Universidade Federal de Pernambuco
Centro de Ciências Exatas e da Natureza
Programa de Pós Graduação em Matemática

Rúbia Esterfânia de Araújo Ramos

GEOMETRIA E DINÂMICA EM SISTEMAS HAMILTONIANOS CLÁSSICOS E QUÂNTICOS

Recife

2019

Rúbia Esterfânia de Araújo Ramos

GEOMETRIA E DINÂMICA EM SISTEMAS HAMILTONIANOS CLÁSSICOS E QUÂNTICOS

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Matemática da Universidade Federal de Pernambuco como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Matemática.

Área de Concentração: Geometria
Orientador: Dr. Fernando Antônio Nóbrega Santos
Coorientador: Dr. Maurício Domingues Coutinho Filho

Recife

2019

Catalogação na fonte
Bibliotecária Arabelly Ascoli CRB4-2068

R175g Ramos, Rúbia Esterfânia de Araújo
Geometria e dinâmica em sistemas hamiltonianos clássicos e quânticos / Rúbia Esterfânia de Araújo Ramos. – 2019.
71 f.: fig.

Orientador: Fernando Antonio Nóbrega Santos
Tese (Doutorado) – Universidade Federal de Pernambuco. CCEN. Matemática. Recife, 2019.
Inclui referências.

1. Geometria. 2. Dinâmica clássica. 3. Dinâmica quântica. 4. Modelo XY. I. Santos, Fernando Antonio Nóbrega (orientador). II. Título.

516 CDD (22. ed.) UFPE-CCEN 2020-31

RÚBIA ESTERFÂNIA DE ARAÚJO RAMOS

GEOMETRIA E DINÂMICA EM SISTEMAS HAMILTONIANOS CLÁSSICOS E QUÂNTICOS

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação do Departamento de Matemática da Universidade Federal de Pernambuco, como requisito parcial para a obtenção do título de Doutorado em Matemática.

Aprovada em: 28/02/2019

BANCA EXAMINADORA

_____

Prof. Dr. Fernando Antônio Nóbrega Santos (Orientador)
Universidade Federal de Pernambuco

_____

Prof. Dr. Malte Henkel (Examinador Externo)
Université de Lorraine

_____

Prof. Dr. Ernesto Carneiro Pessoa Raposo (Examinador Externo)
Universidade Federal de Pernambuco

_____

Prof. Dr. César Augusto Rodrigues Castilho (Examinador Interno)
Universidade Federal de Pernambuco

_____

Prof.Dr. Eduardo Shirlippe Góes Leandro (Examinador Interno)
Universidade Federal de Pernambuco

A todos os colegas pós-graduandos que mesmo em meio as dificuldades e limitações escolhem ir até o fim.

AGRADECIMENTOS

A Deus por seu infinito amor. Pude sentir durante toda essa trajetória que eu não estava só. A fé foi minha força nos momentos difícies e minha certeza nas coisas simplesmente inexplicáveis que aconteceram nesse período. Sou grata.

A minha família, pelo amor, apoio e compreensão. Em particular, quero agradecer ao meu esposo Sidney. Tinha que ser ele. Dotado de uma paciência infinita e foi um grande suporte para que eu concluisse essa tese. Abriu mão de seus planos e me acompanhou na realização dos meus (doutorado sanduíche). Sempre foi muito compreensivo com minhas noitadas científicas e nunca reclamou ou questionou o fato de muitas vezes ir aos eventos sociais sem minha presença. Estar com uma pessoa que te apoia e faz de tudo para que você possa alcançar seus objetivos não tem preço. Obrigada por tudo, Sidney. Te amo.

Aos meu orientadores, Fernando Nóbrega e Maurício Coutinho. Ser orientada por duas pessoas dessas, sinceramente, não é pra qualquer um (me sinto o máximo por isso). Mesmo com tantas dificuldades eles foram pacientes, profissionais e me acolheram. Por isso que digo a eles: Deus tem sido bom demais comigo. Eles entenderam minhas dificuldades e me ajudaram a chegar onde eu almejava chegar. Hoje são orientadores amigos. Professor Maurício sempre muito atencioso, sempre disposto a ter uma noitada científica esteve acompanhado todo esse trabalho. Professor Fernando é aquele orientador psicólogo e muito compreensivo, disposto a lhe apoiar em tudo na sua carreira acadêmica. Não mediu esforços para que eu conseguisse a bolsa para o doutorado sanduíche. Ele de fato lhe inspira a ser um cientista melhor. Meus orientadores são mentes brilhantes. Agradeço a vocês por tudo que fizeram e fazem por mim. Não vou dizer um adeus porque vocês vão me aguentar mais um tempinho né? Como Maurício diz: Temos muitas coisas para escrever.

Um certo dia, eu estava namorando com um artigo do expoente de Lyapunov numérico e poucos dias depois eu encontro o autor, Luciano Miranda, em uma palestra na UFRPE. Fiquei imensamente feliz. Luciano Miranda é excelente pesquisador e agora também é um grande amigo. A parceria segue firme. Obrigada por tudo Luciano.

Ao Professor Malte Henkel e toda sua famíla por me acolherem tão bem no período que passei na França. Professor Malte Henkel é um exemplo de pesquisador. Sempre disposto a tirar dúvidas e a forma como ele fala de física e matemática, contagia. Um cientista brilhante. Obrigada por tudo Professor Malte.

Aos professores do Departamneto de matemática da UFPE pela valiosa contribuição na minha vida acadêmica. Os cursos foram a base para esse trabalho.

Aos meus amigos por alegrarem meus dias tristes fazendo com que essa caminhada fosse muito mais leve. Em especial, quero agradecer ao meu amigo e irmão Marcelo.

Marcelo é um amigo para todas horas e eu sei que se um dia eu acordar precisando de algo eu tenho com quem contar. Obrigada meu amigo, passamos por maus e bons momentos juntos. Agora estamos cada vez mais perto.

A CAPES, pelo apoio financeiro.

"Na vida, não existe nada a temer, mas a entender."
(Marie Curie [19])

RESUMO

Na primeira parte desse trabalho, apresentamos a dinâmica do modelo XY de campo médio na presença do campo magnético utilizando métodos de geometria Riemanniana. Para tal fim, calculamos quantidades geométricas, como curvatura de Ricci e suas flutuações, com o intuito de estimarmos analiticamente, sob certas hipóteses, o maior expoente de Lyapunov do sistema no limite termodinâmico. Para soluções estáveis, as quantidades geométricas e o expoente de Lyapunov apresentam comportamentos compatíveis com os resultados de equilíbrio para a densidade Jacobiana de pontos críticos em concordância com a não existência da transição de fase [47]. No estado metaestável encontramos um rico cenário dinâmico, onde o expoente de Lyapunov apresenta o fenômeno de reentrância para campos suficientemente pequenos. Em ambos os estados o sistema prediz um possível comportamento caótico. Numericamente, as quantidades geométricas e o expoente de Lyapunov também são obtidas e qualitativamente apresentam boa concordância com os resultados analíticos. Na segunda parte, uma construção fenomenológica das equações para dinâmica quântica de Langevin, baseada nos critérios físicos de: (i) comutadores canônicos de tempo igual, (ii) a fórmula de Kubo, (iii) o teorema do virial e (iv) o teorema da flutuação-dissipação quântico, é apresentada. O caso do oscilador harmônico acoplado unidimensional a um banho externo é analisado em detalhes. Isso permite distinguir uma abordagem semi-clássica markoviana, conforme a Bedeaux e Mazur, de uma abordagem totalmente quântica não-markoviana, apresentada por Ford, Kac e Mazur. O teorema de flutuação-dissipação quântica é visto como incompatível com uma dinâmica markoviana. Finalmente, possíveis aplicações para o modelo esférico quântico são discutidas.

Palavras-chave: Dinâmica Clássica. Dinâmica Quântica. Geometria. Modelo XY. Modelo Esférico.

ABSTRACT

In the first part of the work, the dynamics for the XY field model in the presence of the magnetic field with the geometric approach is presented analytically. For this purpose, analytically, geometric quantities such as curvature and fluctuation were calculated and through them the largest exponent of Lyapunov was obtained at the thermodynamic limit. In the stable state the geometric quantities and the Lyapunov exponent exhibit behaviors compatible with the equilibrium results for the Jacobian density of critical points in agreement with non-existence of the phase transition [47]. In the metastable state we find a rich dynamic scenario, where the Lyapunov exponent presents the phenomenon of recess for sufficiently small fields. In both states the system predicts a possible chaotic behavior. Numerically, the geometric quantities and the Lyapunov exponent are also obtained and qualitatively shows good concomitance with the analytical result. In the second part of this work, a phenomenological construction of quantum Langevin equations, based on the physical criteria of (i) the canonical equal-time commutators, (ii) the Kubo formula, (iii) the virial theorem and (iv) the quantum fluctuation-dissipation theorem is presented. The case of a single harmonic oscillator coupled to a large external bath is analysed in detail. This allows to distinguish a markovian semi-classical approach, due to Bedeaux and Mazur, from a non-markovian full quantum approach, due to Ford, Kac and Mazur. The quantum-fluctuation-dissipation theorem is seen to be incompatible with a markovian dynamics. Possible applications to the quantum spherical model are discussed.

Keywords: Classical Dynamics. Quantum Dynamics. Geometry. XY Model. Spherical Model.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Modelo XY de campo médio. Descrição canônica: Temperatura **T** e norma da magnetização **M** em função da energia por partícula **U**, respectivamente. 21

Figura 2 – Modelo XY de campo médio: Curvatura de Ricci, κ_0, e sua flutuação, σ_κ, em função da energia por partícula **U** para $h = 0$ 29

Figura 3 – Maior expoente de Lyapunov como função da energia por partícula **U** calculado via estimativa analítica (2.44) para $h = 0$ 29

Figura 4 – Modelo XY de campo médio na presença do campo. Temperatura **T** e norma da Magnetização **M** como função da energia por partícula **U**, calculada analiticamente pelo método do ponto de sela. 33

Figura 5 – Modelo XY de campo médio na presença do campo: Expressão analítica para a média microcanônica da curvatura de Ricci, κ_0, e de sua flutuação, σ_κ, em função da energia para diferentes valores de campo h. 36

Figura 6 – Modelo XY de campo médio na presença do campo. Maior expoente de Lyapunov como função da energia por partícula **U** calculado via estimativa analítica (2.44). 36

Figura 7 – Soluções metaestáveis do modelo XY de campo médio na presença do campo: Expoente de Lyapunov λ como função da energia por partícula **U** calculada analiticamente via expressão (2.25) para vários valores de campo. 37

Figura 8 – Dinâmica do modelo XY de campo médio: erro relativo da energia para $N = 5 \times 10^4$, $h = 0.2$ e $\mathbf{U}_0 = 0.45$. 39

Figura 9 – Evolução temporal da componente do vetor magnetização $\mathbf{M}_y$, para diversos valores de N com $h = 0.2$ e $\mathbf{U} \approx 0.45$. 40

Figura 10 – Evolução temporal da componente do vetor magnetização $\mathbf{M}_x$ e da magnetização **M**, para diversos valores de N com $h = 0.2$ e $\mathbf{U} \approx 0.45$. 40

Figura 11 – Magnetização **M** em função da energia por partícula **U**, calculada analiticamente e numericamente para os campos $h = 0$, $h = 0.2$, $h = 0.75$, $h = 1$ e $h = 1.25$ respectivamente. 41

Figura 12 – Modelo XY de campo médio na presença do campo: Curvatura de Ricci κ_0 em função da energia por partícula **U**, calculada analiticamente e numericamente para os campos $h = 0$, $h = 0.2$, $h = 0.75$, $h = 1$ e $h = 1.25$ respectivamente. 42

Figura 13 – Modelo XY de campo médio na presença do campo: Flutuação da curvatura de Ricci σ_κ em função da energia por partícula $\mathbf{U}$, calculada analiticamente e numericamente para os campos $h = 0$, $h = 0.2$, $h = 0.75$, $h = 1$ e $h = 1.25$ respectivamente. 43
Figura 14 – Maior expoente de Lyapunov, λ em função da energia por partícula $\mathbf{U}$, calculado analiticamente e numericamente para os campos $h = 0$, $h = 0.2$, $h = 0.75$, $h = 1$ e $h = 1.25$. 45

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO 14

2 ABORDAGEM GEOMÉTRICA PARA DINÂMICA HAMILTONIANA NO MODELO XY DE CAMPO MÉDIO 17

2.1 O Modelo 17

2.2 Dinâmica para o modelo Hamiltoniano de campo médio a campo magnético nulo 18

2.2.1 Solução no equilíbrio e observáveis relevantes 18

2.2.2 Abordagem Geométrica 20

2.2.3 Estimativa analítica para o expoente de Lyapunov 25

3 DINÂMICA PARA O MODELO XY COM CAMPO MAGNÉTICO . 30

3.1 Solução de equilíbrio e observáveis termodinâmicos 30

3.1.1 Estimativa analítica para o expoente de Lyapunov 33

3.1.2 Expoente de Lyapunov para os estados metaestáveis 37

3.2 Simulação Numérica 38

3.2.1 Magnetização 39

3.2.2 Curvatura e Flutuação 42

3.2.3 Expoente de Lyapunov 44

3.3 Discussão e Perspectivas 46

4 DINÂMICA QUÂNTICA DE LANGEVIN 47

4.1 Oscilador harmônico dissipativo semi-clássico 47

4.1.1 Solução Formal 47

4.1.2 Comutadores para tempos iguais 48

4.1.3 Função Resposta 50

4.1.4 Comutadores e fórmula do Kubo 52

4.1.5 Anti-comutadores e o teorema do virial 54

4.1.6 Teorema da Flutuação-Dissipação 56

5 CONSTRUÇÃO AXIOMÁTICA DAS EQUAÇÕES QUÂNTICAS DE LANGEVIN 58

5.1 Oscilador harmônico dissipativo quântico 58

5.1.1 Comutador para tempo iguais 58

5.1.2 Função resposta 59

5.1.3 Fórmula do Kubo 59

5.1.4 Anti-commutadores e teorema do virial 61

5.1.5 Teorema da flutuação-dissipação quântico 62
5.2 Aplicação 63
5.2.1 Modelo Esférico Quântico 63
5.2.2 Equações de Langevin para o modelo esférico quântico 64
5.3 Discussão e Perspectiva 65

REFERÊNCIAS 67

1 INTRODUÇÃO

"Uma borboleta bate asas na China e causa um furacão na América". Essa tão conhecida frase, atribuída ao meteorologista e matemático Edward Lorenz remetendo-se à sensibilidade às condições iniciais que um sistema dinâmico pode apresentar, ou seja, a impossibilidade de prever o comportamento futuro do sistema devido a pequenas mudanças no estado inicial, caracteriza o que denominamos caos.

Sistemas caóticos estão onipresentes nas situações do cotidiano, nas leis da natureza e em diversas áreas do conhecimento. São sistemas com vasta aplicabilidade, como por exemplo o oscilador amortecido, mapa logístico, mapa de Henon, movimento de uma partícula sujeito ao potencial de Duffing, entre outros que apresentam tal comportamento.

Um questionamento bastante natural seria: Como podemos detectar a presença de caos de um modo geral?

Até o presente momento não existe uma teoria que possa identificar comportamentos caótico para sistemas em geral e muitas investigações têm sido feitas nesse sentido.

Uma ferramenta utilizada para conhecer o comportamento divergente, conservativo ou dissipativo de um sistema dinâmico é o expoente de Lyapunov, que descreve a evolução de duas trajetórias com condições iniciais suficientemente próximas. No caso em que o expoente de Lyapunov, é positivo, as trajetórias são instáveis e o vetor separação, que mede a distancia entre as mesmas, cresce exponencialmente com $t \to \infty$, caracterizando o expoente de Lyapunov como um indicador de caos.

O que ocorre em termos práticos é que para muitos sistemas de interesse físico, em particular sistemas com muitos graus de liberdade, são poucos os casos em que é possível calcular analiticamente o expoente de Lyapunov.

A abordagem geométrica da dinâmica hamiltoniana descrita em [44], [16], [17] e [45], nos possibilita obtermos uma estimativa analítica para o maior expoente de Lyapunov em sistemas hamiltonianos com muitos graus de liberdade. Essa abordagem será a base da primeira parte nosso estudo, que consiste nos capítulos descritos a seguir.

No capítulo 2, apresentaremos o modelo clássico XY de campo médio, um modelo padrão para dinâmica caótica em sistemas de interação de longo alcance. De fato, procederemos para a solução no equilíbrio e determinaremos os principais observáveis termodinâmicos. A abordagem geométrica é descrita sucintamente como uma rota alternativa para estimar analiticamente o expoente de Lyapunov.

No capítulo 3, consideraremos o modelo XY na presença do campo magnético. A solução no equilíbrio, os principais observáveis, as quantidades geométricas e o expoente

de Lyapunov para as soluções estáveis são determinados analiticamente. As comparações e discussões dos resultados numéricos e analíticos são apresentadas. No estado metaestável o expoente de Lyapunov é exibido e os fenômenos em torno do mesmo são explorados. Em particular, investigaremos o efeito do campo magnético e várias propriedades de interesse, inclusive na vizinhança da transição de fase magnética (fase ferromagnética para fase paramagnética) a campo nulo.

Na segunda parte desta tese será realizada uma construção fenomenológica das equações de Langevin quânticas.

Na mecânica estatística clássica de não-equilíbrio, escrever uma equação de Langevin é uma abordagem padrão e bem definida para a descrição do relaxamento dissipativo de qualquer sistema clássico em direção ao seu estado estacionário (ou de equilíbrio). No entanto, para sistemas quânticos uma abordagem universal e satisfatória ainda não existe. Um exemplo é o oscilador harmônico quântico simples, cujas equações de Langevin são dadas por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}s(t) &= \frac{1}{m}p(t) \\ \frac{\partial}{\partial t}p(t) &= -m\omega^2 s(t) - \lambda p(t) + \eta(t), \end{aligned} \tag{1.1}$$

onde s e p correspondem, respectivamente, às variáveis canonicamente conjugadas de spin e momento, m a massa e ω a frequência angular do oscilador. Enquanto as equações (1.1) fornecem uma descrição adequada na mecânica clássica, na mecânica quântica o comportamento a $T = 0$ é inconsistente com um sistema quântico genuíno [14].

Motivados pelo problema de determinar uma equação de Langevin quântica consistente, Bedeaux e Mazur [7, 8] sugerem uma versão modificada das equações (1.1):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}s(t) &= \frac{1}{m}p(t) + \eta_s(t) \ , \\ \frac{\partial}{\partial t}p(t) &= -m\omega^2 s(t) - \lambda p(t) + \eta_p(t), \end{aligned} \tag{1.2}$$

onde η_p, η_s são os ruídos com primeiro momento nulo e segundo momento:

$$\begin{aligned} \langle \eta_p(t)\eta_p(t')\rangle &= \lambda m\hbar\omega \coth\left(\hbar\omega/2k_BT\right)\, \delta(t-t') \\ \langle \eta_s(t)\eta_p(t')\rangle &= -\langle \eta_p(t)\eta_s(t')\rangle = \frac{i\hbar\lambda}{2}\delta(t-t') \\ \langle \eta_s(t)\eta_s(t')\rangle &= 0, \end{aligned} \tag{1.3}$$

T é a temperatura do banho e δ denota a distribuição de Dirac.

Claramente, as equações (1.2,1.3) descrevem um sistema com a propriedade Markoviana.

Essa abordagem foi baseada em uma análise da equação mestra da matriz densidade ρ:

$$\hbar\partial_t\rho = -\mathbf{i}[H,\rho] + \hbar\mathcal{L}\delta S/\delta\rho, \tag{1.4}$$

onde S é a entropia termodinâmica e $\mathcal{L}$ é o super operador cujas propriedades são condicionadas por: (i) a força termodinâmica ser hermitiana, (ii) a conservação da probabilidade, isto é, $tr(\rho) = 1$ para todo tempo $t \geq 0$ e (iii) as relações de Onsager.

A partir disso, foi deduzida a seguinte equação de movimento para as médias dependentes do tempo de um operador A [8, 7]:

$$\frac{d}{dt}\left(\langle A\rangle(t) - \langle A\rangle_{eq}\right) \;=\; tr\left(\frac{dA}{dt}\,\delta\rho\right) \;=\; tr\left(\left(\frac{\mathbf{i}}{\hbar}\left[H, A\right] + \lambda A - \frac{\mathbf{i}\lambda}{\hbar}\left[Ap, x\right]\right)\delta\rho\right) \quad (1.5)$$

onde $\delta\rho = \rho - \rho_{eq}$ e ρ_{eq} denota a matriz densidade no equilíbrio.

Também foram calculadas as funções de Green de spin e momentum para dois tempos no estado estacionário de (1.5) e verificaram que uma solução direta de (1.2) reproduz as correlações de ruído (1.3).

Seriam portanto, as equações (1.2) uma descrição de Langevin genuinamente quântica para o caso do oscilador harmônico simples?

Baseado nas propostas (1.1, 1.3) do Bedeaux e Mazur como um dispositivo fenomenológico, formulamos quatro critérios para uma descrição razoável da dinâmica quântica. Procederemos do seguinte modo:

No capítulo 3 apresentaremos os quatro critérios e consideraremos o caso do oscilador harmônico simples incluindo os dois ruídos conforme sugerido por [8, 7], mas, também incluindo os efeitos das condições iniciais.

No capítulo 4 uma proposta para as equações quânticas de Langevin do oscilador harmônico amortecido com os dois ruídos, será apresentada de modo que todos os quatro critérios são satisfeitos. Finalmente, reinterpretaremos as equações quânticas de Langevin para o modelo esférico com base nas equações do oscilador descrito anteriormente.

No capítulo 5, nós concluiremos e apresentaremos as perspectivas futuras.

2 ABORDAGEM GEOMÉTRICA PARA DINÂMICA HAMILTONIANA NO MODELO XY DE CAMPO MÉDIO

2.1 O Modelo

O modelo XY de campo médio estudado neste capítulo é um modelo padrão para o estudo da dinâmica em sistemas com interação de longo alcance e exibe muitas características interessantes que têm sido extensivamente investigadas, tais como: expoente de Lyapunov tendendo a zero [33], não-ergodicidade [46], [27], relaxação lenta [34], entre outras. O XY de campo médio também é exemplo paradigmático para compreensão da dinâmica por meio de abordagens geométricas e topológicas [16], [15], [44], [28], [50], [47], [48].

O modelo descreve o movimento de N partículas em um círculo unitário interagindo via um potencial de alcance infinito. Na presença do campo magnético, as equações de movimentos são derivadas da seguinte função Hamiltoniana:

$$H(\mathbf{p},\mathbf{q}) \;=\; \sum_{i=1}^{N}\frac{p_i^2}{2} + \frac{c}{2N}\sum_{i,j=1}^{N}(1-\cos(q_i-q_j)) - h\sum_{i=1}^{N}\cos(q_i), \tag{2.1}$$

onde o primeiro termo corresponde a energia cinética $K(\mathbf{p}=p_1,...,p_N)$ e os demais ao potencial $V(\mathbf{q}=q_1,...,q_N)$, incluindo o termo Zeeman. As variáveis canonicamente conjugadas q_i e p_i representam respectivamente a posição e o momento da i-ésima partícula, h é o campo magnético na direção do eixo x do referencial escolhido e o fator $\frac{1}{N}$ (prescrição de Kac) garante a extensidade da energia $\left(\frac{E}{N}\propto 1\right)$.

