

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA  
INSTITUTO DE FÍSICA

TESE DE DOUTORADO

**ESTUDO ANALÍTICO DE MODELOS NÃO LINEARES NO  
ESPAÇO DE FASE**

Alisson Xavier Martins

Orientador:

Tarcísio Marciano da Rocha Filho

Brasília, 20 de Maio de 2022

# Dedicatória

*Dedico esta tese aos meus  
grandes mestres, aos meus pais.  
Sempre ensinaram a mim  
e a meus irmãos pela  
pedagogia do amor.*

# Agradecimentos

- Agradeço em primeiro lugar, a Deus pelo dom da vida.
- Agradeço aos meus pais pelo amor, carinho e dedicação para comigo e meus irmãos.
- Agradeço aos meus irmãos por dividir comigo a jornada da vida.
- Agradeço a toda minha família por todo incentivo e apoio.
- Agradeço ao professor e orientador Tarcísio Marciano pela oportunidade de finalizar este trabalho. Agradeço a paciência, disponibilidade e também ensinamentos durante o período que estive sob sua orientação. Além de ser um cientista pelo qual nutro profunda admiração não posso deixar de destacar o seu lado humano. Seus serviços prestados à comunidade científica durante período de pandemia, só reforça sua capacidade em transitar em diversas áreas complexas e divulgando a ciência como um valor basilar de nossa sociedade.
- Agradeço aos professores, da UnB em especial os professores: Anníbal Figueiredo, Ronni Amorim, Jose Wadih Maluf, Geraldo Magela, Marco Amato, Marcos Maia, Wytler, Arsen Melikyan, Viktor Dodonov, Ricardo Gargano e o Qu Fanyao, sempre cordiais e solícitos.
- Agradeço a todos os professores que fizeram parte de minha formação.
- Agradeço aos professores membros da banca: Tarcísio Marciano, Anníbal Figueiredo, Ronni Amorim, Rendisley Paiva, Sérgio Ulhoa e Alessandro Ferreira.
- Agradeço ao Paulo Marciano, uma das primeiras pessoas que conheci em Brasília e que se tornou um amigo nessa caminhada na pós-graduação.
- Agradeço ao Ednardo pelo apoio e amizade.
- Agradeço aos amigos conterrâneos, em especial: ao José, Dailyeversson, Ronny, Gilvan, Maxwell, Allan, Whinter, Alessandro, Julio e Marcos.
- Agradeço as colegas Maria Cristina Castilho e Danielle Videira pelo cuidado com minha saúde.
- Agradeço aos colegas de estudo e resenha da UnB, dentre os quais destaco, José Marão, José Silva, José André, Leonides, Renato, Gustavo, Carolina, Caroline, Fernando, Bruna, Breytner, Hailleen, Oscar, Edimilson, Evandro, Emanuel, Alexandre (Turista), Arlon (in memoriam).

- Agradeço aos funcionários da Colina, em especial, o Rubens e o Marcelo.
- Agradeço aos funcionários da secretaria da pós-graduação de Física.
- Agradeço ao CNPq pelo suporte financeiro.

Meu muito obrigado!

Gort, Klaatu Barada Nikto.

Filme: O dia em que a terra parou.

# Resumo

A partir do início do século XX, a mecânica quântica se tornou uma área da física de altíssima relevância para a compreensão da natureza da matéria em níveis microscópicos. A equação que rege a dinâmica de partículas na mecânica quântica é a equação de Schrödinger. O estudo das soluções desta equação é de grande importância tanto do ponto de vista teórico quanto experimental. Nesta pesquisa, o estudo da equação foi tratado no formalismo do espaço de fase. Nesse formalismo, o produto estrela conecta a mecânica quântica simplética à função de Wigner. A equação de Schrödinger é obtida via representação unitária do grupo de Galilei. Estabelecida a equação de Schrödinger no espaço de fase, buscamos as soluções. Para encontrar as soluções, utilizamos o pacote computacional SADE. Calculamos geradores de simetria e soluções invariantes. De posse das soluções, foi possível obter quantidades físicas como a distribuição de quase probabilidade e a negatividade e discutir essas medidas no espaço de fase.

# Abstract

The study of quantum mechanics is of great importance to understand the behavior of matter. The equation that governs particle dynamics in quantum mechanics is the Schrödinger equation. The study of the solutions of this equation is of great importance both from a theoretical and experimental point of view. In this research, the study of the equation was treated in the phase space formalism. In this formalism, the star product connects symplectic quantum mechanics to the wigner function. Schrodinger's equation is obtained via the unitary representation of the Galilei group. Having established the Schrödinger equation in phase space, we look for solutions. To find the solutions we use the SADE computational package. We calculate symmetry generators and invariant solutions. With the solutions in hand, it was possible to obtain physical quantities such as the quasi-probability distribution and negativity and to discuss these measures in phase space.

