY, D. V, CHUDNOVSKY, G. V. (Eds.). *Classical and quantum models and arithmetic problems*. New York: Marcel Dekker, 1984. p. 285–351.
- [51] GUTZWILLER, M. C. The semi-classical quantization of chaotic hamiltonian systems. In: GIANNONI, M. J, VOROS, A., ZINN-JUSTIN, J. (Eds.). *Les Houches Lecture Series Session LII*. Amsterdam: Elsevier, 1991. p. 201–249.
- [52] GUTZWILLER, M. C. The origins of the trace formula. In: FRIEDRICH, H., ECKHARDT, B. (Eds.) *Classical, Semiclassical and quantum dynamics in atoms, lecture notes in physics*. Berlin: Springer-Verlag, 1997.
- [53] OZORIO de ALMEIDA, A. M. *Sistemas hamiltonianos: caos e quantização*. 2nd ed. Campinas: UNICAMP, 1995.
- [54] TWORZYDLO, J., TAJIC, A., SCHOMERUS, H., BEENAKKER, C. W. J. Dynamical model for the quantum-to-classical crossover of shot noise. *Phys. Rev. B*, v. 68, n. 11, art. 115313, Sept. 2003.

## Referências

---

- [55] MEYER, K. R. Generic bifurcation of periodic points. *Trans. Am. Math. Soc.*, v. 149, n. 1, p. 95–107, May 1970.
- [56] HAAKE, F. *Quantum signatures of chaos*. Berlin: Springer-Verlag, 2001.
- [57] EISENBUD, L. E. Princeton, 1948. Ph.D. Thesis. (Doctor of Philosophy). Princeton University (não publicada).
- [58] WIGNER, E. P. Lower limit for the energy derivative of the scattering phase shift. *Phys. Rev.*, v. 98, n. 1, p. 145–147, Apr. 1955.
- [59] SMITH, F. T. Lifetime matrix in collision theory. *Phys. Rev.*, v. 118, n. 1, p. 349–356, Apr. 1960.
- [60] CARVALHO, C. A. A, NUSSENZVEIG, H. M. Time delay. *Phys. Rep.*, v. 364, n. 2, p. 83–174, Jun. 2002.
- [61] FRIEDEL, J. The distribution of electrons around impurities in monovalent metals. *Phil. Mag.*, v. 43, p. 153–189, 1952.
- [62] BALIAN, R., BLOCH, C. Solution of the Schrödinger equation in terms of classical paths. *Ann. of Phys.*, v. 85, n. 2, p. 514–545, Jun. 1974.
- [63] KEATING, J. P., *Semiclassical properties of the cat maps*. Bristol, 1989. Ph.D. Thesis (Doctor of Philosophy). Department of Mathematics, University of Bristol, Bristol.
- [64] KEATING, J. P., OZORIO de ALMEIDA, A. M., PRADO, S. D., SIEBER, M., VALLEJOS, R. Periodic orbit bifurcations and scattering time delay fluctuations. *Prog. Theor. Phys. Suppl.*, v. 166, p. 10–18, 2007.
- [65] WEISSTEIN, E. W. Jacobi's Determinant Identity Disponível em: <<http://mathworld.wolfram.com/JacobisDeterminantIdentity.html>>. Acesso em: 04 jul. 2007.
- [66] ARFKEN, G. *Mathematical methods for physicists*. 3rd ed. San Diego: Academic Press, 1985.
- [67] CRAWFORD, M. G. A., BROUWER, P. W. Density of proper delay times in chaotic and integrable quantum billiards. *Phys. Rev. E*, v. 65, n. 2, art. 026221, Jan. 2002.
- [68] BROUWER, P. W, FRAHM, K. M., BEENAKKER, C. W. J. Distribution of the quantum mechanical time-delay matrix for a chaotic cavity. *Waves in Random Media*, v. 9, n. 2, p. 91–104, Feb. 1999.
- [69] FISHER, D. S., LEE, P. A. Relation between conductivity and transmission matrix. *Phys. Rev. B*, v. 23, n. 12, p. 6851–6854, Jun. 1981.
- [70] BARANGER, H., U., JALABERT, R. A., STONE, A. D. Quantum-chaotic scattering effects in semiconductor microstructures. *Chaos*, v. 3, n. 4, p. 665–682, Oct. 1993.

## Referências

---

- [71] JALABERT, R. A., BARANGER, H., U., STONE, A. D. Conductance fluctuations in the ballistic regime: a probe of quantum chaos? *Phys. Rev. Lett.*, v. 65, n. 19, p. 2442–2445, Nov. 1990.
- [72] JACQUOD, P., WHITNEY, R. S. *Semiclassical theory of quantum chaotic transport: phase-space splitting*. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/cond-mat/0509186>>. Acesso em: 07 nov. 2005.
- [73] SCHOMERUS, H., JACQUOD, P. Quantum-to-classical correspondence in open chaotic systems. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 38, n. 49, p. 10663–10682, Dec. 2005.
- [74] NONNENMACHER, S., ZWORSKI, M. Fractal Weyl laws in discrete models of chaotic scattering. *J. Phys. A: Math. Gen.*, v. 38, n. 49, p. 10683–10702, Dec. 2005.
- [75] NONNENMACHER, S., ZWORSKI, M. Distribution of resonances for open quantum maps. *Commun. Math. Phys.*, v. 269, n. 2, p. 311–365, Jan. 2007.