A interação entre as partículas é determinada pela constante de acoplamento c: $c>0$ corresponde ao caso (atrativo) ferromagnético e $c<0$ ao caso (repulsivo) antiferromagnético. Sem perda de generalidade, consideraremos aqui o caso ferromagnético com $c=1$.

O vetor spin associado a cada partícula:

$$\mathbf{m}_i(q_i) \;=\; (\cos(q_i),\ \sin(q_i)) \tag{2.2}$$

define a magnetização, M, que é dada por:

$$M \;=\; M(\mathbf{q}) \;=\; (M_x(\mathbf{q}),M_y(\mathbf{q})) = \;\frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\mathbf{m}_i(q_i). \tag{2.3}$$

O módulo do vetor M, o qual denotaremos por $\mathbf{M}$, mede o grau de aglomeração das partículas.

A solução analítica do modelo no ensemble microcanônico é conhecida e detalhes podem ser vistos em [21] e [48]. No ensemble canônico a mesma é completamente

determinada conforme veremos na próxima seção. Simulações numéricas no ensemble microcanônico cujos resultados estão descritos em [4] serão apresentados no capítulo 4.

2.2 Dinâmica para o modelo Hamiltoniano de campo médio a campo magnético nulo

2.2.1 Solução no equilíbrio e observáveis relevantes

Consideremos o Hamiltoniano do modelo conforme descrito em (2.1) com campo magnético $h = 0$:

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2} + \frac{1}{2N} \sum_{i,j=1}^{N} (1 - \cos(q_i - q_j)). \tag{2.4}$$

A solução formal do modelo no ensemble canônico é determinada pela função de partição:

$$Z(\beta, N) = \int_{\mathbb{R}} \int_{\Gamma} \prod_{i=1}^{N} dp_i dq_i \exp(-\beta H), \tag{2.5}$$

com $\beta = \frac{1}{T}$ ($k_B = 1$) e Γ o espaço de configuração da coordenada $\mathbf{q}$.
Podemos escrever $Z(\beta, N)$ na forma:

$$Z(\beta, N) = \left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^{\frac{N}{2}} Z_V(\beta, N), \tag{2.6}$$

no qual o primeiro fator é a contribuição do termo cinético dado por:

$$\begin{aligned} Z_K(\beta, N) &= \int_{\mathbb{R}} \prod_{i=1}^{N} dp_i \exp\left(-\beta \sum_{i=1}^{N} \frac{p_i^2}{2}\right), \\ &= \int_{\mathbb{R}} \prod_{i=1}^{N} dp_i \left(\prod_{i=1}^{N} \exp\left(-\beta \frac{p_i^2}{2}\right)\right) \\ &= \prod_{i=1}^{N} \int_{\mathbb{R}} dp_i \exp\left(-\beta \frac{p_i^2}{2}\right) \\ &= \left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^{\frac{N}{2}}, \end{aligned} \tag{2.7}$$

onde usamos a identidade $\int_{\mathbb{R}} dx \exp(-ax^2) = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$, e $Z_V(\beta, N)$ é a contribuição do potencial:

$$Z_V(\beta, N) = \int_{\Gamma} \prod_{i=1}^{N} dq_i \exp(-\beta V(\mathbf{q})), \tag{2.8}$$

com

$$V(\mathbf{q}) \;=\; \frac{1}{2N}\sum_{i,j=1}^{N}(1-\cos(q_i-q_j)) \;=\; \frac{N}{2}(1-\mathbf{M}^2). \tag{2.9}$$

Observe que:

$$Z_V(\beta,N) \;=\; \int_\Gamma \prod_{i=1}^{N} dq_i \exp(-\beta V(\mathbf{q})) \tag{2.10}$$

$$\;=\; \exp\left(-\beta\frac{N}{2}\right)\int_\Gamma \prod_{i=1}^{N} dq_i \exp\left(\frac{\beta}{2N}\sum_{i=1}^{N}\mathbf{m}_i^2\right). \tag{2.11}$$

Utilizando a transformação de Hubbard-Stratonovich para $\mu > 0$,

$$\exp\left(\frac{\mu}{2}x^2\right) \;=\; \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dz_1 dz_2 \exp\left(-(z_1^2+z_2^2)+\sqrt{2\mu}\; x\cdot\mathbf{z}\right), \quad \mathbf{z}=(z_1,z_2)\in\mathbb{R}^2$$

temos que:

$$Z_V(\beta,N) \;=\; \frac{1}{\pi}\exp\left(-\beta\frac{N}{2}\right)\int_\Gamma\prod_{i=1}^{N}dq_i \times \tag{2.12}$$

$$\times\;\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dz_1dz_2\exp(-(z_1^2+z_2^2))\exp\left(\sqrt{2\mu}\sum_{i=1}^{N}\mathbf{m}_i\cdot\mathbf{z}\right)$$

$$\;=\; \frac{1}{\pi}\exp\left(-\beta\frac{N}{2}\right)\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dz_1dz_2\exp(-(z_1^2+z_2^2))\times$$

$$\times\;\int_\Gamma\prod_{i=1}^{N}dq_i\exp\left(\sqrt{2\mu}\sum_{i=1}^{N}\mathbf{m}_i\cdot\mathbf{z}\right)$$

$$\;=\; \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dz_1dz_2\exp\left(-z^2+N\ln(2\pi I_0(\sqrt{2\mu}z))-\beta\frac{N}{2}\right)$$

$$\;=\; \frac{1}{\pi}\frac{N}{2\beta}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dz_1dz_2\exp\left(-N\left(\frac{z^2}{2\beta}-\ln(2\pi I_0(z))+\frac{\beta}{2}\right)\right)$$

$$\;=\; \frac{1}{\pi}\frac{N}{2\beta}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dz_1dz_2\exp\left(-N\psi(z,\beta)\right) \tag{2.13}$$

com $z=||\mathbf{z}||$, I_n a função modificada de Bessel de ordem n e

$$\psi(z,\beta) \;=\; \frac{z^2}{2\beta}-\ln(2\pi I_0(z))+\frac{\beta}{2}. \tag{2.14}$$

Observe que usamos a identidade:

$$I_0(\sqrt{a^2+b^2}) \;=\; \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} d\theta\exp\left(a\cos(\theta)+b\sin(\theta)\right) \tag{2.15}$$

na terceira igualdade e fazemos a mudança de escala $z\to z\sqrt{N/2\beta}$ na quarta.

A energia livre é definida por:

$$F(z,\beta) \;=\; -\lim_{N\to\infty}\frac{1}{\beta N}\ln Z(\beta,N), \tag{2.16}$$

com $Z(\beta, N)$ dado em (2.5).

Pelo método do ponto de sela:

$$\begin{aligned} F(z,\beta) &= -\frac{1}{2\beta}\ln\left(\frac{2\pi}{\beta}\right) + \frac{1}{2} + \frac{1}{\beta}\left[\frac{z^2}{2\beta} - \ln(2\pi I_0(z))\right] \\ &= -\frac{1}{2\beta}\ln\left(\frac{2\pi}{\beta}\right) + \frac{1}{\beta}\psi(z,\beta), \end{aligned} \tag{2.17}$$

com z satisfazendo a equação auto-consistente, $\partial_z\psi(z,\beta) = 0$, ou seja:

$$\frac{z}{\beta} = \frac{I_1(z)}{I_0(z)} = \mathbf{M}(z,\beta). \tag{2.18}$$

A energia total por partícula, $\mathbf{U}(z,\beta) = \partial_\beta(\beta F(z,\beta))$, é dada por:

$$\mathbf{U}(z,\beta) = \frac{1}{2\beta} + \frac{1}{2}\left(1 - \mathbf{M}^2(z,\beta)\right). \tag{2.19}$$

A equação (2.18) admite solução nula, $z = 0$, correspondente a magnetização nula para $\beta < 2$ e uma solução não-nula $z = z(\beta)$ para $\beta > 2$. Em $\beta = 2$, isto é, $T_c = \frac{1}{2}$ e $\mathbf{U}_c = \frac{3}{4}$, temos duas soluções simétricas e uma descontinuidade em $\partial_\beta^2 F$ indicando uma transição de fase de segunda ordem [22], como indicado na figura 1.

2.2.2 Abordagem Geométrica

O comportamento caótico em sistemas dinâmicos é caracterizado pela sensibilidade que o sistema apresenta às condições iniciais, ou seja, dadas duas trajetórias com condições iniciais suficientemente próximas, elas distanciam-se exponencialmente, não sendo possível prever o comportamento do sistema.

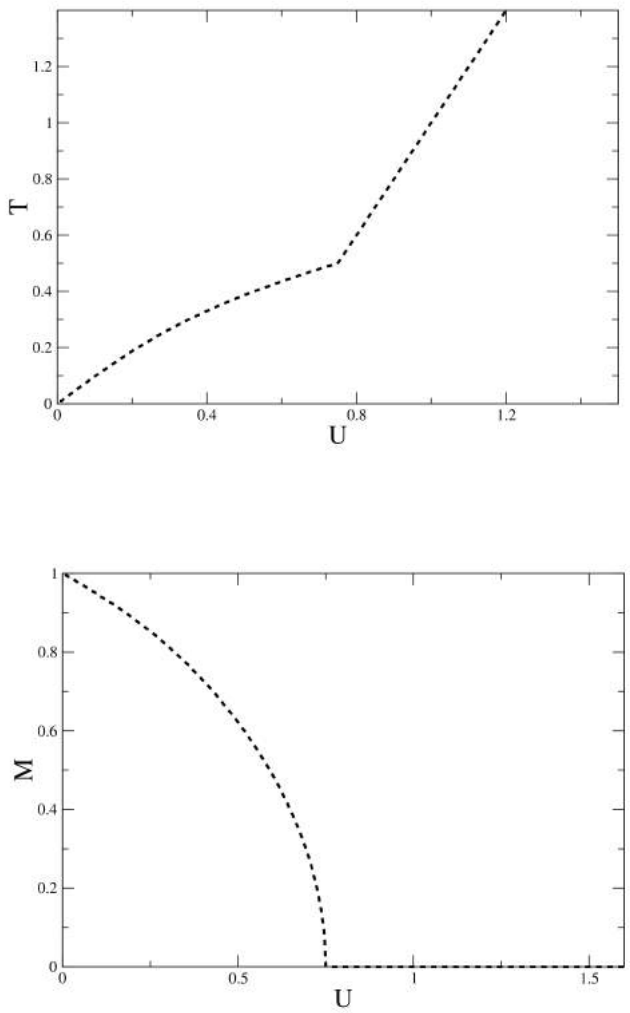
Uma ferramenta utilizada para quantificar a taxa exponencial de crescimento ou decaimento das trajetórias, e consequentemente obtermos uma medida do grau de caoticidade do sistema, é o expoente de Lyapunov cuja noção intuitiva veremos a seguir. A definição precisa decorre do Teorema Multiplicativo de Oseledets e detalhes podem ser vistos em [43], [24].

Seja M um espaço de fase N-dimensional e consideremos um sistema dinâmico cujas trajetórias são soluções do seguinte sistema de equações diferenciais:

$$\dot{x}(t) = F(x(t)), \tag{2.20}$$

com $F(t) = (f_1(t), ..., f_N(t))$ e $x(t) = (x_1(t), ..., x_N(t))$ a trajetória referência com condição inicial $x(0) = x_0$. Considere agora, $y(t)$ uma outra trajetória do sistema com condição inicial $y_0 = w_0$, onde $w_0 = (x_1(0) + \epsilon, ..., x_N(0) + \epsilon)$ e $\epsilon > 0$.

Figura 1 – Modelo XY de campo médio. Descrição canônica: Temperatura **T** e norma da magnetização **M** em função da energia por partícula **U**, respectivamente.



Fonte: [28]

Definimos o vetor:

$$\xi(t) = y(t) - x(t), \tag{2.21}$$

que descreve a evolução de duas trajetórias no espaço de fase. Uma vez que a pertubação ϵ de $y(t)$ é suficientemente pequena, inserindo (2.21) em (2.20) e expandindo em séries de potência obtemos as equações linearizadas do sistema:

$$\dot{\xi}_1(t) = \sum_{j=1}^{N} \left(\frac{\partial F_1}{\partial x_j}\right)_{x(t)} \xi_j(t) \tag{2.22}$$

$$\vdots = \vdots \tag{2.23}$$

$$\dot{\xi}_N(t) = \sum_{j=1}^{N} \left(\frac{\partial F_N}{\partial x_j}\right)_{x(t)} \xi_j(t) \tag{2.24}$$

que são chamadas de *equações da dinâmica tangente*.

A norma de $\xi(t)$ conforme definição (2.21) mede a distância entre duas trajetórias como uma função de t.

O *expoente de Lyapunov*, λ, é definido como uma estimativa da taxa de convergência ou divergência entre as trajetórias:

$$\lambda = \lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} \log \frac{|\xi(t)|}{|\xi(0)|}. \tag{2.25}$$

O limite em (2.25) é assegurado pelo teorema de Oseledets, assim como a possibilidade de λ assumir um único valor entre $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq ... \geq \lambda_N$ (espectro de Lyapunov).

No caso em que o maior expoente de Lyapunov, λ_1, é positivo, as trajetórias são instáveis e $\xi(t)$ cresce exponencialmente com $t \to \infty$, caracterizando um regime caótico.

O que ocorre em termos práticos é que para muitos sistemas de interesse físico com muitos graus de liberdade são poucos os casos em que é possível calcular analiticamente o expoente de Lyapunov.

A abordagem geométrica da dinâmica hamiltoniana descrita em [44], [16], [17] e [45], nos possibilita obtermos uma estimativa analítica para o maior expoente de Lyapunov em sistemas hamiltonianos com muitos graus de liberdade.

Sucintamente, tal abordagem consiste em formularmos a dinâmica hamiltoniana em termos da geometria Riemanniana, ou seja, em identificarmos as trajetórias, ξ_i, do sistema dinâmico estudado com as geodésicas, γ_i, da variedade Riemanniana, M (ou suas projeções em subespaços determinados), munida com a métrica adequada, ou seja, uma métrica onde é possível obtermos uma equivalência entre o princípio da mínima ação e o comprimento de arco. As métricas escolhidas satisfazendo tal requisito são a métrica de Jacobi, que é uma métrica conforme à métrica Riemanniana, cujo elemento de comprimento de arco é dado por:

$$ds^2 = g_{ij} dq^i dq^j = 4[E - V(\mathbf{q})]^2 \, dt^2, \tag{2.26}$$

e a métrica de Eisenhart, que é uma métrica pseudo-Riemanniana cujas trajetórias do sistema são projeções das geodésicas no espaço de configuração $(M \times \mathbb{R}^2)$, com comprimento de arco [45]:

$$ds^2 = -2V(\mathbf{q})(dq^0)^2 + \delta_{ij} dq^i dq^j + 2dq^0 dq^{N+1}. \tag{2.27}$$

Estabelecida a relação entre geodésicas e as trajetórias naturais do sistema, a análise da estabilidade do fluxo hamiltoniano dar-se-á através do fluxo geodésico, ou seja, da análise da evolução do vetor separação $J_i = J_i(s) = \tilde{q}_i - q_i$, que satisfaz a equação de Jacobi:

$$\frac{D^2 J_i}{ds^2} + R^i_{jkl} \left(\frac{dq_j}{ds} \frac{dq_l}{ds} \right) J_k = 0, \tag{2.28}$$

onde $\tilde{q}_i$ e q_i são geodésicas suficientemente próximas, $\frac{D}{ds}$ é a derivada covariante da geodésica $q(s)$ e R^i_{jkl} são os componentes do tensor curvatura. A equação (2.28) depende unicamente da curvatura da variedade que por sua vez depende da métrica.

Via métrica de Eisenhart, os elementos do tensor curvatura, a curvatura de Ricci e a curvatura escalar são relativamente simples, correspondendo respectivamente a:

$$R_{0i0j} = \partial_i \partial_j V, \tag{2.29}$$

$$K_R = R_{00} \frac{dq_0}{dt} \frac{dq_0}{dt} = \Delta V, \tag{2.30}$$

$$\mathcal{R} = 0. \tag{2.31}$$

Logo, a equação de Jacobi é dada por:

$$\frac{D^2 J_i}{dt^2} + \frac{\partial^2 V}{\partial q_i \partial q_k} J_k = 0, \tag{2.32}$$

que é equivalente a equação da dinâmica tangente, (2.24), fazendo $J = \xi$.

No caso em que a variedade é isotrópica, a equação (2.32) é da forma:

$$\frac{D^2 J_i}{dt^2} + K J_i = 0, \tag{2.33}$$

onde K é a curvatura seccional constante da variedade. A solução da equação acima com condições iniciais dada por $J(0) = 0$ e $\frac{dJ(0)}{ds} = \omega(0)$ é dada por:

$$J(s) = \begin{cases} s\omega(s), & \text{se} \quad K = 0 \\ \frac{\omega(s)}{\sqrt{K}s} \sin(\sqrt{K}s), & \text{se} \quad K > 0 \\ \frac{\omega(s)}{\sqrt{-K}s} \sinh(\sqrt{-K}s), & \text{se} \quad K < 0 \end{cases} \tag{2.34}$$

Observe que para $K < 0$ as soluções são exponencialmente instáveis. Portanto, no caso de variedades isotrópicas com curvatura seccional negativa o sistema apresenta sensibilidade às condições iniciais.

No caso $dim\ M = 2$, ou seja, M é uma superfície e a equação de Jacobi é da forma:

$$\frac{D^2 J}{dt^2} + K(s) J = 0, \tag{2.35}$$

com $K(s) = \frac{1}{2}\mathcal{R}(s)$, onde $\mathcal{R}(s)$ é a curvatura escalar da variedade no ponto $p \in \gamma(s)$.

As soluções de (2.35) podem induzir crescimento exponencial no caso em que a curvatura possui valores negativos ou, ainda que positiva em todos os pontos da variedades ou exclusivamente em alguns pontos, varia de modo a produzir um mecanismo de *instabilidade paramétrica*, mecanismo advindo das flutuações da curvatura ao longo da geodésica, tornando-a instável. [17]

No caso geral, para sistemas com muitos graus de liberdade, torna-se bastante complicado obter a solução explícita da equação (2.28) e algumas hipóteses geométricas e

estatísticas são supostas com o intuito de simplificar a equação e torná-la independente da dinâmica, ou seja, independente da geodésica escolhida.

Hipóteses geométricas

1. Suponhamos que a variedade é quasi-isotrópica, ou seja, o tensor curvatura e o tensor de Ricci, respectivamente, são aproximados por:

$$R_{ijkl} \approx K(s)(g_{ik}g_{jl} - g_{il}g_{jk}) \tag{2.36}$$

$$R_{ij} \approx K(s)g_{ik}. \tag{2.37}$$

onde $K(s)$ é a curvatura seccional efetiva da variedade.

Com essas aproximações, a equação de Jacobi é da forma:

$$\frac{d^2J_j}{ds^2} + k_R(s)J_j + \delta K(s)J_j = 0 \tag{2.38}$$

com $\delta K(s) = K(s) - \overline{K}$ o desvio do valor médio da curvatura seccional $\overline{K}$ que mede a flutuação da curvatura seccional devido ao desvio local de isotropia e k_R é definida por [13]:

$$k_R = \frac{K_R}{N-1}, \tag{2.39}$$

onde K_R é definido em (2.30).

2. A variação local da curvatura de Ricci mede a variação local da curvatura seccional, isto é,

$$\delta K(s) = \delta K_R(s). \tag{2.40}$$

Deste modo, obtemos a equação efetiva da instabilidade dinâmica:

$$\frac{d^2J}{ds^2} + k_R(s)J + \frac{K_R(s) - \langle K_R\rangle}{\sqrt{N-1}} = 0 \tag{2.41}$$

com $\langle K_R\rangle$ a média da curvatura de Ricci.

Hipóteses estatísticas

3. $\delta K_R(s)$ é um processo estocástico Gaussiano.

Disto, juntamente com as hipóteses anteriores obtemos uma aproximação $\delta K_R(s)$:

$$\delta K_R(s) \approx \frac{1}{\sqrt{N-1}}\langle \delta^2 K_R\rangle_s^{\frac{1}{2}}\eta(s), \tag{2.42}$$

onde $\eta(s)$ é o processo Gaussiano com medida zero e variância unitária e $\langle . \rangle_s$ é a medida temporal ao longo da geodésica.

4. Hipótese de ergodicidade

Consequentemente, substituímos $\langle . \rangle_s$ por $\langle . \rangle_\mu$, com μ uma medida invariante, a saber a medida microcanônica.

Portanto, a equação (2.41) é do tipo oscilador estocástico:

$$\frac{d^2\psi}{ds^2} + \Omega(s)\psi \;=\; 0, \tag{2.43}$$

com $\Omega(s) = \langle k_R \rangle_\mu + \frac{1}{\sqrt{N}} \langle \delta^2 K_R \rangle_\mu^{\frac{1}{2}} \cdot \eta(s)$ e ψ representa alguma componente de J, cuja solução é determinada e uma expressão analítica para o maior expoente de Lyapunov é dada por:

$$\lambda(\kappa_0, \sigma_\kappa, \tau) \;=\; \frac{1}{2}\left(\Lambda - \frac{4\kappa_0}{3\Lambda}\right), \tag{2.44}$$

onde

$$\Lambda \;=\; \sigma_\kappa^2 \tau + \left(\sqrt{\left(\frac{4\kappa_0}{3}\right)^3 + \sigma_\kappa^4 \tau^2}\right)^{\frac{1}{3}}. \tag{2.45}$$

Vale salientar que a teoria ainda não constitui uma teoria geral uma vez que, enquanto para alguns modelos como o FPU e o Bishop-Peyrard [6], a comparação entre resultados numéricos e analíticos é satisfatória, para outros como o modelo XY 1-D, 2-D/3-D [15], [13], há necessidade de hipóteses adicionais e para o modelo φ^4 [12] os resultados são menos satisfatórios. Diante disso, investigações vêm sendo feitas na tentativa de justificar tais ocorrências.

Em [18], um teste numérico das hipóteses geométricas e estatísticas é realizado em modelos cujas estimativas analíticas para o maior expoente de Lyapunov já são determinadas e observa-se que a topologia da variedade é um fator determinante para a não generalização da teoria. O fato é que a hipótese geométrica de quasi-isotropia leva a bons resultados apenas em casos particulares.

Na próxima seção apresentaremos os resultados analíticos obtidos para o modelo hamiltoniano de campo médio com $h = 0$ e no próximo capítulo, iremos estender a análise para o caso $h \neq 0$ e demonstrar que a dinâmica do modelo é bem descrita qualitativamente por essa abordagem, embora haja discrepância com resultados numéricos para campos relativamente altos ("forte quebra"da invariância de rotação no espaço de spin), possivelmente associada à hipótese de quasi-isotropia.