# Sumário

<b>1</b>	<b>Introdução</b>	<b>9</b>
<b>2</b>	<b>Equação de Schrödinger Não Linear</b>	<b>14</b>
2.1	Equação de Gross-Pitaevskii . . . . .	15
2.1.1	Equação de Gross-Pitaevskii dependente do tempo . . . . .	16
2.2	Oscilador Quártico . . . . .	18
<b>3</b>	<b>Mecânica quântica no espaço de fase</b>	<b>21</b>
3.1	Função de Wigner . . . . .	21
3.1.1	Propriedades da Função de Wigner . . . . .	22
3.1.2	Operadores na Representação de Wigner . . . . .	23
3.1.3	Produto de Operadores na Representação de Wigner . . . . .	24
3.1.4	Equação de Evolução . . . . .	26
3.1.5	Propriedades do Produto-Estrela . . . . .	27
3.1.6	A Negatividade da Função de Wigner . . . . .	30
3.2	A Mecânica Quântica Simplética . . . . .	30
3.2.1	Variiedade Simplética e Espaço de Hilbert . . . . .	30
3.2.2	Representação do Grupo de Galilei no Espaço de Fase . . . . .	32
3.2.3	A Equação de Schrödinger no Espaço de Fase . . . . .	35
3.2.4	Equação de Schrödinger no Espaço de Fase e Teoria de Calibre . . . . .	36
3.2.5	Exemplo . . . . .	38
<b>4</b>	<b>Métodos de simetria</b>	<b>42</b>
4.1	Introdução aos Grupos e Álgebras de Lie . . . . .	42
4.1.1	Grupos de Lie . . . . .	44
4.1.2	Álgebras de Lie . . . . .	44
4.2	Simetrias e Equações Diferenciais . . . . .	46
4.2.1	EDPs escalares com duas variáveis dependentes . . . . .	46
4.2.2	Soluções invariantes . . . . .	51
<b>5</b>	<b>Simetrias e Soluções da Equação de Gross-Pitaevskii no espaço de fase</b>	<b>54</b>
5.1	Simetrias e Soluções da Equação de Gross-Pitaevskii no espaço de fase . . . . .	54
5.1.1	Equação de Gross-Pitaevskii no estado estacionário . . . . .	54
5.2	Equação de Gross-Pitaevskii dependente do tempo . . . . .	60

<b>6</b>	<b>Simetrias e Soluções do Oscilador Quártico no Espaço de Fase</b>	<b>65</b>
6.1	Simetrias e Solução do Oscilador Harmônico no Espaço de Fase . . . . .	65
6.2	Simetrias e Solução do Oscilador Quártico no Espaço de Fase: Solução Analítica	67
6.3	Oscilador Quártico no Espaço de Fase: Solução Algébrica . . . . .	68
6.3.1	A equação diferencial tricounfluente de Heun nas formas normal e padrão	68
6.4	Função de Wigner . . . . .	70
<b>7</b>	<b>Conclusões e Perspectivas</b>	<b>73</b>
<b>8</b>	<b>Apêndice</b>	<b>75</b>
<b>A</b>	<b>Simetrias não-clássicas</b>	<b>76</b>
A.1	Exemplo: Equação de Schrödinger Não-Linear . . . . .	77
<b>B</b>	<b>Programa Produto-Estrela</b>	<b>91</b>

# Capítulo 1

## Introdução

Nesta tese, estudamos as soluções analíticas de dois modelos de equação de Schrödinger no espaço de fase. A saber, a equação de Gross-Pitaevskii e o oscilador quártico, sendo a primeira uma equação diferencial essencialmente não-linear, e a segunda uma equação diferencial que contém um potencial não-linear.

Em 1925, Schrödinger propôs uma equação para descrever a dinâmica de sistemas subatômicos fundando juntamente com Dirac e Heisenberg a mecânica quântica [1, 2, 3]. Neste caso, o estado de um sistema quântico é representado por vetores normalizados  $|\psi\rangle$  de um espaço de Hilbert  $\mathcal{H}$  ou equivalentemente por uma função de onda  $\psi(x)$ , caso seja utilizada a representação da posição, isto é, se o estado for projetado no ket  $|x\rangle$ . Nesse percurso, a densidade de probabilidade de uma partícula ser encontrada em um ponto é dada por  $|\psi(x)|^2$ . Observáveis físicos são representados por operadores hermitianos (auto-adjuntos)  $A^\dagger = A$  definidos no espaço  $\mathcal{H}$ . O valor esperado de um observável  $A$  é dado por  $\langle\psi|A|\psi\rangle$ , e a evolução temporal do sistema obedece a equação de Schrödinger