2.2.3 Estimativa analítica para o expoente de Lyapunov

Inicialmente determinaremos a média microcanônica da curvatura de Ricci, $\kappa_0 = \langle k_R \rangle_\mu$, e de sua flutuação, $\sigma_\kappa = \langle \delta^2 k_R \rangle_\mu$. Para calcularmos a média da curvatura utilizaremos

o fato de que no limite termodinâmico a média de um observável nos ensembles canônico e microcânonico coincidem, ou seja, $\langle . \rangle_\mu = \langle . \rangle_c$, e disto calcularemos a média via ensemble canônico por ser de fácil manipulação. Para calcularmos a flutuação, utilizaremos a expressão decorrente de Lebowitz-Percus-Velet [36], que não é válida no ponto crítico:

$$\langle \delta^2 k_R \rangle_\mu(\beta) \;=\; \langle \delta^2 K_R \rangle_c + \left(\frac{\partial \langle \mathbf{U} \rangle_c}{\partial \beta} \right)^{-1} \left[\frac{\partial \langle K_R \rangle_c}{\partial \beta} \right]^2 . \tag{2.46}$$

Como vimos anteriormente, com a métrica de Eisenhart, k_R é dada por:

$$k_R \;=\; \frac{K_R}{N-1}, \tag{2.47}$$

onde $K_R = \Delta V$ é o laplaciano do potencial V, (2.9), dado por:

$$\Delta V \;=\; \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \cos(q_i - q_j) \;=\; N - 2V(\mathbf{q}). \tag{2.48}$$

Portanto:

$$k_R \;=\; 1 - \frac{2}{N-1} V(\mathbf{q}). \tag{2.49}$$

Usando as relações canônicas, [28]:

$$\langle V(\mathbf{q}) \rangle_c \;=\; -\partial_\beta \ln(Z_V) \tag{2.50}$$

$$\langle (V(\mathbf{q}) - \langle V(\mathbf{q}) \rangle)^2 \rangle_c \;=\; \partial_\beta^2 \ln(Z_V), \tag{2.51}$$

obtemos:

$$\langle k_R \rangle_c \;=\; 1 + \frac{2}{N} \partial_\beta \ln(Z_V) \tag{2.52}$$

e

$$\langle \delta^2 K_R \rangle_c \;=\; \frac{4}{N} \partial_\beta^2 \ln(Z_V). \tag{2.53}$$

Para procedermos com o cálculo de $\langle k_R \rangle_\mu$ e $\langle \delta^2 K_R \rangle_\mu$, considere dois casos: o caso subcrítico $U < U_c$ e o supercrítico $U > U_c$.

- $U < U_c$
  Para $U < U_c$, o método do ponto de sela no limite termodinâmico nos fornece a seguinte estimativa:

  $$Z_V(\beta, N) \;\approx\; (2\pi)^N \, \frac{N \overline{z}}{\beta c} \exp\left(-N \psi(\overline{z}, \beta)\right) \sqrt{2\pi} \left(N \left| \partial_\beta^2 \left(\psi(\overline{z}, \beta) \right) \right| \right)^{-\frac{1}{2}}$$

  que resulta em:

  $$\frac{1}{N} \partial_\beta \ln(Z_V(\beta, N)) \;\approx\; -\partial_\beta \psi(\overline{z}, \beta). \tag{2.54}$$

Pela aproximação acima, e uma vez que $\langle k_R\rangle_c$ e $\langle k_R\rangle_\mu$ coincidem no limite termodinâmico, (2.52) é da forma:

$$\begin{aligned}\langle k_R\rangle_\mu &= 1+\frac{2}{N}\partial_\beta \ln(Z_V)\\ &\approx 1-2\partial_\beta\psi(\overline{z},\beta)\\ &= 1-2\left(\frac{1}{2}-\frac{\overline{z}^2}{2\beta^2}\right)\\ &= \mathbf{M}^2(\overline{z},\beta)\end{aligned} \tag{2.55}$$

A flutuação de k_R será determinada de acordo com (2.46).

Calculando $\partial_\beta\langle \mathbf{U}\rangle_c$:

$$\partial_\beta\langle \mathbf{U}\rangle_c = \frac{-2-\beta^2\langle\delta^2 K_R\rangle_c}{4\beta^2}. \tag{2.56}$$

Derivando a expressão (2.52) em relação a β e substituindo a expressão (2.53) na mesma, obtemos a seguinte relação:

$$\partial_\beta\langle k_R\rangle_c = \frac{1}{2}\langle\delta^2 K_R\rangle_c. \tag{2.57}$$

Portanto:

$$\begin{aligned}\langle\delta^2 k_R\rangle_\mu &= \langle\delta^2 K_R\rangle_c+\frac{4\beta^2}{-2-\beta^2\langle\delta^2 K_R\rangle_c}\cdot\frac{1}{4}\langle\delta^2 K_R\rangle_c\\ &= \langle\delta^2 K_R\rangle_c\left(1+\frac{\beta^2\langle\delta^2 K_R\rangle_c}{-2-\beta^2\langle\delta^2 K_R\rangle_c}\right)\\ &= \langle\delta^2 K_R\rangle_c\left(1+\frac{\beta^2}{2}\langle\delta^2 K_R\rangle_c\right)^{-1},\end{aligned} \tag{2.58}$$

onde:

$$\langle\delta^2 K_R\rangle_c = \frac{4}{N}\partial_\beta^2\ln(Z_V) \approx \frac{4\overline{z}}{\beta^2}\left(\partial_\beta\overline{z}-\frac{\overline{z}}{\beta}\right). \tag{2.59}$$

- $\mathbf{U} > \mathbf{U}_c$

Acima da energia crítica U_c, obtemos:

$$Z_V(\beta,N) \approx (2\pi)^N\exp(-N\beta/2)\left(1-\frac{\beta}{2}\right)^{-1}. \tag{2.60}$$

Uma vez que $\mathbf{M}^2$ é de ordem $O(N^{-1})$, consideremos a expressão:

$$k_R = \mathbf{M}^2-\frac{1}{N}+O(N^{-2}), \tag{2.61}$$

obtida pela expansão até segunda ordem de (2.47) e usando a relação (2.9).

Disto:

$$\langle k_R \rangle_\mu = \frac{\beta}{N(2-\beta)} + O(N^{-2}), \tag{2.62}$$

e analogamente:

$$\langle \delta^2 K_R \rangle_c = \frac{4}{N}\partial_\beta^2 \ln(Z_V) = \frac{4}{N}(2-\beta)^{-2} = O(N^{-1}), \tag{2.63}$$

ou seja, $\langle k_R \rangle_\mu$ e $\langle \delta^2 K_R \rangle_c$ são zero no limite $N \to \infty$.

Uma vez que o segundo termo de (2.46) é de ordem $O(N^{-2})$, podemos desconsiderá-lo. Assim:

$$\langle \delta^2 K_R \rangle_\mu \approx \frac{4}{N}(2-\beta)^{-2} = O(N^{-1}) \tag{2.64}$$

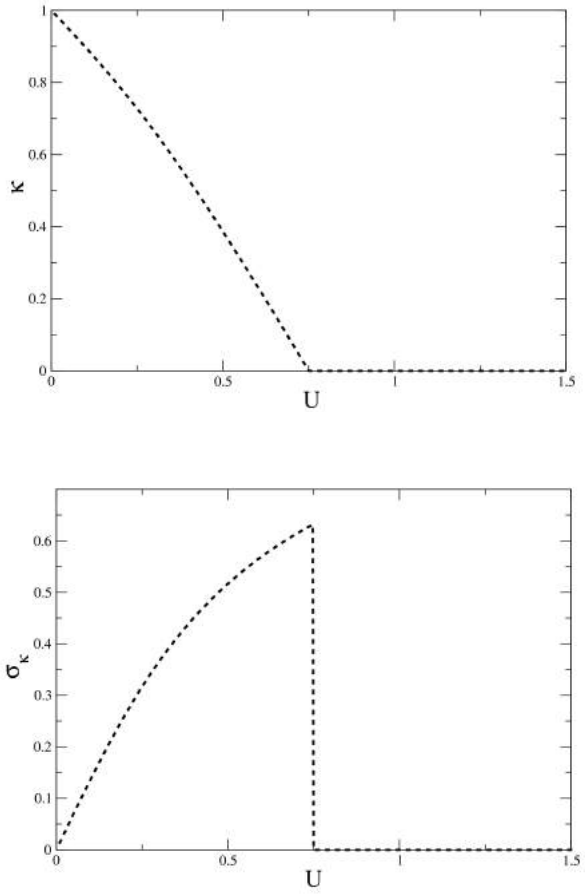
Usando as quantidades geométricas obtidas na expressão (2.44):

$$\lambda_1 \approx \frac{4^{1/3}\sqrt{\beta}}{(2-\beta)^{3/2}} N^{-1/3}, \tag{2.65}$$

que corresponde à lei de escala em função do número de partículas que está em total concordância com os resultados numéricos apresentados em [33], [54].

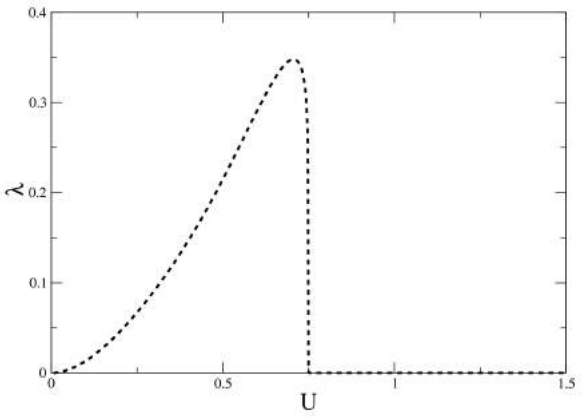
Na figura 2, apresentamos os resultados para a curvatura de Ricci, κ_0, e de sua flutuação, σ_κ, como função da energia por partícula, $\mathbf{U}$. Em adição, na figura 3 temos o expoente de Lyapunov que é sensível às condições iniciais na região $0 < \mathbf{U} < \mathbf{U}_c$, onde o mesmo é positivo. Em $\mathbf{U}_c = \frac{3}{4}$, possui um máximo e cai a zero na região $\mathbf{U} > \mathbf{U}_c$ de acordo com a lei de escala em função do número de partículas N, $\lambda_1 \approx N^{-1/3}$ que tende a zero quando $N \to \infty$. Note que, o expoente de Lyapunov é fortemente associado ao comportamento da flutuação da curvatura (figuras 2 e 3), ou a flutuação da energia cinética como ressaltado nas referências [32], [33], [34], [35].

Figura 2 – Modelo XY de campo médio: Curvatura de Ricci, κ_0, e sua flutuação, σ_κ, em função da energia por partícula **U** para $h = 0$.



Fonte: [45].

Figura 3 – Maior expoente de Lyapunov como função da energia por partícula **U** calculado via estimativa analítica (2.44) para $h = 0$



Fonte: [28].

3 DINÂMICA PARA O MODELO XY COM CAMPO MAGNÉTICO

3.1 Solução de equilíbrio e observáveis termodinâmicos

Consideremos o Hamiltoniano do modelo XY, conforme descrito em (2.1):

$$H(\mathbf{p},\mathbf{q}) \;=\; \sum_{i=1}^{N}\frac{p_i^2}{2}+\frac{c}{2N}\sum_{i,j=1}^{N}(1-\cos(q_i-q_j))-h\sum_{i=1}^{N}\cos(q_i) \tag{3.1}$$

Em analogia ao caso $h=0$, a solução no ensemble canônico é determinada pela função de partição:

$$Z(\beta,h,N) \;=\; \int_{\mathbb{R}}\int_{\Gamma}\prod_{i=1}^{N}dp_i dq_i\exp(-\beta H), \tag{3.2}$$

com $\beta=\frac{1}{T}$ ($k_B=1$) e Γ o espaço de configurações com coordenada $\mathbf{q}$, que pode ser escrita da forma:

$$Z(\beta,h,N) \;=\; \left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^{\frac{N}{2}}Z_V(\beta,h,N), \tag{3.3}$$

onde o primeiro fator é a contribuição do termo cinético para o espaço de fase, e de modo análogo a (2.7), é dado por:

$$Z_K(\beta,h,N) \;=\; \int_{\mathbb{R}}\prod_{i=1}^{N}dp_i\exp\left(-\beta\sum_{i=1}^{N}\frac{p_i^2}{2}\right) \;=\; \left(\frac{2\pi}{\beta}\right)^{\frac{N}{2}}, \tag{3.4}$$

e $Z_V(\beta,h,N)$ é a contribuição potencial:

$$Z_V(\beta,h,N) \;=\; \int_{\Gamma}\prod_{i=1}^{N}dq_i\exp(-\beta V(\mathbf{q})), \tag{3.5}$$

com

$$V(\mathbf{q}) \;=\; \frac{1}{2N}\sum_{i,j=1}^{N}(1-\cos(q_i-q_j))-h\sum_{i=1}^{N}\cos q_i \;=\; \frac{N}{2}(1-\mathbf{M}^2)-hN\mathbf{M}_x. \tag{3.6}$$

No que segue, consideremos a magnetização paralela ao campo magnético h, ou seja, $\mathbf{M}_y=0$ e $\mathbf{M}_x=\mathbf{M}$. De fato, como verificado numericamente em [4] e ilustrado na figura 10, os valores de $\mathbf{M}_y$ flutuam em torno de zero e vale salientar que, dada a simetria de rotação do sistema, esse fato é independente do valor do campo, $h\neq 0$. Além disso, essa flutuação decresce de acordo com o número de partículas N, conforme será ilustrado adiante. Portanto, no limite termodinâmico, podemos tomar $\mathbf{M}_x=\mathbf{M}$, conforme à figura 11.

Retornando ao cálculo exato da função de partição, utilizamos a transformação de Hubbard-Stratonovich e reescalamos a nova variável $\mathbf{z} \to \mathbf{z}\sqrt{\frac{N}{2\beta}}$:

$$Z_V(\beta, h, N) = \frac{1}{\pi}\frac{N}{2\beta}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} dz_1 dz_2 \exp\left(-N\psi(z, \beta, h)\right) \tag{3.7}$$

com

$$\psi(z, \beta, h) = \frac{z^2}{2\beta} - \ln(2\pi I_0(z + \beta h)) + \frac{\beta}{2}, \tag{3.8}$$

z é o módulo do vetor $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^2$ e I_0 função modificada de Bessel de ordem zero.

A energia livre é definida por:

$$F(z, \beta, h) = -\lim_{N\to\infty}\frac{1}{\beta N}\ln Z(\beta, h, N) \tag{3.9}$$

onde $Z(\beta, h, N)$ dada em (3.3).

Pelo método do ponto de sela [26]:

$$F(z, \beta, h) = -\frac{1}{2\beta}\ln\left(\frac{2\pi}{\beta}\right) + \frac{1}{2} + \frac{1}{\beta}\left[\frac{z^2}{2\beta} - \ln(2\pi I_0(z + \beta h))\right], \tag{3.10}$$

com z satisfazendo a equação auto-consistente $\frac{\partial F}{\partial z} = 0$:

$$\frac{z}{\beta} = \frac{I_1(z + \beta h)}{I_0(z + \beta h)} = \mathbf{M}(z, \beta, h). \tag{3.11}$$

Para $0 \leq h < 1$, a equação (3.11) possui três conjuntos de soluções conforme apresentado em [48]. O primeiro conjunto corresponderam às soluções estáveis; o segundo, às soluções metaestáveis que têm início em $T = 0$ com $M = \pm 1$ e existem até um determinado $T = T_{max}$ e o terceiro são as soluções instáveis que têm início em $T = 0$ com $M = -h$ e encontram as soluções metaestáveis em T_{max}. Para $|h| < 1$ apenas soluções estáveis existem.

A energia total por partícula, $\mathbf{U}(z, \beta, h)$, definida por $\mathbf{U}(z, \beta, h) = \partial_\beta(\beta F(z, \beta, h)$ é dada por:

$$\mathbf{U}(z, \beta, h) = \frac{1}{2\beta} + \frac{1}{2}\left(1 - \mathbf{M}^2(z, \beta, h)\right) - h\mathbf{M}(z, \beta, h). \tag{3.12}$$

Os pontos críticos não-degenerados de $\mathbf{U}$ no contexto da teoria de Morse são dados por $q_i = 0$ ou $q_i = \pi$, correspondentes a $\mathbf{M} = 1$ ou $\mathbf{M} = -1$, respectivamente. A função de energia $\mathbf{U}$ também admite ponto crítico degenerado correspondente a $\mathbf{M} = -h$ [48].

Para as soluções estáveis a temperatura possui valores no intervalo:

$$T_{min} < T < +\infty, \tag{3.13}$$

onde $T_{min} \geq 0$ ($T_{min} = 0$ no limite $T \to 0$). Disto, para campos $h > 0$ ($h < 0$) para um $T_{min} > 0$ fixado, a energia $\mathbf{U}$, (3.12), possui um valor mínimo dado por:

$$\mathbf{U}_{min} \;\; = \;\; -\,|h| + \frac{T_{min}}{2} \tag{3.14}$$

nos pontos críticos $\mathbf{M} = 1$ ($\mathbf{M} = -1$).

Para as soluções metaestáveis e instáveis os valores de temperatura são limitados ao intervalo:

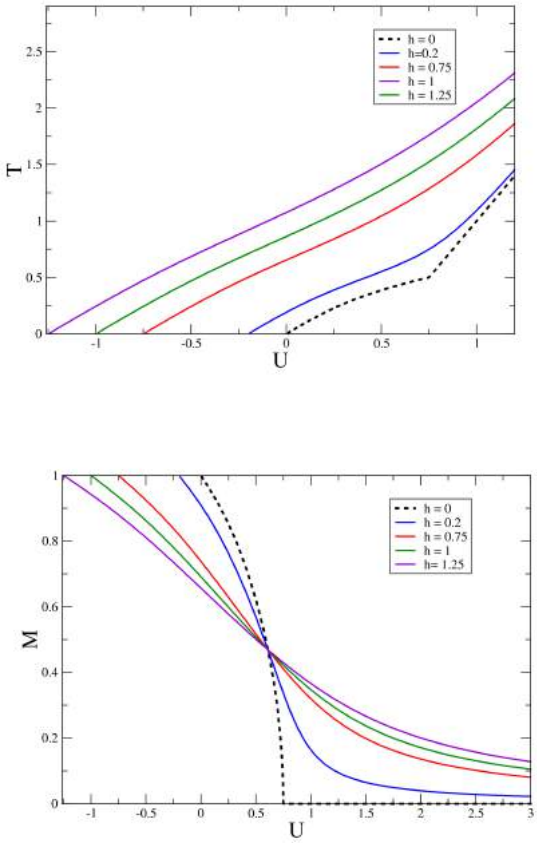
$$0 \;\; \leq \;\; T \;\; < \;\; T_{máx}, \tag{3.15}$$

e consequentemente a função energia também é limitada a valores no intervalo:

$$h \;<\; \mathbf{U}_{min} \;<\; \frac{1}{2} + \frac{h^2}{2} + \frac{T_{min}}{2} \tag{3.16}$$

Na figura 4, apresentamos a magnetização e a temperatura, respectivamente, como função da energia por partícula $\mathbf{U}$, resultados obtidos através das equações (3.11), (3.12). Observe a mudança qualitativa provocada pela presença do campo, onde a singularidade em $\mathbf{U} = \mathbf{U}_c$ é eliminada. Em particular, a magnetização $\mathbf{M}$ é não nula para $\mathbf{U} > \mathbf{U}_c$.

Figura 4 – Modelo XY de campo médio na presença do campo. Temperatura **T** e norma da Magnetização **M** como função da energia por partícula **U**, calculada analiticamente pelo método do ponto de sela.



Fonte: os autores (obtida com os softwares Maple e Xmgrace).

3.1.1 Estimativa analítica para o expoente de Lyapunov

A fim de calcularmos o expoente de Lyapunov, seguiremos a mesma rota proposta no capítulo 2. Isto posto, calculemos a média e a flutuação da curvatura.

Pela definição (2.47), k_R é dada por:

$$k_R = \frac{K_R}{N-1} \tag{3.17}$$

onde a curvatura de Ricci $K_R = \Delta V$, isto é, o laplaciano do potencial, V, (3.6), agora dado por:

$$\Delta V = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N}\cos(q_i - q_j) - \frac{h}{N}\sum_{i=1}^{N}\cos(q_i) \tag{3.18}$$

$$= N - 2V(\mathbf{q}) - h\sum_{i=1}^{N}\cos(q_i). \tag{3.19}$$

Disto:

$$k_R = 1 - \frac{2}{N-1}V(\mathbf{q}) - h\mathbf{M}. \tag{3.20}$$

Tomando a média canônica em (3.20):

$$\langle k_R\rangle_c = 1 - \frac{2}{N-1}\langle V(\mathbf{q})\rangle_c - h\langle \mathbf{M}\rangle_c \tag{3.21}$$

Pelas relações canônicas (2.50) e (2.51), obtemos:

$$\langle k_R\rangle_c = c + \frac{2}{N}\partial_\beta \ln(Z_c) - h\langle \mathbf{M}\rangle_c, \tag{3.22}$$

e

$$\langle \delta^2 K_R\rangle_c = \frac{1}{N}\langle (2V(\mathbf{q}) + h\mathbf{M}) - \langle (2V(\mathbf{q}) + h\mathbf{M}\rangle)^2\rangle. \tag{3.23}$$

Note que, por definição:

$$\langle \mathbf{M}\rangle = \frac{1}{Z_c}\int \prod_{i=1}^{N} dp_i dq_i \; \mathbf{M} e^{-\beta(H_0 - hN\mathbf{M})} \tag{3.24}$$

$$= \frac{1}{N\beta}\frac{1}{Z_c}\frac{\partial Z_c}{\partial h} = \frac{1}{N\beta}\frac{\partial \ln Z_c}{\partial h} = -\frac{\partial F}{\partial h} = \mathbf{M}, \tag{3.25}$$

onde F é a energia livre definida em (3.10). Então, as expressões (3.22) e (3.23) podem ser escritas como:

$$\langle k_R\rangle_c = c + \frac{2}{N}\partial_\beta \ln(Z_V) - h\mathbf{M} \tag{3.26}$$

e

$$\langle \delta^2 K_R\rangle_c = \langle (V(\mathbf{q}) - \langle V(\mathbf{q})\rangle)^2\rangle_c = \frac{4}{N}\partial_\beta^2 \ln(Z_c) \tag{3.27}$$

Pelo método do ponto de sela, temos a seguinte aproximação:

$$Z_V(\beta, h, N) \approx (2\pi)^N \frac{N\overline{z}}{\beta c}\exp\left(-N\psi(\overline{z},\beta,h)\right)\sqrt{2\pi}\left(N|\partial_\beta^2\left(\psi(\overline{z},\beta,h)\right)|\right)^{-\frac{1}{2}}. \tag{3.28}$$

Logo,

$$\frac{1}{N}\partial_\beta \ln(Z_V(\beta, N, h)) \approx -\partial_\beta\psi(\overline{z},\beta,h) \tag{3.29}$$

Pela aproximação acima e utilizando a equivalência dos ensembles obtemos uma expressão para a média da curvatura:

$$\begin{aligned}\langle k_R\rangle_\mu &= c + \frac{2}{N}\partial_\beta \ln(Z_V(\beta, N, h)) - h\mathbf{M} \\ &\approx c - 2\partial_\beta\psi(\overline{z},\beta,h) - h\mathbf{M} \\ &= c - 2\left(\frac{c}{2} - \frac{\overline{z}^2}{2\beta^2} - h\frac{I_1(\overline{z}+\beta h)}{I_0(\overline{z}+\beta h)}\right) - h\mathbf{M} \\ &= \mathbf{M}^2(z,\beta,h) + h\mathbf{M}(z,\beta,h),\end{aligned} \tag{3.30}$$

como mostrado na figura 6 para os campos $h = 0$, $h = 0.2$, $h = 0.75$, $h = 1$ e $h = 1.25$. Note que para campo nulo, na presença da transição de fase, temos uma descontinuidade na flutuação da curvatura, enquanto que na presença do campo, temos um máximo local que se torna suave com o aumento do campo.

Agora, determinaremos a flutuação da curvatura conforme definição (2.46).

Inicialmente, é fácil notar que:

$$\begin{aligned} \partial_\beta \langle \mathbf{U} \rangle_c &= -\frac{1}{2\beta^2} - \frac{1}{N}\partial_\beta^2 \ln(Z_V) \\ &= -\frac{1}{2\beta^2} - \frac{1}{4}\langle \delta^2 K_R \rangle_c \end{aligned} \tag{3.31}$$

e pela relação (3.26):

$$\begin{aligned} \partial_\beta \langle k_R \rangle_c &= \frac{2}{N}\partial_\beta^2(\ln(Z_V(\beta, N, h))) - h\partial_\beta \mathbf{M} \\ &= \frac{1}{2}\langle \delta^2 K_R \rangle_c - h\partial_\beta \mathbf{M}. \end{aligned} \tag{3.32}$$

Portanto, a flutuação da curvatura é dada por:

$$\langle \delta^2 k_R \rangle_\mu = \langle \delta^2 K_R \rangle_c + \left(-\frac{1}{2\beta^2} - \frac{1}{4}\langle \delta^2 K_R \rangle_c \right)^{-1} \cdot \left(\frac{1}{4}\langle \delta^2 K_R \rangle_c - h\partial_\beta \mathbf{M} \right)^2, \tag{3.33}$$

onde:

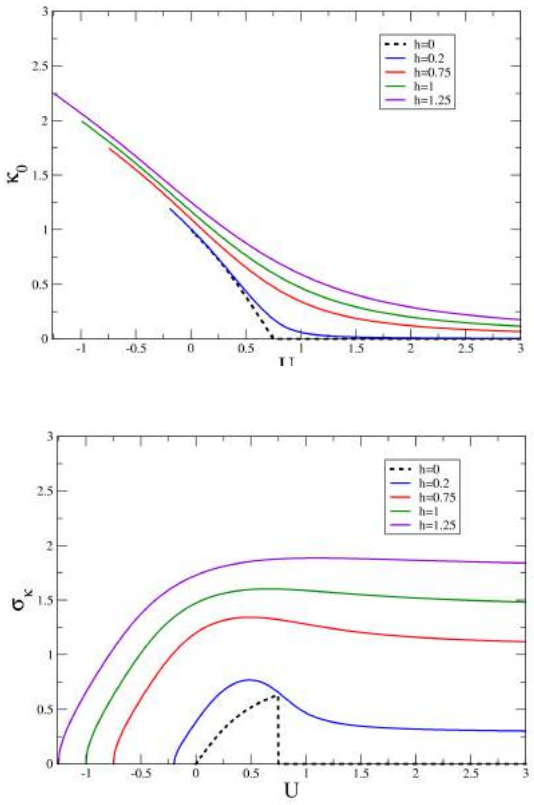
$$\partial_\beta \mathbf{M} = \left(1 - \frac{I_1}{I_0}\frac{1}{\overline{z} + \beta h} - \frac{\overline{z}^2}{\beta^2} \right) \cdot (\partial_\beta \overline{z} + h) \tag{3.34}$$

e

$$\langle \delta^2 K_R \rangle_c = \frac{1}{N}\partial_\beta^2 \ln(Z_c) \approx \frac{4\overline{z}}{\beta}\left(\frac{\partial_\beta \overline{z}}{\beta} - \frac{\overline{z}}{\beta^2} \right) - 4h\left(\frac{\overline{z}^2}{\beta^2} + \frac{\overline{z}}{\beta}\frac{1}{\overline{z} + \beta h} - 1 \right)(\partial_\beta \overline{z} + h).$$

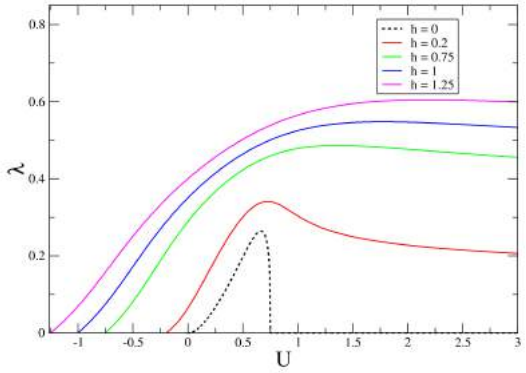
Substituindo as quantidades (3.32) e (3.33) em (2.44) obtemos o maior expoente de Lyapunov. A figura 6 exibe o comportamento da estimativa analítica para o expoente de Lyapunov com $h = 0$, $h = 0.2$, $h = 0.75$, $h = 1$ e $h = 1.25$. Corroborando com o fato reportado para a flutuação da curvatura, o expoente de Lyapunov apresenta uma descontinuidade na transição de fase a campo nulo e um máximo local que se torna suave na presença do campo. Além disso, para qualquer valor do campo ilustrado, o expoente de Lyapunov é positivo, indicando que o sistema é sensível às condições iniciais. Uma interpretação mais aprofundada dos resultados reportados nas figuras 5 e 6 será apresentada na seção 3.4, juntamente com as simulações numéricas.

Figura 5 – Modelo XY de campo médio na presença do campo: Expressão analítica para a média microcanônica da curvatura de Ricci, κ_0, e de sua flutuação, σ_κ, em função da energia para diferentes valores de campo h.



Fonte: os autores (obtida com os softwares Maple e Xmgrace).

Figura 6 – Modelo XY de campo médio na presença do campo. Maior expoente de Lyapunov como função da energia por partícula **U** calculado via estimativa analítica (2.44).

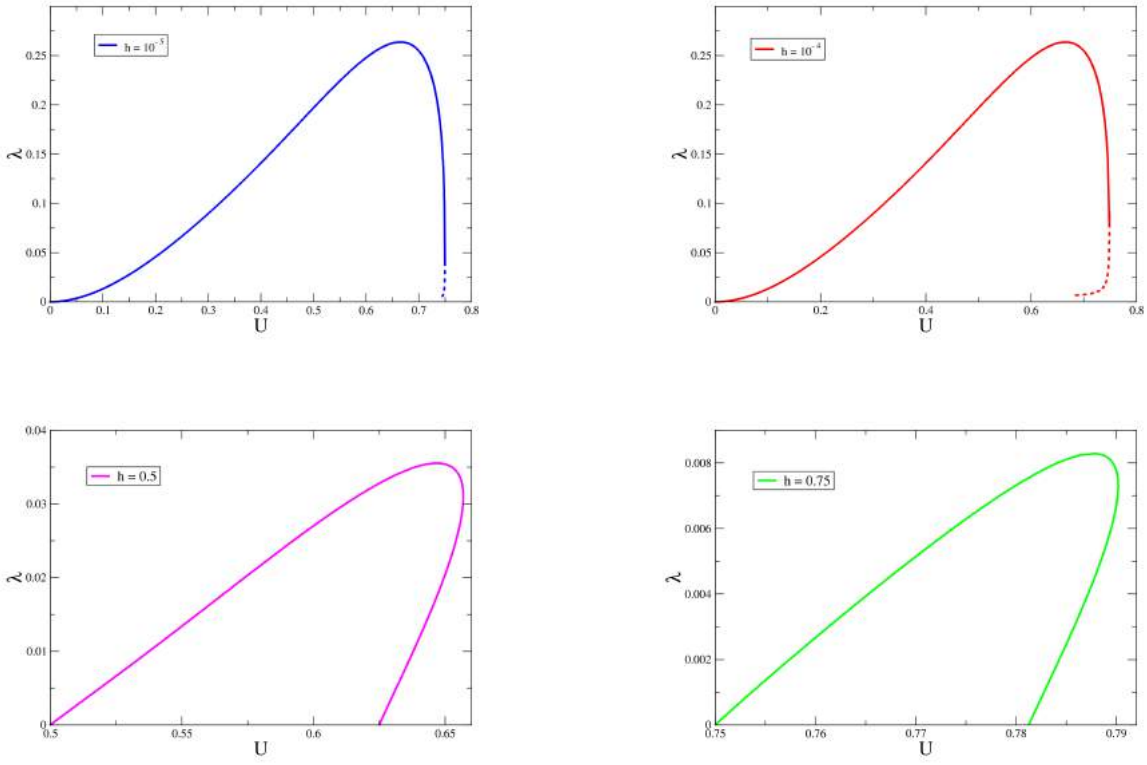


Fonte: os autores (obtida com os softwares Maple e Xmgrace).

3.1.2 Expoente de Lyapunov para os estados metaestáveis

Consideremos agora as soluções metaestáveis da equação auto-consistente (3.11). Com estas soluções o expoente de Lyapunov via expressão analítica (2.44), em função da energia **U** é exibido na figura 7.

Figura 7 – Soluções metaestáveis do modelo XY de campo médio na presença do campo: Expoente de Lyapunov λ como função da energia por partícula **U** calculada analiticamente via expressão (2.25) para vários valores de campo.



Fonte: os autores (obtida com os softwares Maple e Xmgrace).

Na figura 7 apresentamos os resultados do expoente de Lyapunov em função da energia **U** para os estados metaestáveis, onde evidenciamos que a presença do campo afeta de forma dramática seu comportamento na vizinhança da transição de fase a campo nulo, $\mathbf{U} = \mathbf{U}_c$. De fato, na figura 7($a$) observa-se que, mesmo para um campo muito fraco $h = 10^{-5}$, a queda abrupta de λ em $\mathbf{U} = \mathbf{U}_c$ a qual encontrando o eixo **U** de forma ortogonal a campo nulo é eliminada (veja a figura 3), dando lugar ao fenômeno de reentrância (linha pontilhada), que se acentua para campos mais altos (figuras 7(b) e 7(d)).

Esse fenômeno de reetrância é a manifestação dinâmica através do expoente de Lyapunov da ausência de transição de fase (termodinâmica) na presença do campo magnético.

Neste contexto, cabe também registrar fenômeno semelhante que ocorre no comportamento do índice de Morse em função da energia para estados metaestáveis no modelo XY de campo médio sem o termo de energia cinética [48].

3.2 Simulação Numérica

Tendo em vista que as hipóteses elencadas no capítulo 2 para estimar o expoente de Lyapunov analiticamente ainda não constituem axiomas de uma teoria geométrica geral para o caos hamiltoniano, mas sim um conjunto de hipóteses que simplifica a descrição da equação de Jacobi, é importante uma simulação numérica para comparação com as estimativas analíticas obtidas na seção anterior. As análises numéricas apresentadas nesta seção foram baseadas nos métodos descritos em [4] e [40].

Consideremos as equações de movimento:

$$\begin{aligned} \dot{q}_i &= p_i \\ \dot{p}_i &= -M_x \sin q_i + M_y \cos q_i - h \sin q_i, \qquad i = 1, ..., N; \end{aligned} \tag{3.35}$$

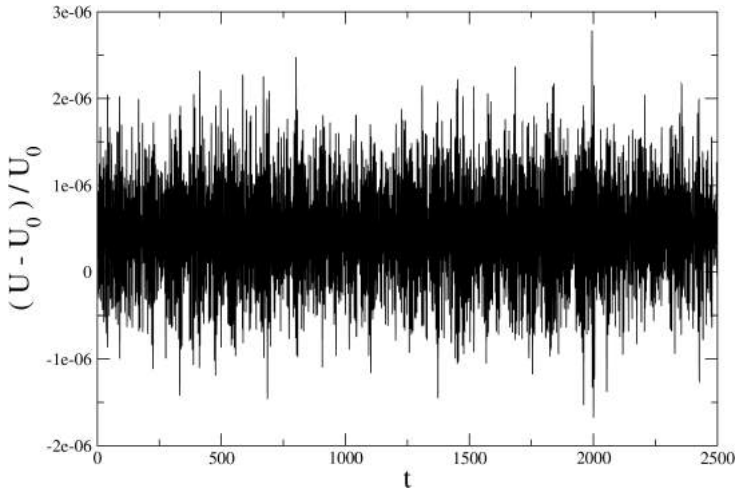
obtidas do hamiltoniano (2.1). A dinâmica é governada por valores instantâneos das variáveis de campo médio M_x e M_y, i.e., as componentes do vetor magnetização. De fato, seu o módulo mede o nível de aglomeração das partículas e no atua como parâmetro de ordem conforme foi descrito no capítulo anterior.

A integração numérica das equações (3.35) requer procedimentos que preservem a estrutura hamiltoniana do modelo. Uma vez que transformações simpléticas conservam tal estrutura, escolhemos um método simplético chamado de *leapfrog*. Este método, além de simplético, é invariante sob reversão temporal, de segunda ordem e robusto [31].

Antes de seguir com os resultados relevantes para a dinâmica e geometria do sistema, se faz necessário testar a eficiência do integrador e sua consistência com respeito a quantidades conservadas, em particular a energia. A figura 8 mostra a evolução temporal da flutuação da energia total por partícula $\mathbf{U}$. Em todas as simulacões, o tempo t é definido por $t = n_i \times \Delta t$ onde n_i é o número de iterações executadas pelo integrador e Δt o passo de tempo correspondente a 0.05 [40]. Foram consideradas condições iniciais no equilíbrio geradas através do algoritmo Metropolis [39].

Todas as medidas realizadas nesse trabalho equivalem a médias temporais das soluções da dinâmica para tempos suficientemente longos. O processo para obtenção das quantidades associadas à dinâmica são realizados numericamente de acordo com os seguintes passos:

Figura 8 – Dinâmica do modelo XY de campo médio: erro relativo da energia para $N = 5 \times 10^4$, $h = 0.2$ e $\mathbf{U}_0 = 0.45$.



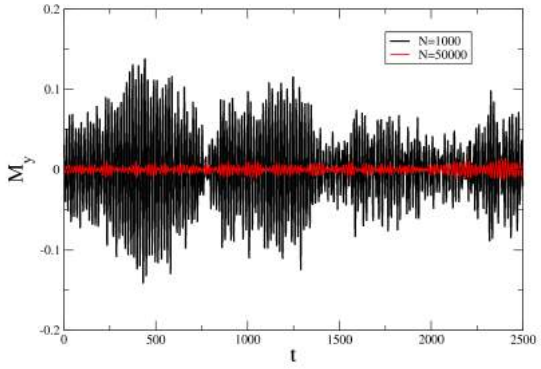
Fonte: os autores (obtida com uso do Python e do Xmgrace).

- Consideramos um valor fixo de energia U e campo h, e resolvemos a equação autoconsistente (3.11) para obter os valores de M e β no equilíbrio;
- A partir de M e β, encontramos uma distribuição de Boltzmann para os N pares (q, p), de acordo com o algoritmo de Metropolis;
- Utilizamos a distribuição gerada no passo anterior como condição inicial para finalmente resolvermos as $2N$ equações diferenciais (**??**) para a dinâmica. Para tal fim, usamos o integrador numérico *leapfrog*, para tempo suficiente grande, de forma que as médias possam ser estabelecidas.

3.2.1 Magnetização

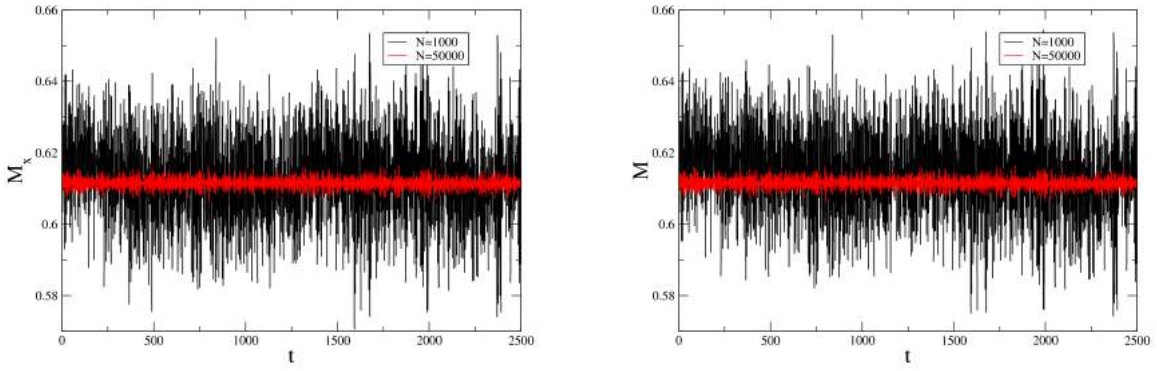
Como suposto na seção 3.1, na figura abaixo temos uma simulação numérica da evolução temporal de $\mathbf{M}_y$, $\mathbf{M}_x$ e $\mathbf{M}$ respectivamente, mostrando que os valores de $\mathbf{M}_y$ flutuam em torno de zero e $\mathbf{M}_x \approx \mathbf{M}$ para valores de $N = 10^3$ e $N = 5 \times 10^4$, $h = 0.2$ e $\mathbf{U} \approx 0.45$. Note que quanto maior o valor de N menor a flutuação em torno de zero.

Figura 9 – Evolução temporal da componente do vetor magnetização $\mathbf{M}_y$, para diversos valores de N com $h = 0.2$ e $\mathbf{U} \approx 0.45$.



Fonte: os autores (obtida com uso do Python e do Xmgrace).

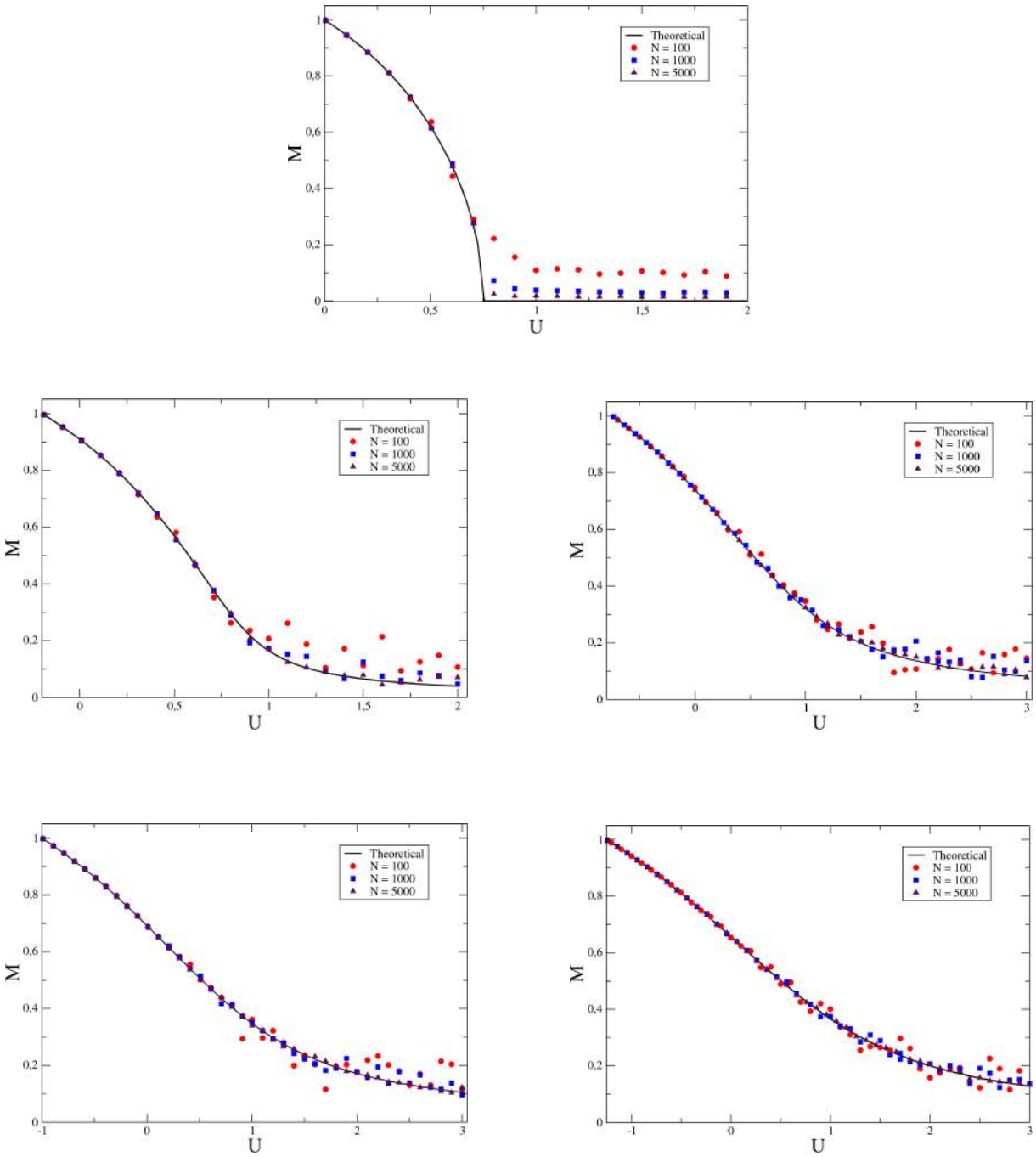
Figura 10 – Evolução temporal da componente do vetor magnetização $\mathbf{M}_x$ e da magnetização $\mathbf{M}$, para diversos valores de N com $h = 0.2$ e $\mathbf{U} \approx 0.45$.



Fonte: os autores (obtida com uso do Python e do Xmgrace).

Nas figuras que se seguem, ilustraremos o módulo do vetor magnetização, $\mathbf{M}$, calculado via equação auto-consistente (3.11) obedecendo os passos descritos na seção 3.3.

Figura 11 – Magnetização **M** em função da energia por partícula **U**, calculada analiticamente e numericamente para os campos $h = 0$, $h = 0.2$, $h = 0.75$, $h = 1$ e $h = 1.25$ respectivamente.



Fonte: os autores (obtida com uso do Python e dos softwares Maple e Xmgrace).

Observe que, na primeira figura a magnetização possui um decaimento abrupto na região da energia crítica $\mathbf{U}_c$ e tende a zero para $\mathbf{U} > \mathbf{U}_c$. Nas demais figuras, o campo magnético faz com que esse decaimento seja suave. Ressaltamos a concordância entre os resultados analíticos e numéricos.