$$i\hbar\frac{\partial\psi(r,t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(r,t),$$

onde,  $\hbar$  é a constante de Planck que tomaremos  $\hbar = 1$  (unidade natural) para efeito de cálculo. Uma extensão da equação de Schrödinger é a equação de Gross-Pitaevskii [4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11] que descreve uma variedade de fenômenos interessantes, como o condensado de Bose-Einstein (BEC) [12, 13]. O condensado de Bose-Einstein é uma descrição física de um conjunto de partículas bosônicas que se encontram no estado de mínima energia. Este novo estado da matéria pode existir abaixo de uma temperatura crítica. Esta previsão teórica é devida Satyendra Nath Bose [14] e Albert Einstein [15] entre os anos de 1924 e 1925. O artigo proposto por Bose tratava da distribuição estatística de um gás ideal de fótons, lançando assim, o conceito de bóson como uma partícula de spin inteiro ou nulo. Logo após, Einstein generaliza o trabalho de Bose para partículas com massa, e observa que um conjunto de partículas se encontram em um novo estado da matéria abaixo de uma temperatura crítica, num regime condensado [8]. Em 1995, o condensado foi obtido pelos físicos, Carl. E. Wieman et al. [16] com átomos de rubídio, e em seguida, Wolfgang Ketterle et al. [17] obtiveram o condensado com átomos de sódio. Neste experimento, os átomos foram confinados em armadilhas magnéticas e resfriados a temperaturas extremamente baixas, da ordem de frações de microkelvins [5]. É importante observar que nessas condições, a configuração de equilíbrio do sistema seria a fase sólida. Assim, para observar o BEC é preciso preservar o sistema numa fase de gasosa metaestável por um tempo suficientemente longo. Isso é possível porque colisões de três corpos são eventos raros em gases diluídos e frios,

cuja vida útil é longa o suficiente para realizar experimentos. No ano de 2001, Wieman, Cornell e Ketterle foram laureados com o prêmio Nobel de física pelo sucesso experimental [18, 19, 20]. A equação de Gross-Pitaevskii é dada por

$$i\hbar \frac{\partial \psi(r, t)}{\partial t} = \left[ -\frac{1}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(r, t) + g |\psi(r, t)|^2 \right] \psi(r, t),$$

onde  $m$  é a massa,  $V_{ext}(r, t)$  é o potencial de interação,  $g = 4\pi\hbar^2 a/m$  é a intensidade da interação interatômica e  $a$  é o comprimento de espalhamento atômico. O comprimento de espalhamento é atrativo para  $a < 0$  e repulsivo para  $a > 0$ . Desse modo, o termo de interação interatômica pode ser  $g < 0$  ou  $g > 0$ . As soluções estacionárias para as interações repulsivas e atrativas desta equação foram obtidas analiticamente pelos autores [9, 10]. Esta equação foi proposta de forma independente por Eugene Gross e Lev Pitaevskii [21, 22]. A equação é deduzida no formalismo da segunda quantização, numa aproximação de campo médio. Essa aproximação é válida para condensados não muito densos (diluídos), o que é o caso dos condensados obtidos experimentalmente.

Contudo, para fenômenos em altas energias essa equação não descreve fielmente a dinâmica de sistemas subatômicos. Neste regime, temos que levar em conta as transformações de Lorentz e a equação de Schrödinger não é invariante por transformação de Lorentz. Então, uma busca por uma equação análoga a Schrödinger e que respeitasse a invariância requerida na transformação de Lorentz levou Klein-Gordon a seguinte equação

$$\left[ \partial^\mu \partial_\mu + \frac{m^2 c^2}{\hbar} \right] \phi(r, t) = 0.$$

onde,  $m$  é massa,  $\hbar$  constante de Planck e  $c$  é a velocidade da luz que tomaremos  $\hbar = c = 1$  (unidade natural). A equação acima é uma boa equação, pois respeita a condição de camada de massa, e envolvendo um operador diferencial invariante e um operador escalar também invariante. Esta equação é conhecida como equação de Klein-Gordon (ou, eventualmente, equação de Klein-Fock para os russos) [23].