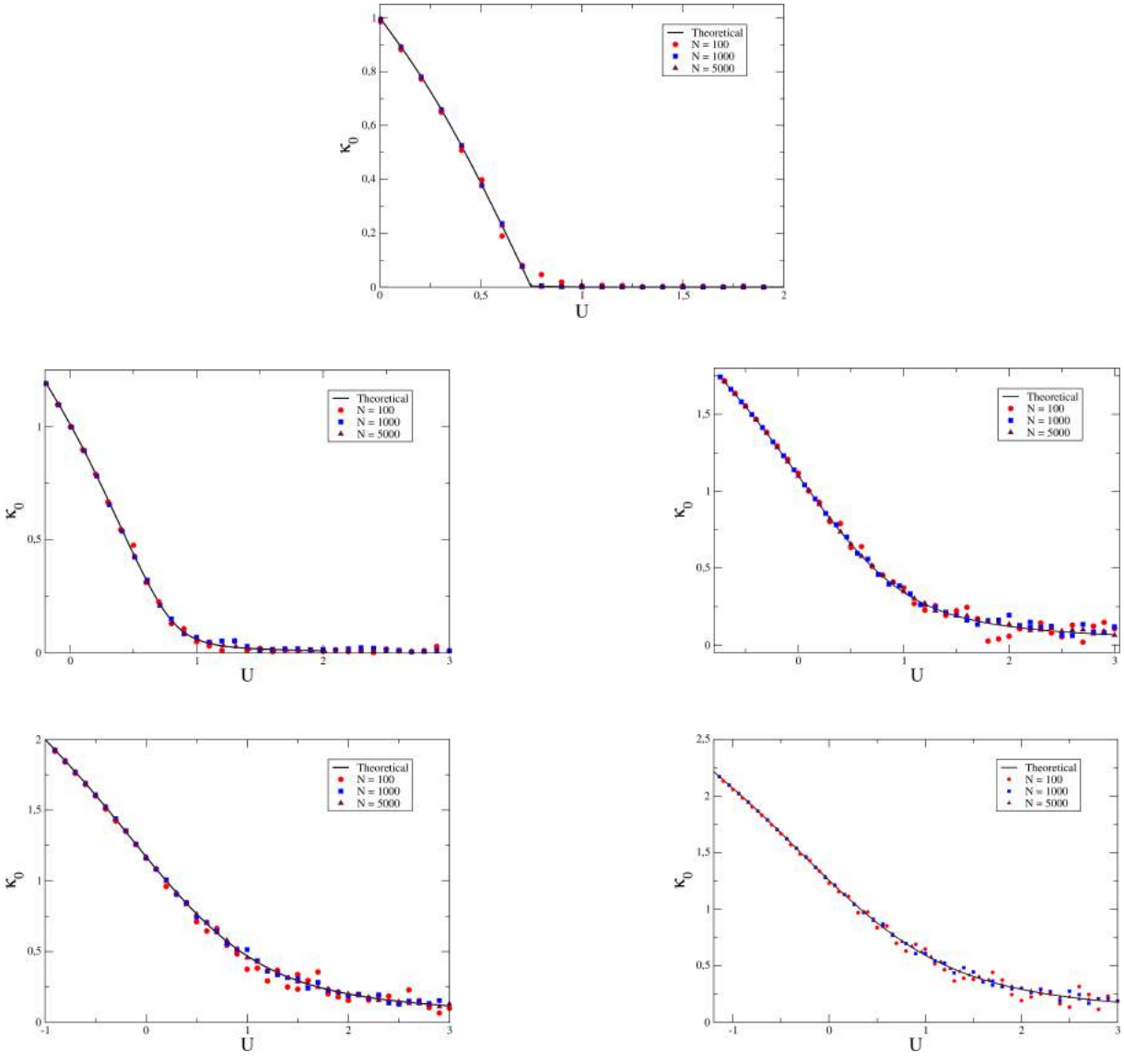
3.2.2 Curvatura e Flutuação

A média da curvatura de Ricci e sua flutuação, κ_0, σ_κ, via métrica de Eisenhart são exibidas nas figuras 12 e 13, respectivamente, conforme definição:

$$\begin{aligned} \kappa_0 &= \frac{\langle K_R \rangle}{N} \\ \sigma_\kappa &= \frac{\langle (K_R - \langle K_R \rangle)^2 \rangle}{N}, \end{aligned} \tag{3.36}$$

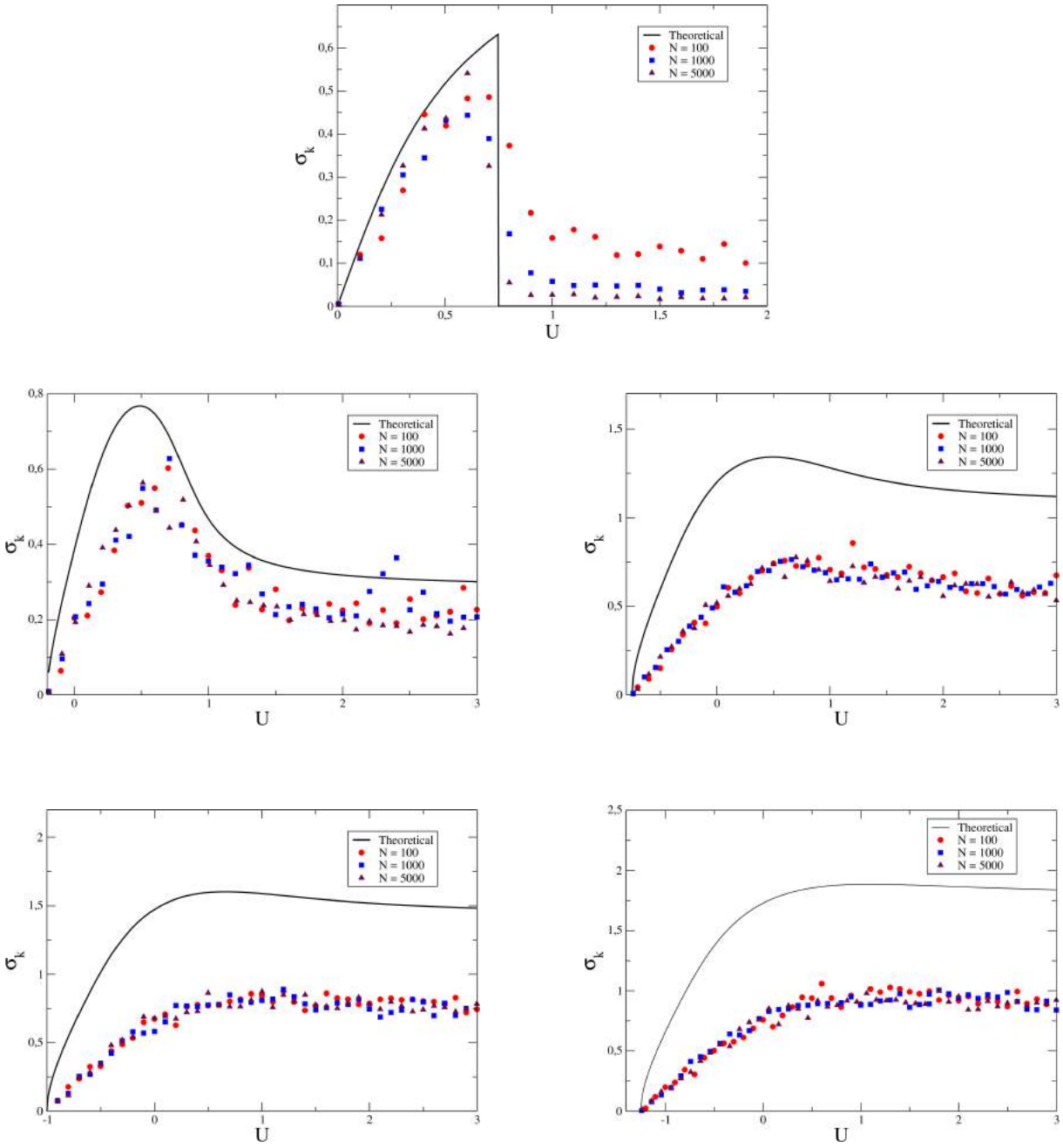
onde $K_R = \Delta V = \sum_{i=1}^{N} \frac{\partial^2 V}{\partial q_i^2}$ é o laplaciano do potencial.

Figura 12 – Modelo XY de campo médio na presença do campo: Curvatura de Ricci κ_0 em função da energia por partícula **U**, calculada analiticamente e numericamente para os campos $h = 0$, $h = 0.2$, $h = 0.75$, $h = 1$ e $h = 1.25$ respectivamente.



Fonte: os autores (obtida com uso do Python e dos softwares Maple e Xmgrace).

Figura 13 – Modelo XY de campo médio na presença do campo: Flutuação da curvatura de Ricci σ_κ em função da energia por partícula **U**, calculada analiticamente e numericamente para os campos $h = 0$, $h = 0.2$, $h = 0.75$, $h = 1$ e $h = 1.25$ respectivamente.



Fonte: os autores (obtida com uso do Python e dos softwares Maple e Xmgrace).

Observe que, a média curvatura de Ricci (figura 12) está em total concordância com o resultado numérico, uma vez que, conforme expressão (3.30), k_0, depende explicitamente de **M** e pela análise da figura 11, ambas possui um excelente resultado numérico e analítico.

Conforme visto para campo nulo, o comportamento do expoente de Lyapunov é sensível ao comportamento da flutuação da curvatura e esse resultado se estende a campo

não nulo. Portanto, uma análise do expoente de Lyapunov na próximo subseção é válida também para a flutuação da curvatura (figura 13).

3.2.3 Expoente de Lyapunov

O cálculo numérico do expoente de Lyapunov leva em conta tanto a evolução do sistema (3.35) que pode ser escrito de forma compacta:

$$\mathbf{x} \equiv (x_1, x_2, \ldots, x_n), \quad \dot{\mathbf{x}}(t) = \mathbf{F}(\mathbf{x}(t)) \tag{3.37}$$

como a dinâmica das flutuações locais, ou seja

$$\mathbf{w} \equiv (\delta x_1, \delta x_2, \ldots, \delta x_n), \quad \dot{\mathbf{w}}(t) = \mathbf{J}(\mathbf{x}(t))\mathbf{w}(t), \tag{3.38}$$

onde $\delta x_i(t) = x_i(t + dt) - x_i(t)$. Em regime infinitesimal, a equação de evolução para o vetor diferença $\mathbf{w}$ é linear, com $\mathbf{J} = \partial\mathbf{F}/\partial\mathbf{x}$ sendo a matriz Jacobiana do sistema. Os passos necessários para determinar os expoentes de Lyapunov são os seguintes:

1. Definir condição inicial, $\mathbf{x}_0$, referente às equações não-lineares e $\mathbf{w}_0$ para as condições linearizadas, com $|\mathbf{w}_0| = 1$ sem perda de generalidade;

2. Integrar ambos sistemas de equações durante um período de tempo T, o que leva a $\mathbf{x}_0 \to \mathbf{x}(T)$ e $\mathbf{w}_0 \to \mathbf{w}_1 \equiv \mathbf{w}(T)$;

3. A cada intervalo de integração T, o vetor das flutuações é normalizado, preservando a direção como condição inicial para o passo de integração seguinte;

4. O processo é iterado K vezes;

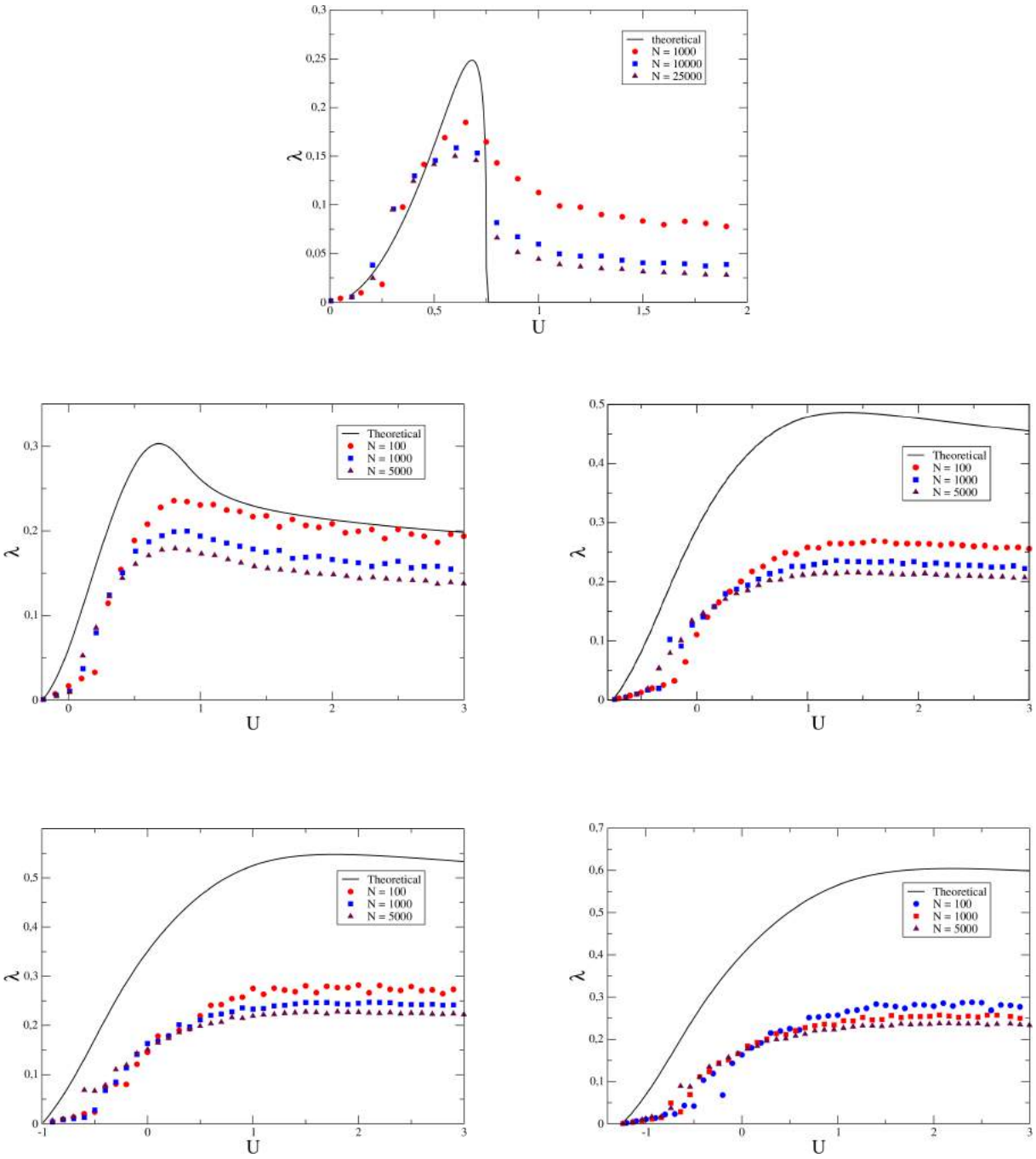
5. Finalmente, o expoente de Lyapunov é estimado através da média:

$$\lambda = \frac{1}{KT} \sum_{k=1}^{K} \ln ||\mathbf{w}_k||, \tag{3.39}$$

   onde K é suficientemente grande para que λ convirja.

As normalizações sistemáticas aplicadas em $\mathbf{w}$ durante o processo é um recurso numérico para evitar divergências, uma vez que as perturbações evoluem no espaço tangente segundo equações lineares. Para mais detalhes sobre os procedimentos numéricos padrões de obtenção do expoente de Lyapunov o leitor deve consultar [1, 2, 11, 23, 25, 37]

Figura 14 – Maior expoente de Lyapunov, λ em função da energia por partícula **U**, calculado analiticamente e numericamente para os campos $h = 0$, $h = 0.2$, $h = 0.75$, $h = 1$ e $h = 1.25$.



Fonte: os autores (obtida com uso do Python e dos softwares Maple e Xmgrace).

Na figura 14 apresentamos os resultados do expoente de Lyapunov em função da energia, **U**, para os estados em equilíbrio. Nota-se que para campo nulo a nossa previsão analítica está em concordância com os resultados numéricos obtidos das refs. ([32], [33], [35], [40]) e com nossos resultados numéricos. Esses últimos confirmam que para $\mathbf{U} < \mathbf{U}_c$ os resultados numéricos são independentes do tamanho do sistema, enquanto que, para

valores maiores de $\mathbf{U}$, λ cresce até $\mathbf{U}_c$ e cai abruptamente a zero, com uma escala de $N^{-\frac{1}{3}}$. Por outro lado, na presença de campo pequenos, o expoente λ é não nulo logo acima de $\mathbf{U}_c$ e vai assintoticamente a zero para $\mathbf{U} \to \infty$, havendo compatibilidade analítico e numérico. De forma diversa, para campos suficientemente altos há uma mudança qualitativa não trivial nas previsões numéricas. De fato, nota-se que para qualquer valor de $\mathbf{U}$ de interesse, os resultados numéricos são independentes do tamanho do sistema e bem menores que aqueles previstos analiticamente, embora haja concordância qualitativa entre eles. Uma possível interpretação dessa discrepância quantitativa para campos altos é a forte quebra de simetria rotacional (espaço de spins) imposta pelo campo. Neste contexto, a hipótese de quase isotropia no tratamentro geométrico pode ser comprometida na medida em que o campo torna-se suficientemente intenso e a magnetização paramagnética é mais estável [3].

3.3 Discussão e Perspectivas

Neste trabalho, estudamos a geometrização da dinâmica hamiltonina, em particular a estimativa analítica para o expoente de Lyapunov. Para tal fim, investigamos numericamente e analiticamente as propriedades dinâmicas e geométricas do modelo XY de campo médio na presença de um campo. Motivados pela presença de soluções metaestáveis encontradas recentemente em soluções possíveis deste modelo, tentamos responder o que é a dinâmica dessas soluções metaestáveis e como isso afeta a dinâmica do sistema. Para este caso, o expoente de Lyapunov exibiu um fenômeno de reentrância para campos suficientemente pequenos que vai se acentuando para campos altos. Esse fenômeno constitui na manifestação dinâmica da aunsência da transição de fase. Estes resultados merecem ser estudados sobre um prisma mais rigoroso, de maneira geral. Comparações e discussões sobre os resultados numéricos e analíticos foram abordadas nesta tese.

4 DINÂMICA QUÂNTICA DE LANGEVIN

Baseado nas propostas (1.1, 1.3) do Bedeaux e Mazur como um dispositivo fenomenológico, formulamos os seguintes critérios para uma descrição razoável da mecânica quântica:

(**A**) A média canônica para os comutadores canônicos de tempos iguais $\left\langle [s_n(t), p_m(t)] \right\rangle = \mathbf{i}\hbar\,\delta_{n,m}$ deve ser preservada para todo tempo $t > 0$, se inicialmente obedecido;

(**B**) a fórmula de Kubo da teoria de resposta linear deve ser reproduzida;

Como veremos, estes requisitos serão suficientes para fixar os comutadores entre os dois ruídos η_s, η_p. Além disso:

(**C**) o teorema do virial deve ser satisfeito;

(**D**) o teorema da flutuação-dissipação quântico (QFDT) será uma característica essencial dos estados de equilíbrio quântico.

Neste trabalho, iremos explorar quais tipos de dinâmica são compatíveis com esses critérios.

Na próxima seção, vamos analisar o caso do oscilador harmônico simples, equação (1.2), de acordo a sugestão de [7, 8] de incluir dois ruídos η_s, η_p, mas também incluiremos o efeito das condições iniciais. Mostraremos que para essa abordagem os três critérios (**A**, **B**, **C**) são satisfeitos e o critério (**D**) é válido apenas no limite de $\hbar \to 0$.

4.1 Oscilador harmônico dissipativo semi-clássico

4.1.1 Solução Formal

A solução do sistema de equações diferenciais lineares de primeira ordem não-homogêneo, (1.2), cuja forma matricial é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} s(t) \\ p(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{m} \\ -m\omega^2 & -\lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} s(t) \\ p(t) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \eta_s(t) \\ \eta_p(t) \end{pmatrix} \tag{4.1}$$

pode ser determinada pelo método da variação dos parâmetros.

Considere o sistema homogêneo associado:

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix} s(t) \\ p(t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{1}{m} \\ -m\omega^2 & -\lambda \end{pmatrix}\begin{pmatrix} s(t) \\ p(t) \end{pmatrix} = -\Lambda \begin{pmatrix} s(t) \\ p(t) \end{pmatrix}. \tag{4.2}$$

Os autovalores da matriz Λ são da forma:

$$\Lambda_{\pm} \;=\; \frac{\lambda}{2} \pm \sqrt{\frac{\lambda^2}{4} - \omega^2} \tag{4.3}$$

e satisfazem as seguintes propriedades: Se $0 < |\omega| < \lambda/2$, então $\Lambda_+ > \Lambda_- > 0$. Se $|\omega| > \lambda/2 > 0$, então $\Lambda_-^* = \Lambda_+$ e Re $\Lambda_\pm = \lambda/2 > 0$.

A solução homogênea implica no seguinte "ansatz":

$$\begin{aligned} s(t) &= s_+(t)e^{-\Lambda_+ t} \;+\; s_-(t)e^{-\Lambda_- t} \\ p(t) &= p_+(t)e^{-\Lambda_+ t} \;+\; p_-(t)e^{-\Lambda_- t} \end{aligned} \tag{4.4}$$

Duas das quatro amplitudes $(s_\pm, p_\pm)$ no ansatz podem ser escolhidas livremente. Nossa escolha é dada por:

$$p_\pm(t) \;=\; -m\Lambda_\pm s_\pm(t) \tag{4.5}$$

Agora, inserindo (4.4) nas equações (1.2) e usando as condições (4.3, 4.5) o sistema pode ser escrito na forma:

$$\dot{s}_+(t)e^{-\Lambda_+ t} + \dot{s}_-(t)e^{-\Lambda_- t} \;=\; \eta_s(t) \;\;,\;\; -\Lambda_+\dot{s}_+(t)e^{-\Lambda_+ t} - \Lambda_-\dot{s}_-(t)e^{-\Lambda_- t} = \frac{1}{m}\eta_p(t)$$

ou equivalentemente (assumindo que $|\omega| \neq \lambda/2$):

$$\begin{aligned} \dot{s}_+(t) &= -\frac{\exp(\Lambda_+ t)}{\Lambda_+ - \Lambda_-}\left(\frac{\eta_p}{m} + \Lambda_-\eta_s\right) \\ \dot{s}_-(t) &= \frac{\exp(\Lambda_- t)}{\Lambda_+ - \Lambda_-}\left(\frac{\eta_p}{m} + \Lambda_+\eta_s\right) \end{aligned} \tag{4.6}$$

onde $\dot{s}$ corresponde a derivada com respeito ao tempo.

Integrando as equações acima, temos a solução exata de (1.2):

$$s(t) = s_+(0)e^{-\Lambda_+ t} + s_-(0)e^{-\Lambda_- t} - \frac{1}{\Lambda_+ - \Lambda_-}\int_0^t d\tau\, e^{-\Lambda_+(t-\tau)}\left[\frac{\eta_p(\tau)}{m} + \Lambda_-\eta_s(\tau)\right]$$
$$+ \frac{1}{\Lambda_+ - \Lambda_-}\int_0^t d\tau\, e^{-\Lambda_-(t-\tau)}\left[\frac{\eta_p(\tau)}{m} + \Lambda_+\eta_s(\tau)\right] \tag{4.7a}$$

$$p(t) = -m\Lambda_+ s_+(0)e^{-\Lambda_+ t} - m\Lambda_- s_-(0)e^{-\Lambda_- t} + \frac{m\Lambda_+}{\Lambda_+ - \Lambda_-}\int_0^t d\tau\, e^{-\Lambda_+(t-\tau)}\left[\frac{\eta_p(\tau)}{m} + \Lambda_-\eta_s(\tau)\right]$$
$$- \frac{m\Lambda_-}{\Lambda_+ - \Lambda_-}\int_0^t d\tau\, e^{-\Lambda_-(t-\tau)}\left[\frac{\eta_p(\tau)}{m} + \Lambda_+\eta_s(\tau)\right] \tag{4.7b}$$

As equações (4.7) serão a base de todos nossos cálculos.

4.1.2 Comutadores para tempos iguais

Enquanto as amplitudes $s_\pm(0)$ caracterizam as flutuações do estado inicial, as flutuações do banho são descritas pelos ruídos $\eta_s(t)$ e $\eta_p(t)$. Suponhamos que esses dois

tipos de flutuações são independentes e portanto, em média:

$$\langle [s_{\pm}(0), \eta_a(t)] \rangle = 0 \ \ , \ \ \langle [\eta_a(t), \eta_a(t')] \rangle = 0, \tag{4.8}$$

onde o índice a corresponde aos índices dos ruídos s, p. A segunda relação acima nos diz que os ruídos de mesmo tipo tanto para spin quanto para o momento devem comutar. Fixemos $\langle [s_+(0), s_-(0)] \rangle$ e consideremos sem perda de generalidade e afim de simplificar os cálculos:

$$\langle [\eta_s(t), \eta_p(t')] \rangle \ = \ \kappa\, \delta(t - t'), \tag{4.9}$$

onde $\delta(t - t')$ é a função delta de Dirac e κ uma constante a ser determinada.

Usando a solução (4.7), o comutador spin-momento é dado por:

$$\begin{aligned}
\Big\langle \Big[s(t), p(t') \Big] \Big\rangle \ &= \ \Big\langle \Big[s_+(0), s_-(0) \Big] \Big\rangle\, m \left(\Lambda_+ e^{-\Lambda_- t - \Lambda_+ t'} - \Lambda_- e^{-\Lambda_+ t - \Lambda_- t'} \right) \\
&- \ \frac{\kappa}{\Lambda_+ - \Lambda_-} \int_0^{\min(t,t')} d\tau \left(\Lambda_- e^{-\Lambda_+ t - \Lambda_- t' + (\Lambda_+ + \Lambda_-)\tau} - \right. \\
&- \ \left. \Lambda_+ e^{-\Lambda_- t - \Lambda_+ t' + (\Lambda_+ + \Lambda_-)\tau} \right) \\
&= \ m \left(\Lambda_+ e^{-\Lambda_- t - \Lambda_+ t'} - \Lambda_- e^{-\Lambda_+ t - \Lambda_- t'} \right) \left(\Big\langle \Big[s_+(0), s_-(0) \Big] \Big\rangle - \right. \\
&- \ \left. \frac{\kappa/m}{(\Lambda_+ - \Lambda_-)(\Lambda_+ + \Lambda_-)} \right) - \kappa \left(\frac{\Lambda_- e^{-\Lambda_+ (t - t')} - \Lambda_+ e^{-\Lambda_- (t - t')}}{(\Lambda_+ - \Lambda_-)(\Lambda_+ + \Lambda_-)} \right. \\
&- \ \left. \frac{\Lambda_- e^{-\Lambda_- (t - t')} - \Lambda_+ e^{-\Lambda_+ (t - t')}}{(\Lambda_+ - \Lambda_-)(\Lambda_+ + \Lambda_-)} \right) \Theta(t - t')
\end{aligned} \tag{4.10}$$

onde $\Theta(t - t')$ é a função de Heaviside.

A estacionariedade do comutador spin-momento pode ser obtida escolhendo a seguinte condição inicial:

$$\langle [s_+(0), s_-(0)] \rangle \ = \ \frac{\kappa/m}{(\Lambda_+ - \Lambda_-)(\Lambda_+ + \Lambda_-)}. \tag{4.11}$$

Disto, a terceira linha de (4.10) é nula e o comutador procurado é obtido ao considerarmos $t = t'$. Deste modo:

$$\langle [s(t), p(t)] \rangle = \frac{\kappa}{\lambda}. \tag{4.12}$$

Identificando:

$$\kappa = \mathbf{i} \lambda \hbar, \tag{4.13}$$

temos que

$$\langle [\eta_s(t), \eta_p(t')] \rangle \ = \ \mathbf{i} \lambda \hbar\, \delta(t - t') \tag{4.14}$$

que reproduz a equação (1.3) como proposto em [8].

Por outro lado, para tempos distintos $t \neq t'$, o comutador canônico spin-momento não é mantido, mas, depende apenas da diferença de tempo $\tau = t - t'$.

4.1.3 Função Resposta

Como preparação para a discursão da fórmula de Kubo e do teorema da flutuação-dissipação (FDT), calculemos a função resposta da média do spin e do momento dada uma pequena pertubação magnética externa. Tal pertubação consiste em adicionarmos no hamiltoniano do modelo em questão um termo da forma $\delta H = -hs$ (caso do operador spin). Disto:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}s^2 - hs, \tag{4.15}$$

e a equação de Langevin perturbada corresponde a:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}s(t) &= \frac{1}{m}p(t) + \eta_s(t) \\ \frac{\partial}{\partial t}p(t) &= -m\omega^2 s(t) + h - \lambda p(t) + \eta_p(t). \end{aligned} \tag{4.16}$$

A função resposta linear spin, s, e momento, p, são definidas por:

$$\begin{aligned} R^{(s)}(t,t') &:= \left.\frac{\delta\langle s(t)\rangle}{\delta h(t')}\right|_{h=0}, \\ Q^{(p)}(t,t') &:= \left.\frac{\delta\langle p(t)\rangle}{\delta h(t')}\right|_{h=0}, \end{aligned} \tag{4.17}$$

e satisfazem:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}R^{(s)}(t,t') &= \frac{1}{m}Q^{(p)}(t,t') \\ \frac{\partial}{\partial t}Q^{(p)}(t,t') &= -m\omega^2 R^{(s)}(t,t') - \lambda Q^{(p)}(t,t') + \delta(t-t'). \end{aligned} \tag{4.18}$$

Definindo $\mathscr{R}(t-t',t') = R^{(s)}(t,t')$ e denotando $\tau = t - t'$, obtemos:

$$\partial_\tau^2\mathscr{R}(\tau,t') + \lambda\partial_\tau\mathscr{R}(\tau,t') + \omega^2\mathscr{R}(\tau,t') = \frac{\delta(\tau)}{m}. \tag{4.19}$$

Portanto, a função resposta $R^{(s)} = R^{(s)}(\tau) = \mathscr{R}(\tau,t')$ é estacionária e não depende de t'.

Introduzindo a transformada de Fourier:

$$(\mathscr{F}R^{(s)}(\tau))(\nu) = \hat{R}^{(s)}(\nu) := (2\pi)^{-1/2}\int_{\mathbb{R}} d\tau\, e^{-\mathrm{i}\nu\tau}R^{(s)}(\tau), \tag{4.20}$$

sabemos que:

$$\left(\mathscr{F}\frac{\partial}{\partial t}R^{(s)}(\tau)\right)(\nu) = (2\pi)^{-1/2}\int_{\mathbb{R}} d\tau\, e^{-\mathrm{i}\nu\tau}\frac{\partial}{\partial t}R^{(s)}(\tau) \tag{4.21}$$

$$= -(2\pi)^{-1/2}\int_{\mathbb{R}} d\tau\, \frac{\partial}{\partial t}e^{-\mathrm{i}\nu\tau}R^{(s)}(\tau) \tag{4.22}$$

$$= \mathrm{i}\nu \tag{4.23}$$

e de modo análogo:

$$\left(\mathscr{F}\frac{\partial^2}{\partial t^2}R^{(s)}(\tau)\right)(\nu) \;=\; (\mathrm{i}\nu)^2. \tag{4.24}$$

Substituindo as quantidades anteriores em (4.19), obtemos:

$$\hat{R}^{(s)}(\nu) = -\frac{1}{m\sqrt{2\pi}}\frac{1}{\nu^2 - \mathbf{i}\lambda\nu - \omega^2}, \tag{4.25}$$

que possui dois pólos simples no ν-plano superior complexo.

Aplicando a anti-transformada:

$$R^{(s)}(\tau, t') \;=\; (2\pi)^{-\frac{1}{2}}\int_{\mathbb{R}} d\tau\, e^{\mathbf{i}\nu\tau}R^{(s)}(\tau, t') \;=\; \frac{1}{2\pi m}\int_{\mathbb{R}}\frac{e^{\mathbf{i}\nu\tau}}{\nu^2 - \mathbf{i}\lambda\nu - \omega^2} \tag{4.26}$$

e resolvendo a integral acima pelo teorema do resíduo, a função resposta de spin $R^{(s)}$ é da forma:

$$R^{(s)}(t - t') \;=\; \Theta(t - t')\frac{1/m}{\Lambda_+ - \Lambda_-}\left(e^{-\Lambda_-(t-t')} - e^{-\Lambda_+(t-t')}\right) \tag{4.27}$$

onde a função de Heaviside, Θ, expressa a condição de causalidade $t \geq t'$.

A função resposta momento $Q^{(p)}(t, t')$ pode ser obtido via (4.20).

Analogamente, nós podemos considerar uma pertubação pelo operador momento, cujo hamiltoniano é da forma:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}s^2 + kp. \tag{4.28}$$

As equações de movimento correspondem a:

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}s(t) &= \frac{1}{m}p + k + \eta_s \\ \frac{\partial}{\partial t}p(t) &= -m\omega^2 s - \lambda p + \eta_p\end{aligned} \tag{4.29}$$

e as funções respostas são agora definidas por:

$$\begin{aligned}R^{(p)}(t, t') &:= \left.\frac{\delta\langle p(t)\rangle}{\delta k(t')}\right|_{k=0} \\ Q^{(s)}(t, t') &:= \left.\frac{\delta\langle s(t)\rangle}{\delta k(t')}\right|_{k=0}.\end{aligned} \tag{4.30}$$

Por um cálculo análogo ao anterior, obtemos a função resposta para o momento:

$$\begin{aligned}R^{(p)}(t - t') &= \frac{m\omega^2\,\Theta(t - t')}{\Lambda_+ - \Lambda_-}\left(e^{-\Lambda_-(t-t')} - e^{-\Lambda_+(t-t')}\right) \\ &= m^2\omega^2 R^{(s)}(t - t').\end{aligned} \tag{4.31}$$

4.1.4 Comutadores e fórmula do Kubo

Em termos da matriz densidade, $\rho(0)$, a média de um operador dependente do tempo $A(t)$ é definida por:

$$\langle A(t)\rangle \;=\; Z^{-1}\mathrm{tr}(A(t)\rho(0)), \tag{4.32}$$

onde $Z := \mathrm{tr}(\rho(0))$. A função de correlação para dois tempos, simétrica e antissimétrica, respectivamente, correspondem a [20]:

$$C_+(t,t') := \frac{1}{2}\left\langle A(t)B(t') + B(t')A(t)\right\rangle = \frac{1}{2}\left\langle\{A(t),B(t')\}\right\rangle \tag{4.33a}$$

$$C_-(t,t') := \frac{1}{2}\left\langle A(t)B(t') - B(t')A(t)\right\rangle = \frac{1}{2}\left\langle[A(t),B(t')]\right\rangle. \tag{4.33b}$$

No que se segue, admitiremos que $A(t) = B(t)$, a menos que falemos o contrário. Tomando $A(t) = s(t)$ ou $A(t) = p(t)$, respectivamente, a fórmula do Kubo [20, 53]:

$$R^{(s,p)}(t-t') \;=\; \frac{2\mathbf{i}}{\hbar}\Theta(t-t')\,C_-^{(s,p)}(t,t') \tag{4.34}$$

relaciona a função de correlação anti-simétrica, $C_-(t,t')$, com a função resposta de um operador $A(t)$.

Observe que, a fórmula de Kubo é consequência da função resposta linear. No entanto, sua validade não está relacionada à condição de que o sistema que está perturbado tenha que estar em equilíbrio, nem que o hamiltoniano deva ser conservado em média.

Verifiquemos a fórmula (4.34) para as funções respostas spin-spin e momento para o modelo em questão.

Inicialmente calculemos a função de correlação antissimétrica spin-spin utilizando (4.7a):

$$\begin{aligned}
C_-^{(s)}(t,t') = {}& \langle[s_+(0),s_-(0)]\rangle\left(e^{-\Lambda_+ t-\Lambda_- t'} - e^{-\Lambda_- t-\Lambda_+ t'}\right)\\
&+ \frac{1/2}{(\Lambda_+-\Lambda_-)^2}\int_0^t d\tau\int_0^{t'} d\tau'\left(e^{-\Lambda_+(t-\tau+t'-\tau')}\left\langle\left[\frac{\eta_p(\tau)}{m}+\Lambda_-\eta_s(\tau),\frac{\eta_p(\tau')}{m}+\Lambda_-\eta_s(\tau')\right]\right\rangle\right.\\
&- e^{-\Lambda_+(t-\tau)}e^{-\Lambda_-(t'-\tau')}\left\langle\left[\frac{\eta_p(\tau)}{m}+\Lambda_-\eta_s(\tau),\frac{\eta_p(\tau')}{m}+\Lambda_+\eta_s(\tau')\right]\right\rangle\\
&- e^{-\Lambda_-(t-\tau)}e^{-\Lambda_+(t'-\tau')}\left\langle\left[\frac{\eta_p(\tau)}{m}+\Lambda_+\eta_s(\tau),\frac{\eta_p(\tau')}{m}+\Lambda_-\eta_s(\tau')\right]\right\rangle\\
&\left.+ e^{-\Lambda_-(t-\tau+t'-\tau')}\left\langle\left[\frac{\eta_p(\tau)}{m}+\Lambda_+\eta_s(\tau),\frac{\eta_p(\tau')}{m}+\Lambda_+\eta_s(\tau')\right]\right\rangle\right)
\end{aligned}$$

Utilizando a propriedade da soma do comutador, temos que:

$$\begin{aligned}
C_-^{(s)}(t,t') &= \langle[s_+(0),s_-(0)]\rangle\left(e^{-\Lambda_+ t-\Lambda_- t'}-e^{-\Lambda_- t-\Lambda_+ t'}\right)\\
&+ \frac{1}{2}(\Lambda_+-\Lambda_-)^2\int_0^t d\tau\int_0^{t'}d\tau'\left(e^{-\Lambda_+(t-\tau+t'-\tau')}\left(\left\langle\left[\frac{\eta_p(\tau)}{m},\frac{\eta_p(\tau')}{m}\right]\right\rangle\right.\right.\\
&+ \left\langle\left[\frac{\eta_p(\tau)}{m},\Lambda_-\eta_s(\tau')\right]\right\rangle+\left\langle\left[\Lambda_-\eta_s(\tau),\frac{\eta_p(\tau')}{m}\right]\right\rangle+\left.\left\langle\left[\Lambda_-\eta_s(\tau),\Lambda_-\eta_s(\tau')\right]\right\rangle\right)\\
&- e^{-\Lambda_+(t-\tau)}e^{-\Lambda_-(t'-\tau')}\left(\left\langle\left[\frac{\eta_p(\tau)}{m},\frac{\eta_p(\tau')}{m}\right]\right\rangle+\left\langle\left[\frac{\eta_p(\tau)}{m},\Lambda_+\eta_s(\tau')\right]\right\rangle\right.\\
&+ \left.\left\langle\left[\Lambda_-\eta_s(\tau),\frac{\eta_p(\tau')}{m}\right]\right\rangle+\left\langle\left[\Lambda_-\eta_s(\tau),\Lambda_+\eta_s(\tau')\right]\right\rangle\right)\\
&- e^{-\Lambda_-(t-\tau)}e^{-\Lambda_+(t'-\tau')}\left(\left\langle\left[\frac{\eta_p(\tau)}{m},\frac{\eta_p(\tau')}{m}\right]\right\rangle+\left\langle\left[\frac{\eta_p(\tau)}{m},\Lambda_-\eta_s(\tau')\right]\right\rangle\right.\\
&+ \left.\left\langle\left[\Lambda_+\eta_s(\tau),\frac{\eta_p(\tau')}{m}\right]\right\rangle+\left\langle\left[\Lambda_+\eta_s(\tau),\Lambda_-\eta_s(\tau')\right]\right\rangle\right)\\
&- e^{-\Lambda_-(t-\tau+t'-\tau')}\left(\left\langle\left[\frac{\eta_p(\tau)}{m},\frac{\eta_p(\tau')}{m}\right]\right\rangle+\left\langle\left[\frac{\eta_p(\tau)}{m},\Lambda_+\eta_s(\tau')\right]\right\rangle\right.\\
&+ \left.\left.\left\langle\left[\Lambda_+\eta_s(\tau),\frac{\eta_p(\tau')}{m}\right]\right\rangle+\left\langle\left[\Lambda_+\eta_s(\tau),\Lambda_+\eta_s(\tau')\right]\right\rangle\right)
\end{aligned}\tag{4.35}$$

Por (4.8) temos que o primeiro e o quarto comutador de cada parcela da integral são nulos. Pela condição inicial (4.11) e por (4.14), obtemos:

$$\begin{aligned}
C_-^{(s)}(t,t') &= \frac{\lambda\hbar}{\mathbf{i}m}\left(\frac{1/2}{\Lambda_+-\Lambda_-}\right)\left\{-\frac{e^{-\Lambda_+ t-\Lambda_- t'}-e^{-\Lambda_- t-\Lambda_+ t'}}{\Lambda_++\Lambda_-}\right.\\
&- \left.\int_0^{\min(t,t')}d\tau\, e^{-\Lambda_+ t-\Lambda_- t'}e^{(\Lambda_++\Lambda_-)\tau}+\int_0^{\min(t,t')}d\tau\, e^{-\Lambda_- t-\Lambda_+ t'}e^{(\Lambda_++\Lambda_-)\tau}\right\}\\
&= \frac{\hbar}{2\mathbf{i}m}\left(\frac{1}{\Lambda_+-\Lambda_-}\right)\ \mathrm{sign}\,(t-t')\ \left(e^{-\Lambda_-|t-t'|}-e^{-\Lambda_+|t-t'|}\right).
\end{aligned}\tag{4.36}$$

Apontamos a estacionariedade dessa função de correlação antissimétrica, que é uma consequência das suposições feitas anteriormente sobre o ruído e os comutadores iniciais. Tecnicamente, a estacionariedade surge desde que, após a integração, as contribuições do limite inferior de integração cancelam os termos provenientes da condição inicial.

Consideremos agora, a função de correlação antissimétrica momento-momento que é calculada de acordo com (4.7b). De modo análogo ao anterior:

$$\begin{aligned}
C_-^{(p)}(t,t') &= \langle[p(t),p(t')]\rangle\\
&= \frac{m\hbar}{2\mathbf{i}}\frac{\Lambda_+\Lambda_-}{\Lambda_+-\Lambda_-}\,\mathrm{sign}\,(t-t')\left(e^{-\Lambda_-|t-t'|}-e^{-\Lambda_+|t-t'|}\right).
\end{aligned}\tag{4.37}$$

A fim de compararmos tal resultado com a função resposta, note que por (4.3), $\Lambda_+ + \Lambda_- = \lambda$ e $\Lambda_+\Lambda_- = \omega^2$. Logo, comparando as equações (4.36), (4.27) e (4.37), (4.31), respectivamente,

vemos que:

$$\begin{aligned} R^{(s)}(t-t') &= \frac{2\mathbf{i}}{\hbar}\Theta(t-t')\,C_{-}^{(s)}(t-t') \\ R^{(p)}(t-t') &= \frac{2\mathbf{i}}{\hbar}\Theta(t-t')\,C_{-}^{(p)}(t-t') \qquad \tau = t-t' > 0 \end{aligned} \tag{4.38}$$

que é equivalente a formula de Kubo (4.34) para funções respostas spin e momento.

Note que, embora essas funções resposta e comutadores sejam estacionárias, não significa necessariamente que o processo estocástico subjacente deve ser em si mesmo estacionário, desde que tenhamos liberdade para a escolha das condições iniciais.

Em linhas gerais, temos mostrado que: *Considerando o oscilador harmônico linearmente amortecido com equações de movimento (1.2) e ruídos $\eta_s(t)$ e $\eta_p(t)$, cujas funções de correlações e condição inicial do sistema satisfazem respectivamente: (4.8, 4.14) e (4.11), então:*

1. *para todo tempo $t \geq 0$, a média do comutador para tempos iguais $\langle [s(t), p(t)] \rangle = \mathbf{i}\hbar$ é canônica;*
2. *A fórmula do Kubo (4.34) é válida para todo $t > t' > 0$.*

Com isso os critérios (**A**) e (**B**) propostos inicialmente são satisfeitos.

4.1.5 Anti-comutadores e o teorema do virial

Para caracterizar ainda mais o estado estacionário, é necessário determinarmos os anti-comutadores dos ruídos. Utilizaremos o "ansatz":

$$\begin{aligned} \langle \eta_p(t)\eta_p(t') \rangle = \langle \{\eta_p(t), \eta_p(t')\} \rangle &= \alpha\delta(t-t'), \\ \langle \eta_s(t)\eta_s(t') \rangle = \langle \{\eta_s(t), \eta_s(t')\} \rangle &= \beta\delta(t-t'), \end{aligned} \tag{4.39}$$

onde as constantes α, β precisam ser determinadas e com $\langle \{\eta_s(t), \eta_p(t')\} \rangle = 0$, como sugerido por [7, 8].

De acordo com (4.7) obtemos a função de correlação spin-spin:

$$\begin{aligned} C_{+}^{(s)}(t,t') = &\left[\left\langle s_+(0)^2 \right\rangle - \frac{\frac{\alpha}{m^2} + \beta\Lambda_-^2}{\Lambda_+(\Lambda_+ - \Lambda_-)^2} \right] \frac{e^{-\Lambda_+(t+t')}}{2} \\ &+ \left[\left\langle s_-(0)^2 \right\rangle - \frac{\frac{\alpha}{m^2} + \beta\Lambda_+^2}{\Lambda_-(\Lambda_+ - \Lambda_-)^2} \right] \frac{e^{-\Lambda_-(t+t')}}{2} \\ &+ \left[\frac{\langle \{s_+(0), s_-(0)\} \rangle}{2} + \frac{\frac{\alpha}{m^2} + \beta\Lambda_+\Lambda_-}{(\Lambda_+ + \Lambda_-)(\Lambda_+ - \Lambda_-)^2} \right] \left[e^{-\Lambda_+ t - \Lambda_- t'} + e^{-\Lambda_+ t' - \Lambda_- t} \right] \\ &+ \left[\frac{\frac{\alpha}{m^2} + \Lambda_-^2\beta}{2\Lambda_+} - \frac{\frac{\alpha}{m^2} + \Lambda_+\Lambda_-\beta}{2(\Lambda_+ + \Lambda_-)} \right] \frac{e^{-\Lambda_+|t-t'|}}{(\Lambda_+ - \Lambda_-)^2} \\ &+ \left[\frac{\frac{\alpha}{m^2} + \Lambda_+^2\beta}{2\Lambda_-} - \frac{\frac{\alpha}{m^2} + \Lambda_+\Lambda_-\beta}{2(\Lambda_+ + \Lambda_-)} \right] \frac{e^{-\Lambda_-|t-t'|}}{(\Lambda_+ - \Lambda_-)^2} \end{aligned} \tag{4.40}$$

Note na equação acima, a presença de termos estacionários (na última linha) e contribuições não estacionárias decaindo rapidamente (sempre que $t, t' \gg |t - t'|$), que dependem exclusivamente das condições iniciais.

De modo análogo, a função de correlação momento-momento é dado por:

$$\begin{aligned}
C_+^{(p)}(t,t') &= m^2\Lambda_+^2\left[\left\langle s_+(0)^2\right\rangle - \frac{\frac{\alpha}{m^2}+\beta\Lambda_-^2}{\Lambda_+(\Lambda_+-\Lambda_-)^2}\right]\frac{e^{-\Lambda_+(t+t')}}{2} \\
&+ m^2\Lambda_-^2\left[\left\langle s_-(0)^2\right\rangle - \frac{\frac{\alpha}{m^2}+\beta\Lambda_+^2}{\Lambda_-(\Lambda_+-\Lambda_-)^2}\right]\frac{e^{-\Lambda_-(t+t')}}{2} \\
&+ m^2\Lambda_+\Lambda_-\left[\frac{\langle\{s_+(0),s_-(0)\}\rangle}{2} + \frac{\frac{\alpha}{m^2}+\beta\Lambda_+\Lambda_-}{(\Lambda_++\Lambda_-)(\Lambda_+-\Lambda_-)^2}\right]\left[e^{-\Lambda_+t-\Lambda_-t'} + e^{-\Lambda_+t'-\Lambda_-t}\right] \\
&+ \frac{m^2\Lambda_+^2\left(\frac{\alpha}{m^2}+\Lambda_-^2\beta\right)}{2\Lambda_+(\Lambda_+-\Lambda_-)^2}e^{-\Lambda_+|t-t'|} + \frac{m^2\Lambda_-^2\left(\frac{\alpha}{m^2}+\Lambda_+^2\beta\right)}{2\Lambda_-(\Lambda_+-\Lambda_-)^2}e^{-\Lambda_-|t-t'|} \\
&- \frac{m^2\Lambda_+\Lambda_-\left(\frac{\alpha}{m^2}+\Lambda_+\Lambda_-\beta\right)}{(\Lambda_++\Lambda_-)(\Lambda_+-\Lambda_-)^2}\left(e^{-\Lambda_+|t-t'|}+e^{-\Lambda_-|t-t'|}\right)
\end{aligned} \tag{4.41}$$

que possui uma estrutura análoga à anterior.

O teorema do virial relaciona essas duas correlações no equilíbrio:

$$\left\langle p^2\right\rangle_{eq} = m^2\omega^2\left\langle s^2\right\rangle_{eq} . \tag{4.42}$$

Portanto:

$$C_+^{(p)}(t,t)_{stat} = m^2\Lambda_+\Lambda_-C_+^{(s)}(t,t)_{stat} \tag{4.43}$$

Nela, a última linha da equação (4.41) cancela as contribuições em (**??**) e os demais termos estacionários levam à condição:

$$\Lambda_+\left(\frac{\alpha}{m^2}+\beta\Lambda_-^2\right)+\Lambda_-\left(\frac{\alpha}{m^2}+\beta\Lambda_+^2\right) \stackrel{!}{=} \Lambda_-\left(\frac{\alpha}{m^2}+\beta\Lambda_-^2\right)+\Lambda_+\left(\frac{\alpha}{m^2}+\beta\Lambda_+^2\right) .$$

Para $\beta = 0$, temos uma identidade. Para $\beta \neq 0$, os termos que contém α se cancelam e usando a forma explicita de $\Lambda_\pm$, chegamos finalmente a $\lambda^3 = 4\lambda\omega^2$. No entanto, desde que λ, ω são parâmetro independentes , uma solução genérica $\beta \neq 0$ é impossível. O resultado $\beta = 0$ reproduz (1.3).

Tendo mostrado que $\beta = 0$, resta-nos encontrar α. Neste caso a função de correlação spin-spin é simplificada para:

$$\begin{aligned}
C_+^{(s)}(t,t') &= \left[\left\langle s_+(0)^2\right\rangle - \frac{\alpha/m^2}{\Lambda_+(\Lambda_+-\Lambda_-)^2}\right]\frac{e^{-\Lambda_+(t+t')}}{2} \\
&+ \left[\left\langle s_-(0)^2\right\rangle - \frac{\alpha/m^2}{\Lambda_-(\Lambda_+-\Lambda_-)^2}\right]\frac{e^{-\Lambda_-(t+t')}}{2} \\
&+ \left[\langle\{s_+(0),s_-(0)\}\rangle + \frac{\alpha/m^2}{(\Lambda_++\Lambda_-)(\Lambda_+-\Lambda_-)^2}\right]\left[e^{-\Lambda_+t-\Lambda_-t'} + e^{-\Lambda_+t'-\Lambda_-t}\right] \\
&+ \frac{\alpha}{2\lambda m^2\omega^2}\frac{\Lambda_+e^{-\Lambda_-|t-t'|}-\Lambda_-e^{-\Lambda_+|t-t'|}}{\Lambda_+-\Lambda_-}
\end{aligned} \tag{4.44}$$

A contribuição de equilíbrio é a parte estacionária (terceira linha de (4.44)) em $t = t'$ que para o oscilador harmônico quântico é dada por:

$$C_+^{(s)}(t,t)_{stat} \;=\; \frac{\alpha}{2\lambda m^2\omega^2} \;=\; \frac{\hbar}{2m\omega}\coth\frac{\hbar\omega}{2T} \;=\; \left\langle s^2\right\rangle_{eq} \tag{4.45}$$

Então:

$$\alpha \;=\; \hbar\lambda m\omega\coth\frac{\hbar\omega}{2T} \tag{4.46}$$

como esperado conforme (1.3). Claramente, no limite $\hbar \to 0$, recuperamos o resultado clássico. Portanto, os critérios (**A**, **B**, **C**) como especificado na primeira seção deste capítulo, junto com ansatze (4.9, 4.39), reproduzir a proposta (1.3) de Bedeaux e Mazur para os ruídos η_s, η_p.

4.1.6 Teorema da Flutuação-Dissipação

Dados os resultados explícitos das subseções anteriores, podemos agora perguntar sobre a relação entre as partes estacionárias da função de correlação $C_+^{(s,p)}$ e da função resposta $R^{(s,p)}$. Empiricamente, encontramos no estado estacionário, usando a equação (4.46):

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial_\tau}C_+^{(s)}(\tau)_{stat} &= -\hbar\omega\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)R^{(s)}(\tau)\\
\frac{\partial}{\partial_\tau}C_+^{(p)}(\tau)_{stat} &= -\hbar\omega\coth\left(\frac{\hbar\omega}{2T}\right)R^{(p)}(\tau).
\end{aligned} \tag{4.47}$$

Observe inicialmente que a equação (4.47) que mostra a relação entre as funções de correlação e resposta não depende do observável. Além disso, estas relações não correspondem ao habitual teorema da flutuação-dissipação quântico (TFDQ), embora que no limite $\hbar \to 0$, o TFD (teorema da flutuação-dissipação) clássico seja recuperado. Isso significa que, a partir dos critérios mínimos formulados no inicio do capítulo 4, apenas os itens (**A**, **B**, **C**) são obedecidos e levam de fato à proposta (1.2,1.3), enquanto (**D**) só pode ser satisfeito no limite de $\hbar \to 0$. Portanto, a proposta (1.3) para o(s) ruído(s) leva, na melhor das hipóteses, a uma descrição semi-clássica do relaxamento.

Este exemplo ilustra explicitamente que o requisito das relações canônicas do comutador, apesar de reproduzir a fórmula de Kubo, por si só não é suficiente para garantir que o estado estacionário da dinâmica seja verdadeiramente um estado de equilíbrio quântico.

Além disso, as correlações de ruído (1.3) dependem explicitamente dos parâmetros m, ω, de modo que a proposta em [8, 7] é explicitamente dependente do modelo e só pode ser aplicada a sistemas de osciladores harmônicos.

Mais geralmente, os ansatz estudados nesta seção assumiram ruído δ-correlacionado desde o início. Enquanto isso certamente simplifica os cálculos, a origem física dessa suposição permanece incerta e vimos que a partir desse ansatz o FDT não é satisfeito.

5 CONSTRUÇÃO AXIOMÁTICA DAS EQUAÇÕES QUÂNTICAS DE LANGEVIN

5.1 Oscilador harmônico dissipativo quântico

Agora, generalizaremos a abordagem da seção anterior, de modo que todos os quatro critérios (**A**, **B**, **C**, **D**) sejam satisfeitos. Fisicamente, os ruídos η_s, η_p descrevem as propriedades do banho e seu acoplamento ao sistema. Se o banho for muito grande em relação ao sistema e as correlações do banho decaírem em uma escala de tempo muito mais rápida do que a escala de tempo típica do sistema, suas propriedades serão independentes do comportamento do sistema e o banho pode ser considerado estacionário. Portanto, as correlações de η_s, η_p podem ser encontradas a partir do comportamento estacionário do sistema acoplado ao banho de calor. A análise pode ser simplificada considerando o espaço de Fourier cuja transformada é definida por:

$$(\mathscr{F}s(t))(\nu) = \hat{s}(\nu) := \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{\mathbb{R}} dt\, e^{-\mathbf{i}\nu t} s(t). \tag{5.1}$$

As equações de movimento (1.2) são da forma (com $\lambda > 0$):

$$\mathbf{i}\nu\hat{s}(\nu) = \frac{1}{m}\hat{p}(\nu) + \hat{\eta}_s(\nu) \;\;,\;\; \mathbf{i}\nu\hat{p}(\nu) = -m\omega^2\hat{s}(\nu) - \lambda\hat{p}(\nu) + \hat{\eta}_p(\nu) \tag{5.2}$$

com solução formal:

$$\hat{s}(\nu) = \frac{\hat{\eta}_p(\nu)/m + (\mathbf{i}\nu + \lambda)\hat{\eta}_s(\nu)}{\omega^2 + \mathbf{i}\lambda\nu - \nu^2} \tag{5.3a}$$

$$\hat{p}(\nu) = \frac{\mathbf{i}\nu\hat{\eta}_p(\nu) - m\omega^2\hat{\eta}_s(\nu)}{\omega^2 + \mathbf{i}\lambda\nu - \nu^2}. \tag{5.3b}$$

Essa solução será a base de todos os cálculos.

5.1.1 Comutador para tempo iguais

A fim de determinarmos o comutador para tempo iguais $[s(t), p(t)]$, analisaremos os comutadores dos dois ruídos. Suponhamos:

$$\langle[\eta_s(t), \eta_s(t')]\rangle = \langle[\eta_p(t), \eta_p(t')]\rangle = 0, \quad \langle[\eta_s(t), \eta_p(t')]\rangle = \mathbf{i}\hbar\kappa(t - t'). \tag{5.4}$$

Conforme mostrado em [5], exigir as condições (5.4), onde em adição, a função indeterminada $\kappa(t) = \kappa(-t)$ deve ser simétrica, é a maneira mais simples para garantirmos a validade da formula de Kubo.

Pela definição (5.1), no espaço de Fourier temos que:

$$\langle[\hat{\eta}_s(\nu), \hat{\eta}_p(\nu')]\rangle \;\; = \;\; \delta(\nu+\nu')\mathbf{i}\hbar\sqrt{2\pi}\;\hat{\kappa}(\nu). \tag{5.5}$$

Similarmente, para o comutador spin-momento, esperamos que a forma estacionária

$$\langle[\hat{s}(\nu), \hat{p}(\nu')]\rangle = \delta(\nu+\nu')\mathbf{i}\hbar\sqrt{2\pi}\;\hat{K}(\nu) \;\;,\;\; \langle[s(t), p(t')]\rangle = \mathbf{i}\hbar K(t-t'), \tag{5.6}$$

onde $K(t)$ será determinada com $K(0) = 1$, reproduza o comutador canônico para tempos iguais requerido de acordo com o critério (**A**).

Inserindo a solução formal (5.3) em (5.6) e usando (5.4):

$$\hat{K}(\nu) = \frac{\nu^2 - \mathbf{i}\lambda\nu + \omega^2}{(\nu^2 - \mathbf{i}\lambda\nu - \omega^2)(\nu^2 + \mathbf{i}\lambda\nu - \omega^2)}\;\hat{\kappa}(\nu). \tag{5.7}$$

Então $K(t) = (f \star \kappa)(t)$ é uma convolução.

Se assumirmos que $\hat{\kappa}(\nu) = \kappa_0$ é uma constante, nós obtemos $K(0) = \sqrt{2\pi}\;\kappa_0\lambda^{-1}$ tal que a condição de normalização $K(0) = 1$ implica que:

$$\sqrt{2\pi}\;\kappa_0 \;\; = \;\; \lambda. \tag{5.8}$$

Temos então os comutadores de ruído não-nulos:

$$\langle[\eta_s(t), \eta_p(t')]\rangle = \mathbf{i}\hbar\lambda\delta(t-t'), \quad \langle[\hat{\eta}_s(\nu), \hat{\eta}_p(\nu')]\rangle = \delta(\nu+\nu')\mathbf{i}\hbar\lambda. \tag{5.9}$$

Sob as suposições simplificadoras realizadas, este comutador é o mesmo proposto por Bedeaux e Mazur [8, 7].

5.1.2 Função resposta

Adicionando uma pertubação ao Hamiltoniano:

$$H \;\; = \;\; p^2/2m + m\omega^2 s^2 - hs + kp, \tag{5.10}$$

as funções respostas são as mesmas calculadas no capítulo anterior.

Portanto, das equações (4.25) e (4.31), obtemos as funções respostas de spin e momento:

$$\hat{R}^{(s)}(\nu) \;\; = \;\; -\frac{1}{m\sqrt{2\pi}}\frac{1}{\nu^2 - \mathbf{i}\lambda\nu - \omega^2} = \frac{1}{m^2\omega^2}\hat{R}^{(p)}(\nu) \tag{5.11}$$

5.1.3 Fórmula do Kubo

Usando a equação (5.3), temos que:

$$C_-^{(a)}(\nu,\nu') = \langle[\hat{a}(\nu), \hat{a}(\nu')]\rangle = \delta(\nu+\nu')\hat{C}_-^{(a)}(\nu) \tag{5.12}$$

com $a = s, p$ e onde:

$$\hat{C}_{-}^{(s)}(\nu) = -\frac{\hbar\lambda}{m}\frac{\nu}{(\nu^2 - \mathbf{i}\lambda\nu - \omega^2)(\nu^2 + \mathbf{i}\lambda\nu - \omega^2)} = \frac{1}{m^2\omega^2}\,\hat{C}_{-}^{(p)}(\nu). \tag{5.13}$$

Seja $\tau = t - t' > 0$. Verifiquemos a validação da fórmula do Kubo (4.34), que no espaço de Fourier é da forma:

$$\begin{aligned}\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{\mathbb{R}} d\nu\, e^{\mathbf{i}\nu(t-t')}\hat{R}(\nu) &\doteq \frac{2\mathbf{i}}{\hbar}\frac{1}{2\pi}\int_{\mathbb{R}^2} d\nu d\nu'\, e^{\mathbf{i}\nu t + \mathbf{i}\nu' t'}\,\langle[\hat{s}(\nu), \hat{s}(\nu')]\rangle \\ &= \frac{2\mathbf{i}}{\hbar}\frac{1}{2\pi}\int_{\mathbb{R}} d\nu\, e^{\mathbf{i}\nu t + \mathbf{i}\nu' t'}\delta(\nu + \nu')\hat{C}_{-}(\nu) \\ &= \frac{2\mathbf{i}}{\hbar}\frac{1}{2\pi}\int_{\mathbb{R}} d\nu\, e^{\mathbf{i}\nu(t-t')}\hat{C}_{-}(\nu),\end{aligned} \tag{5.14}$$

onde usamos a igualdade $\langle[\hat{s}(\nu), \hat{s}(\nu')]\rangle =: \delta(\nu + \nu')\,\hat{C}_{-}(\nu)$ na segunda linha e $\hat{C}_{-}^{(s)}(\nu)$ é dado em (5.13).

No plano ν-complexo essa função tem polos simples em $\nu_{\pm,\pm} = \pm\frac{\mathbf{i}\lambda}{2} \pm \mathbf{i}\sqrt{\lambda^2/4 - \omega^2}$. Destes, $\nu_{+,\pm}$ estão no semi-plano superior e $\nu_{-,\pm}$ estão no semi-plano inferior. Além disso, nos polos $\nu = nu_{+,\pm}$, tem-se:

$$\left.\frac{\nu}{\nu^2 + \mathbf{i}\lambda\nu - \omega^2}\right|_{\nu=\nu_{+,\pm}} = \frac{1}{2\mathbf{i}\lambda}. \tag{5.15}$$

Ao calcular a integral em (5.14) através do teorema dos resíduos, o contorno C será fechado no plano superior e somente o resíduo em $\nu_{+,\pm}$ terá uma contribuição. Portanto:

$$\begin{aligned}R^{(s)}(\tau) &= \frac{2\mathbf{i}}{\hbar}\,\frac{1}{2\pi}\oint_C d\nu\, e^{\mathbf{i}\nu\tau}\frac{\hbar\lambda}{m}\frac{\nu}{(\nu^2 + \mathbf{i}\lambda\nu - \omega^2)}\frac{-1}{(\nu^2 - \mathbf{i}\lambda\nu - \omega^2)} \\ &= \frac{2\mathbf{i}}{\hbar}\,\frac{1}{2\pi}\frac{\hbar\lambda}{m}\frac{1}{2\mathbf{i}\lambda}\oint_C d\nu\, e^{\mathbf{i}\nu\tau}\frac{-1}{(\nu^2 - \mathbf{i}\lambda\nu - \omega^2)} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{\mathbb{R}} d\nu\, e^{\mathbf{i}\nu\tau}\frac{1}{m\sqrt{2\pi}}\frac{-1}{(\nu^2 - \mathbf{i}\lambda\nu - \omega^2)} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{\mathbb{R}} d\nu\, e^{\mathbf{i}\nu\tau}\hat{R}^{(s)}(\nu)\end{aligned} \tag{5.16}$$

como queríamos demonstrar. Observe que, na primeira linha, utilizamos a equação (5.13); na segunda linha o resíduo em $\nu = \nu_{+,\pm}$ foram computados de acordo com (5.15) e finalmente a função de resposta (5.11) foi determinada. Naturalmente, a contribuição do semi-plano superior é insignificante.

Isso mostra a validade da fórmula de Kubo para o spin s. A validade para o momento p agora é trivial e segue de (5.11) e (5.13).

Em linhas gerais:
Se para o oscilador harmônico quântico dissipativo, as únicas correlações de ruídos não-nulos são dadas por (5.9), então:

(i) para todo tempo, $t \geq 0$, o comutador canônico para tempos iguais $\langle [s(t), p(t)] \rangle = \mathbf{i}\hbar$ é satisfeito;

(ii) para toda diferença de tempo $\tau = t - t' > 0$ a fórmula de Kubo para ambos, spin s e momento p são válidas.

Com isso os critérios $(\mathbf{A}, \mathbf{B})$ são satisfeitos.

5.1.4 Anti-commutadores e teorema do virial

Resta-nos analisar as formas admissíveis dos anti-correlatores de ruído. Como o banho é estacionário, podemos considerar a forma:

$$\begin{aligned} \langle \{\eta_s(t), \eta_s(t')\} \rangle &= 2\beta(t-t') \ , \\ \langle \{\eta_p(t), \eta_p(t')\} \rangle &= 2\alpha(t-t') \ , \ \langle \{\eta_s(t), \eta_p(t')\} \rangle = 2\gamma(t-t'), \end{aligned} \tag{5.17}$$

onde as funções $\alpha(t) = \alpha(-t)$, $\beta(t) = \beta(-t)$ e $\gamma(t)$ devem ser determinadas. No espaço de Fourier (5.17) é da forma:

$$\begin{aligned} \langle \{\hat{\eta}_s(\nu), \hat{\eta}_s(\nu')\} \rangle &= \delta(\nu+\nu')\sqrt{2\pi}\ 2\hat{\beta}(\nu) \\ \langle \{\hat{\eta}_p(\nu), \hat{\eta}_p(\nu')\} \rangle &= \delta(\nu+\nu')\sqrt{2\pi}\ 2\hat{\alpha}(\nu) \\ \langle \{\hat{\eta}_s(\nu), \hat{\eta}_p(\nu')\} \rangle &= \delta(\nu+\nu')\sqrt{2\pi}\ 2\hat{\gamma}(\nu). \end{aligned} \tag{5.18}$$

Com a definição:

$$C_+^{(s)}(\nu, \nu') = \langle \{\hat{s}(\nu), \hat{s}(\nu')\} \rangle = \delta(\nu+\nu')\hat{C}_+^{(s)}(\nu) \tag{5.19a}$$

$$C_+^{(p)}(\nu, \nu') = \langle \{\hat{p}(\nu), \hat{p}(\nu')\} \rangle = \delta(\nu+\nu')\hat{C}_+^{(p)}(\nu) \tag{5.19b}$$

temos de (5.3):

$$\hat{C}_+^{(s)}(\nu) := \frac{\frac{\hat{\alpha}(\nu)}{m^2} + (\lambda^2+\nu^2)\hat{\beta}(\nu) + \frac{\lambda}{m}\left(\hat{\gamma}(\nu) + \hat{\gamma}(-\nu)\right) + \frac{\mathbf{i}\nu}{m}\left(\hat{\gamma}(\nu) - \hat{\gamma}(-\nu)\right)}{(\nu^2 - \mathbf{i}\lambda\nu - \omega^2)(\nu^2 + \mathbf{i}\lambda\nu - \omega^2)} \tag{5.20}$$

$$\hat{C}_+^{(p)}(\nu) := \frac{\nu^2\hat{\alpha}(\nu) + m^2\omega^4\hat{\beta}(\nu) + \mathbf{i}m\omega^2\nu\left(\hat{\gamma}(\nu) - \hat{\gamma}(-\nu)\right)}{(\nu^2 - \mathbf{i}\lambda\nu - \omega^2)(\nu^2 + \mathbf{i}\lambda\nu - \omega^2)} \tag{5.21}$$

O teorema do virial afirma que:

$$\hat{C}_+^{(p)}(\nu) = m^2\omega^2\hat{C}_+^{(s)}(\nu) \tag{5.22}$$

Então, substituindo (5.20) na equação acima, temos que:

$$(\nu^2 - \omega^2)\hat{\alpha}(\nu) + (m^2\omega^4 - m^2\omega^2(\lambda^2+\nu^2))\hat{\beta}(\nu) = \lambda m\omega^2\left(\hat{\gamma}(\nu) + \hat{\gamma}(-\nu)\right), \tag{5.23}$$

onde

$$\hat{\alpha}(\nu) = \hat{\beta}(\nu) = 0 \ , \ \ \hat{\gamma}(\nu) + \hat{\gamma}(-\nu) = 0 \tag{5.24}$$

é a condição mais simples que satisfaz a equação acima.

Observe que a condição (5.24) não depende dos parâmetros do modelo m, ω. Qualquer outra solução deve conter pelo menos um deles. Desde que estamos procurando por uma caracterização dos ruídos η_s, η_p que devem ser independentes do modelo físico específico em estudo, nós reteremos a solução (5.24) como nossa implementação da condição **C**.

Inserindo (5.24), a função de correlação é dada por:

$$\begin{aligned} \hat{C}_+^{(s)}(\nu) &= \frac{2\mathbf{i}}{m} \frac{\nu\hat{\gamma}(\nu)}{(\nu^2 - \mathbf{i}\lambda\nu - \omega^2)(\nu^2 + \mathbf{i}\lambda\nu - \omega^2)} \\ &= \frac{1}{m^2\omega^2}\, \hat{C}_+^{(p)}(\nu). \end{aligned} \tag{5.25}$$

5.1.5 Teorema da flutuação-dissipação quântico

A forma da função anti-simétrica $\hat{\gamma}(\nu) = -\hat{\gamma}(-\nu)$ é determinada pelo QFDT. Como mostrado em [5], no espaço de Fourier:

$$\frac{\hat{C}_+^{(s)}(\nu)}{\hat{C}_-^{(s)}(\nu)} = \frac{\hat{C}_+^{(p)}(\nu)}{\hat{C}_-^{(p)}(\nu)} = -\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \coth \frac{\hbar\nu}{2T} \tag{5.26}$$

Disto, por (5.13) e (5.25) temos a seguinte condição:

$$2\mathbf{i}\sqrt{2\pi}\, \hat{\gamma}(\nu) = \hbar\lambda \coth \frac{\hbar\nu}{2T} \tag{5.27}$$

que também implementa a condição (**D**). Isso significa que os únicos comutadores e anti-comutadores não-nulos dos ruídos são:

$$\langle\{\hat{\eta}_s(\nu), \hat{\eta}_p(\nu')\}\rangle = \frac{\hbar\lambda}{\mathbf{i}} \coth\left(\frac{\hbar\nu}{2T}\right) \delta(\nu + \nu') \ , \ \ \langle[\hat{\eta}_s(\nu), \hat{\eta}_p(\nu')]\rangle = \mathbf{i}\hbar\lambda\, \delta(\nu + \nu') \tag{5.28}$$

Note que, eles dependem da hipótese de dissipação ôhmica e das propriedades do banho (aqui a temperatura T) e uma vez que não contêm os parâmetros específicos m, ω do modelo de oscilador harmônico que usamos para derivá-los, eles podem ser aplicáveis em geral.

Escrevendo as equações de movimento (1.2) como uma equação de Langevin de segunda ordem [30, 29]:

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} s(t) + \lambda \frac{\partial}{\partial t} s(t) + \omega^2 s(t) = \zeta(t) \tag{5.29}$$

onde ζ é definido por:

$$\zeta(t) = \frac{1}{m}\eta_p(t) + \lambda\eta_s(t) + \frac{\partial}{\partial t}\eta_s(t) \tag{5.30}$$

O segundo momento do "ruído composto", $\zeta(t)$, é facilmente determinado. No espaço de Fourier é dado por:

$$\left\langle \left\{ \hat{\zeta}(\nu), \hat{\zeta}(\nu') \right\} \right\rangle = \frac{2\hbar\lambda}{m}\,\nu \coth\left(\frac{\hbar\nu}{2T}\right)\,\delta(\nu+\nu') \;\;,\;\; \left\langle \left[\hat{\zeta}(\nu), \hat{\zeta}(\nu') \right] \right\rangle = -\frac{2\hbar\lambda}{m}\,\nu\,\delta(\nu+\nu') \tag{5.31}$$

e então para o tempo t:

$$\langle \{\zeta(t), \zeta(t')\} \rangle = \frac{2\hbar\lambda}{\pi m}\int_0^\infty d\nu\,\nu \coth\left(\frac{\hbar\nu}{2T}\right)\cos(\nu(t-t')) \;=:\; \frac{\hbar\lambda}{\pi m}\,I\left(\frac{\hbar}{2T}, t-t'\right) \tag{5.32a}$$

$$\langle [\zeta(t), \zeta(t')] \rangle = \frac{2\hbar\lambda}{\mathbf{i}\pi m}\int_0^\infty d\nu\,\nu \sin(\nu(t-t')) \;=\; \frac{2\mathbf{i}\hbar\lambda}{m}\,\delta'(t-t') \tag{5.32b}$$

que corresponde a forma da média do ruído proposta por Ford *et al.* [29, eqs. (2.2,2.3)].

Finalmente, aplicando a anti-transformada em (5.28):

$$\left\langle \left\{ \eta_s(t), \eta_p(t') \right\} \right\rangle = \lambda T \coth\left(\frac{\pi T}{\hbar}(t-t')\right) \;\;,\;\; \left\langle \left[\eta_s(t), \eta_p(t') \right] \right\rangle = \mathbf{i}\hbar\lambda\,\delta(t-t') \tag{5.33}$$

Assim, o QFDT implica em correlações de ruídos não markovianos.

Em linhas gerais: *Se os únicos segundos momentos não vazios dos ruídos são dados por (5.33) (ou equivalentemente por (5.28)), então os quatros critérios (**A, B, C, D**) para a dinâmica quântica do oscilador harmônico (1.2) são satisfeitos.*

5.2 **Aplicação**

5.2.1 Modelo Esférico Quântico

Com o intuito de corrigir o comportamento em baixas temperaturas do modelo esférico clássico proposto em [10], o modelo esférico quântico (MSQ) tem sido extensivamente estudado. O comportamento crítico no equílibrio é bem conhecido [41], [42], [51], assim como o comportamento fora do equilíbrio para modelos quânticos isolado [49], [38]. O comportamento em $T = 0$ descrito pela dinâmica de Lindblad também foi estudado [52].

O referido modelo é definido através do Hamiltoniano clássico, introduzindo um termo de energia cinética que contém novas variáveis, P_n, variáveis de momento, canonicamente conjugada as variáveis de spins S_n, ambas consideradas agora como operadores e satisfazendo as seguintes relações de comutação:

$$[S_n, P_n] = i\hbar\delta_{n,m}, \;\; [S_n, S_m] = [P_n, P_m] = 0, \tag{5.34}$$

onde $\delta_{n,m}$ é o delta de Kronecker.

Em linhas gerais, o Hamiltoniano do MSQ é dado por:

$$\mathcal{H} = \sum_{n\in\Gamma_N}\left(-J\sum_{j=1}^{d} S_n S_{n+j} - BS_n + \frac{\mu}{2}S_n^2 + \frac{g}{2}P_n^2\right), \tag{5.35}$$

onde B é o campo magnético, $J>0$ é a constante de acoplamento ferromagnético, $\mu=\mu(t)$ é o multiplicador de Lagrange medindo o vínculo esférico:

$$\sum_{n\in\Gamma_N}\langle S_n^2(t)\rangle = N, \tag{5.36}$$

$g>0$ é o parâmetro quântico que controla a força das flutuações quânticas e Γ_N é uma rede hipercúbica d-dimensional com N^d sítios.

Na próxima seção apresentaremos as equações de Langevin conforme propostas descritas no anterior.

5.2.2 Equações de Langevin para o modelo esférico quântico

A dinâmica do modelo é governada pelas $2N$ equações de Langevin quânticas [9]:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}S_k(t) &= gP_k(t) + (\eta_s(t))_k,\\
\frac{d}{dt}P_k(t) &= \frac{J}{g}\sum_k\sum_{j=1}^{d} S_{k+j}(t) - \frac{1}{g}\mu(t)S_k(t) - \lambda P_k(t) + (\eta_p(t))_k,
\end{aligned} \tag{5.37}$$

que no espaço de Fourier correspondem a:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\hat{S}(t,\mathbf{q}) &= g\hat{P}(t,\mathbf{q}) + \hat{\eta}_s(t,\mathbf{q}),\\
\frac{\partial}{\partial t}\hat{P}(t,\mathbf{q}) &= -\frac{1}{g}(\mathfrak{z}(t)+\omega(\mathbf{q}))\hat{S}(t,\mathbf{q}) - \lambda\hat{P}(t,\mathbf{q}) + \hat{\eta}_p(t,\mathbf{q}),
\end{aligned} \tag{5.38}$$

onde $\hat{S}$, $\hat{P}$... são transformadas de Fourier definidas em (5.1), $\mathfrak{z}(t)$ é um termo do multiplicador de Lagrange parametrizado convenientemente por $\mu(t)=\mathfrak{z}(t)+2d$, $\omega(\mathbf{q}) = 2\sum_{i=1}^{d}(1-\cos(q_i))$ e $\eta_p(t)$ e $\eta_s(t)$ são os dois ruídos distintos satisfazendo os correlatores (1.3).

Note que, o parâmetro esférico $\mathfrak{z}(t)$ é dependente do tempo, portanto, não é possível obter a solução explícita de (5.38) pelos métodos conhecidos na literatura para sistemas de equações diferenciais. No momento, tal solução é um problema a ser investigado futuramente.

A fim de simplificarmos o sistema (5.38), vamos considerar uma mudança de variáveis da forma:

$$\tau = gt, \quad \hat{\eta}_s(t,\mathbf{q}) = g^{\frac{3}{2}}\tilde{\eta}_s(\tau,\mathbf{q}), \quad \hat{\eta}_p(t,\mathbf{q}) = g^{-\frac{1}{2}}\tilde{\eta}_p(\tau,\mathbf{q}) \quad \hat{S}(t,\mathbf{q}) = g^{\frac{1}{2}}\tilde{S}(\tau,\mathbf{q}). \tag{5.39}$$

Do sistema (5.38):

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}\hat{S}(t,\mathbf{q}) - \frac{\partial}{\partial t}\hat{\eta}_s(t,\mathbf{q}) \;=\; -(\mathfrak{z}(t)+\omega(\mathbf{q}))\hat{S}(t,\mathbf{q}) - \lambda\frac{\partial}{\partial t}\hat{S}(t,\mathbf{q}) + \lambda\hat{\eta}_s(t,\mathbf{q}) + g\hat{\eta}_p(t,\mathbf{q}). \tag{5.40}$$

Pela mudança de variáveis (5.39):

$$\begin{aligned} g^2\frac{\partial^2}{\partial\tau^2}\hat{S}(\tau,\mathbf{q}) - g^2\frac{\partial}{\partial\tau}\hat{\eta}_s(t,\mathbf{q}) &= -(\mathfrak{z}(\tau)+\omega(q))\tilde{S}(\tau,\mathbf{q}) - \lambda g\frac{\partial}{\partial\tau}\tilde{S}(\tau,\mathbf{q}) \\ &+ \lambda g\tilde{\eta}_s(\tau,\mathbf{q}) + g\tilde{\eta}_p(\tau,\mathbf{q}). \end{aligned} \tag{5.41}$$

Uma vez que estamos no caso de forte-amortização, consideremos $\lambda\to\infty$ de modo que $\sigma=\lambda g$ é fixado. Considerando para tempos longos o limite, $g\to 0$, $t\to\infty$ com $\tau=gt$ fixo:

$$\sigma\frac{\partial}{\partial\tau}\tilde{S}(\tau,\mathbf{q}) + (\mathfrak{z}(\tau)+\omega(q))\tilde{S}(\tau,\mathbf{q}) \;=\; \tilde{\zeta}(\tau,\mathbf{q}), \tag{5.42}$$

com $\tilde{\zeta}(\tau,\mathbf{q}) = g^{\frac{1}{2}}\tilde{\eta}_p(\tau,\mathbf{q}) + \lambda g\tilde{\eta}_s(\tau,\mathbf{q})$.

A equação (5.42) corresponde a equação de Langevin semi-clássica, cujo ruído, $\tilde{\zeta}(\tau,\mathbf{q})$ satisfaz:

$$\langle\tilde{\zeta}(\tau,\mathbf{q})\tilde{\zeta}(\tau',\mathbf{q}')\rangle \;=\; \sigma\hbar\sqrt{\mathfrak{z}(\tau)+\omega(\mathbf{q})}\coth\left(\frac{\hbar\sqrt{\mathfrak{z}(\tau)+\omega(\mathbf{q})}}{2T}\right)\delta(\tau-\tau')\delta(\mathbf{q}+\mathbf{q}'). \tag{5.43}$$

Na equação acima temos dois casos a considerar:

(a) $\underline{T\to\infty}$. Neste caso, a equação (5.43) é da forma: $\langle\eta(\tau,\mathbf{q})\eta(\tau',\mathbf{q}')\rangle = 2T\sigma\delta(\tau-\tau')\delta(\mathbf{q}+\mathbf{q}')$ e a equação (5.42) descreve a relaxação para o equilíbrio térmico clássico. Como esperado, para temperaturas suficientemente altas, retornamos o sistema efetivamente clássico. O resultado obtido aparenta ser análogo ao comportamento semi-clássico do modelo esférico quântico com a dinâmica de Lindblad [52].

(b) $\underline{T\to 0}$. Neste regime, a correlação para os ruídos (5.43) é da forma:

$$\langle\eta(\tau,\mathbf{q})\eta(\tau',\mathbf{q}')\rangle \;=\; \sigma\hbar\sqrt{\mathfrak{z}(\tau)+\omega(\mathbf{q})}\;\delta(\tau-\tau')\delta(\mathbf{q}+\mathbf{q}'). \tag{5.44}$$

Portanto, em temperatura nula, o modelo mostra algum novo tipo de comportamento não-clássico, mas que vem de uma dinâmica markoviana. Detalhes serão investigados futuramente.

5.3 Discussão e Perspectiva

Uma tentativa para uma construção axiomática das equações quânticas de Langevin baseada nos quatro requisitos físicos foi exibida. As equações de movimento dos osciladores

harmônicos (1.2) foram usadas como um suporte para derivar os segundos momentos dos dois ruídos η_s, η_p. Esta forma foi motivada pelo estudo de Bedeaux e Mazur [7, 8], embora se tenha mostrado que a sua proposta específica (1.3), que é markoviana, deve ser visto como uma descrição semi-clássica, já que satisfaz apenas os critérios (A, B, C) enquanto a condição (D) só pode ser satisfeita no limite clássico $\hbar \to 0$. Além disso, as correlações de ruído dependem dos parâmetros específicos, m, ω do modelo.

Uma escolha possível para as correlações entre os ruídos satisfazendo os quatro critérios foi apresentada com aplicabilidade aos osciladores . As equações de Langevin para o modelo esférico quântico são exibidas e a solução dessas equações serão investigadas em um porblema futuro.

REFERÊNCIAS

[1] Ralph H Abraham and Christopher D Shaw. *Dynamics-The geometry of behavior*. Aerial Press, 1983. Citado na página 44.

[2] Kathleen T Alligood, Tim D Sauer, James A Yorke, and JD Crawford. Chaos: An introduction to dynamical systems. *Physics Today*, 50:67, 1997. Citado na página 44.

[3] N Ananikian and V Hovhannisyan. Magnetic properties, lyapunov exponent and superstability of the spin-12 ising–heisenberg model on a diamond chain. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 392(10):2375–2383, 2013. Citado na página 46.

[4] Rúbia Araujo, FAN Santos, L H Miranda Filho, and MD Coutinho-Filho. Dynamics of the hmf with a magnetic field. *Em preparação.* Citado 3 vezes nas páginas 18, 30 e 38.

[5] Rúbia Araújo, Sascha Wald, and Malte Henkel. Axiomatic construction of quantum langevin equations. *arXiv preprint arXiv:1809.08975*, 2018. Citado 2 vezes nas páginas 58 e 62.

[6] Julien Barré and Thierry Dauxois. Lyapunov exponents as a dynamical indicator of a phase transition. *EPL (Europhysics Letters)*, 55(2):164, 2001. Citado na página 25.

[7] D Bedeaux. Non-equilibrium thermodynamics for quantum systems. *Techn. Mechanik* ***22***, 89, 2002. Citado 7 vezes nas páginas 15, 16, 47, 54, 56, 59 e 66.

[8] D Bedeaux and P Mazur. Mesoscopic non-equilibrium thermodynamics for quantum systems. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 298(1-2):81–100, 2001. Citado 8 vezes nas páginas 15, 16, 47, 49, 54, 56, 59 e 66.

[9] D Bedeaux and P Mazur. Mesoscopic non-equilibrium thermodynamics for quantum systems. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 298(1-2):81–100, 2001. Citado na página 64.

[10] Theodore H Berlin and Mark Kac. The spherical model of a ferromagnet. *Physical Review*, 86(6):821, 1952. Citado na página 63.

[11] Tassos Bountis and Haris Skokos. *Complex Hamiltonian Dynamics*, volume 10. Springer Science & Business Media, 2012. Citado na página 44.

[12] Lando Caiani, Lapo Casetti, Cecilia Clementi, Giulio Pettini, Marco Pettini, and Raoul Gatto. Geometry of dynamics and phase transitions in classical lattice φ 4 theories. *Physical Review E*, 57(4):3886, 1998. Citado na página 25.

[13] Lando Caiani, Lapo Casetti, Cecilia Clementi, and Marco Pettini. Geometry of dynamics, lyapunov exponents, and phase transitions. *Physical review letters*, 79(22):4361, 1997. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 25.

[14] H. J. Carmichael. *Statistical methods in quantum optics*, volume 1. Springer, 1999. Citado na página 15.

[15] Lapo Casetti, Cecilia Clementi, and Marco Pettini. Riemannian theory of hamiltonian chaos and lyapunov exponents. *Physical Review E*, 54(6):5969, 1996. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 25.

[16] Lapo Casetti, Roberto Livi, and Marco Pettini. Gaussian model for chaotic instability of hamiltonian flows. *Physical review letters*, 74(3):375, 1995. Citado 3 vezes nas páginas 14, 17 e 22.

[17] Lapo Casetti, Marco Pettini, and EGD Cohen. Geometric approach to hamiltonian dynamics and statistical mechanics. *Physics Reports*, 337(3):237–341, 2000. Citado 3 vezes nas páginas 14, 22 e 23.

[18] Monica Cerruti-Sola, Guido Ciraolo, Roberto Franzosi, and Marco Pettini. Riemannian geometry of hamiltonian chaos: Hints for a general theory. *Physical Review E*, 78(4):046205, 2008. Citado na página 25.

[19] Ricardo Chaves. Almanque gaúcho. *Zero Hora*. Citado na página 7.

[20] Leticia F Cugliandolo. Dynamics of glassy systems. *arXiv preprint cond-mat/0210312*, 2002. Citado na página 52.

[21] Thierry Dauxois, Vito Latora, Andrea Rapisarda, Stefano Ruffo, and Alessandro Torcini. The hamiltonian mean field model: from dynamics to statistical mechanics and back. In *Dynamics and Thermodynamics of Systems with Long-Range Interactions*, pages 458–487. Springer, 2002. Citado na página 17.

[22] Thierry Dauxois, Stefano Ruffo, Ennio Arimondo, and Martin Wilkens. Dynamics and thermodynamics of systems with long-range interactions: An introduction. In *Dynamics and Thermodynamics of Systems with Long-Range Interactions*, pages 1–19. Springer, 2002. Citado na página 20.

[23] Jay Robert Dorfman. *An introduction to chaos in nonequilibrium statistical mechanics*. Number 14. Cambridge University Press, 1999. Citado na página 44.

[24] J-P Eckmann and David Ruelle. Ergodic theory of chaos and strange attractors. In *The Theory of Chaotic Attractors*, pages 273–312. Springer, 1985. Citado na página 20.

[25] J-P Eckmann and David Ruelle. Ergodic theory of chaos and strange attractors. In *The Theory of Chaotic Attractors*, pages 273–312. Springer, 1985. Citado na página 44.

[26] Arthur Erdélyi. Asymptotic expansions of fourier integrals involving logarithmic singularities. *Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics*, 4(1):38–47, 1956. Citado na página 31.

[27] Annibal Figueiredo, TM Rocha Filho, and MA Amato. Ergodicity and central-limit theorem in systems with long-range interactions. *EPL (Europhysics Letters)*, 83(3):30011, 2008. Citado na página 17.

[28] Marie-Christine Firpo. Analytic estimation of the lyapunov exponent in a mean-field model undergoing a phase transition. *Physical Review E*, 57(6):6599, 1998. Citado 4 vezes nas páginas 17, 21, 26 e 29.

[29] George W Ford, John T Lewis, and RF O'connell. Quantum langevin equation. *Physical Review A*, 37(11):4419, 1988. Citado 2 vezes nas páginas 62 e 63.

[30] GW Ford, M Kac, and P Mazur. Statistical mechanics of assemblies of coupled oscillators. *Journal of Mathematical Physics*, 6(4):504–515, 1965. Citado na página 62.

[31] Ernst Hairer, Christian Lubich, and Gerhard Wanner. Geometric numerical integration illustrated by the störmer/verlet method. *Acta Numerica*, 12:399–450, 2003. Citado na página 38.

[32] V Latora, A Rapisarda, and S Ruffo. Chaotic dynamics and superdiffusion in a hamiltonian system with many degrees of freedom. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 280(1-2):81–86, 2000. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 45.

[33] Vito Latora, Andrea Rapisarda, and Stefano Ruffo. Lyapunov instability and finite size effects in a system with long-range forces. *Physical review letters*, 80(4):692, 1998. Citado 3 vezes nas páginas 17, 28 e 45.

[34] Vito Latora, Andrea Rapisarda, and Stefano Ruffo. Chaos and statistical mechanics in the hamiltonian mean field model. *Physica D: Nonlinear Phenomena*, 131(1-4):38–54, 1999. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 28.

[35] Vito Latora, Andrea Rapisarda, and Stefano Ruffo. Superdiffusion and out-of-equilibrium chaotic dynamics with many degrees of freedoms. *Physical Review Letters*, 83(11):2104, 1999. Citado 2 vezes nas páginas 28 e 45.

[36] JL Lebowitz, JK Percus, and L Verlet. Ensemble dependence of fluctuations with application to machine computations. *Physical Review*, 153(1):250, 1967. Citado na página 26.

[37] Ricardo Mañé. *Introdução à teoria ergódica*, volume 14. Instituto de Matemática Pura e Aplicada, 1983. Citado na página 44.

[38] Anna Maraga, Alessio Chiocchetta, Aditi Mitra, and Andrea Gambassi. Aging and coarsening in isolated quantum systems after a quench: Exact results for the quantum o (n) model with n→. *Physical Review E*, 92(4):042151, 2015. Citado na página 63.

[39] N. Metropolis, A. W. Rosenbluth, M. N. Rosenbluth, A. H. Teller, and E. Teller. Equation of state calculations by fast computing machines. *jcp*, 21:1087–1092, 1953. Citado na página 38.

[40] LH Miranda Filho, MA Amato, and TM Rocha Filho. Lyapunov exponent and criticality in the hamiltonian mean field model. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2018(3):033204, 2018. Citado 2 vezes nas páginas 38 e 45.

[41] Th M Nieuwenhuizen. Quantum description of spherical spins. *Physical review letters*, 74(21):4293, 1995. Citado na página 63.

[42] MH Oliveira, EP Raposo, and MD Coutinho-Filho. Quantum spherical spin model on hypercubic lattices. *Physical Review B*, 74(18):184101, 2006. Citado na página 63.

[43] Valery Iustinovich Oseledets. A multiplicative ergodic theorem. characteristic ljapunov, exponents of dynamical systems. *Trudy Moskovskogo Matematicheskogo Obshchestva*, 19:179–210, 1968. Citado na página 20.

[44] Marco Pettini. Geometrical hints for a nonperturbative approach to hamiltonian dynamics. *Physical Review E*, 47(2):828, 1993. Citado 3 vezes nas páginas 14, 17 e 22.

[45] Marco Pettini. *Geometry and topology in Hamiltonian dynamics and statistical mechanics*, volume 33. Springer Science & Business Media, 2007. Citado 3 vezes nas páginas 14, 22 e 29.

[46] Alessandro Pluchino and Andrea Rapisarda. Nonergodicity and central limit behavior for systems with long-range interactions. 6802:68020W, 2008. Citado na página 17.

[47] FAN Santos and MD Coutinho-Filho. Topology, symmetry, phase transitions, and noncollinear spin structures. *Physical Review E*, 80(3):031123, 2009. Citado 3 vezes nas páginas 8, 9 e 17.

[48] FAN Santos, LCB da Silva, and MD Coutinho-Filho. Topological approach to microcanonical thermodynamics and phase transition of interacting classical spins. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2017(1):013202, 2017. Citado 3 vezes nas páginas 17, 31 e 38.

[49] Bruno Sciolla and Giulio Biroli. Quantum quenches, dynamical transitions, and off-equilibrium quantum criticality. *Physical Review B*, 88(20):201110, 2013. Citado na página 63.

[50] Francisco A Tamarit, Germán Maglione, Daniel A Stariolo, and Celia Anteneodo. Quasistationary trajectories of the mean-field x y hamiltonian model: A topological perspective. *Physical Review E*, 71(3):036148, 2005. Citado na página 17.

[51] Sascha Wald and Malte Henkel. Quantum phase transition in the spin-anisotropic quantum spherical model. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2015(7):P07006, 2015. Citado na página 63.

[52] Sascha Wald, Gabriel T Landi, and Malte Henkel. Lindblad dynamics of the quantum spherical model. *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2018(1):013103, 2018. Citado 2 vezes nas páginas 63 e 65.

[53] Ulrich Weiss. *Quantum dissipative systems*, volume 13. World scientific, 2012. Citado na página 52.

[54] Yoshiyuki Y Yamaguchi. Slow relaxation at critical point of second order phase transition in a highly chaotic hamiltonian system. *Progress of Theoretical Physics*, 95(4):717–731, 1996. Citado na página 28.