Uma versão estendida da equação de Klein-Gordon é dada por

$$[\partial^\mu \partial_\mu + m^2] \phi(r, t) = -\frac{\lambda}{6} \phi^3(r, t),$$

onde,  $\lambda$  é uma constante de acoplamento adimensional. Essa é a equação de Klein-Gordon não-linear ou teoria  $\lambda\phi^4$ . Esta teoria é um modelo básico renormalizável em teoria quântica de campos, descrevendo partículas de spin zero. O modelo é amplamente usado em quebra espontânea de simetria e um exemplo é o bóson de Higgs no modelo padrão eletrofraco [24, 25, 26]. Na física da matéria condensada, a teoria  $\lambda\phi^4$  é utilizada em supercondutividade, especificamente na teoria de Ginzburg-Landau [27]. Tanto o caso não relativístico (equação Gross-Pitaevskii) como o relativístico (equação de Klein-Gordon não-linear) são estudadas como uma teoria clássica de campos, apresentando uma enorme riqueza de soluções, descrevendo, por exemplo, paredes de domínios sólitons entre outros.

O oscilador quártico no espaço de fase também foi objeto de estudo desta tese. A equação de Schrödinger para este sistema é dada por,

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{1}{2} x^2 \psi(x) + \lambda x^4 \psi(x) = E \psi(x).$$

o termo de potencial é dado por  $\lambda x^4$ . Esse modelo tem sido objeto de estudo por diversos autores [28, 29, 30, 31, 32] et al.. No entanto, o problema permaneceu por um longo período sem solução exata, com apenas soluções aproximadas. Uma solução exata para o caso simétrico foi apresentada [33, 34]. No artigo [35, 36], o autor apresentou uma abordagem para solução analítica considerando o fato de que a equação diferencial do oscilador quártico é um caso específico triconfluente da equação diferencial de Heun [37]. O oscilador quártico serve de guia para desenvolver modelos interessantes de vários sistemas físicos como exemplos temos cosmologia quântica [38], caos quântico [39, 40], e a teoria de cristais [41]. Uma discussão interessante sobre aplicação do oscilador quártico na física molecular é encontrada na referência [42]. Neste artigo, o autor apresenta uma comparação de métodos para obtenção dos níveis de energia do oscilador harmônico e do oscilador quártico.

Um elemento importante desses desenvolvimentos é a análise da função de Wigner dessas teorias, a revelar a parte da natureza estatística dessas soluções. Este é um aspecto intrincado, e por isso mesmo, pouco explorado na literatura [43, 44]. Logo após o desenvolvimento da mecânica quântica relativística, uma formulação alternativa da mecânica quântica estava sendo realizada por Wigner. Assim, em 1932 Wigner introduz a noção de espaço de fase na mecânica quântica [45], fazendo correções quânticas na mecânica estatística preservando o conceito de espaço de fase, tendo em vista que o problema da superfluidez do hélio não poderia ser tratado com uma teoria clássica [46]. É relevante mencionar que a forma na qual Wigner introduz o espaço de fase na mecânica quântica permite que a teoria seja vista por uma perspectiva diferente da forma usual. O formalismo de Wigner apresenta algumas vantagens frente a outros formalismos da Mecânica Quântica, dentre os quais podemos citar a forma mais natural de se obter o princípio da correspondência clássico-quântico e a praticidade de se trabalhar com o espaço de fase na descrição de teorias cinéticas. Nesse caminho, o formalismo de Wigner tem se desenvolvido desde então e tem sido aplicado em diferentes áreas, tais como a física nuclear, a física da matéria condensada [47, 48, 49] e a óptica quântica [50, 51, 52]. Recentes trabalhos também destacam a relevância do trabalho de Wigner em problemas relacionados à tomografia quântica, nos estudos de reconstrução de estados quânticos e do operador densidade [53, 54]. Porém, a proposta de Wigner também apresenta algumas dificuldades, quais sejam: devido ao fato da função de Wigner ser uma função real, no bojo de seu formalismo, teorias de calibre não podem ser construídas no espaço de fase; além disso, problemas que envolvem superposições de estados mostram-se extremamente trabalhosos. De um ponto de vista matemático, no formalismo de Wigner, cada operador representado por  $A$ , definido em um espaço de Hilbert,  $\mathcal{H}$ , é associado a uma função denotada por  $a_w(q, p)$ , no espaço de fase,  $\Gamma$ . Essa associação é uma aplicação  $\Omega_w : A \rightarrow a_w(q, p)$ , tal que, a álgebra associativa definida em  $\mathcal{H}$  corresponde a uma álgebra também associativa (mas não-comutativa) em  $\Gamma$ , dada por  $\Omega_w : AB \rightarrow a_w(q, p) \star b_w(q, p)$ , em que o produto estrela (ou produto de Moyal)  $\star$  é definido por [46]

$$a_w(q, p) \star b_w(q, p) = f(q, p) \exp \left[ \frac{i\hbar}{2} \left( \overleftarrow{\partial} \overrightarrow{\partial} - \overleftarrow{\partial} \overrightarrow{\partial} \right) \right] g(q, p). \quad (1.1)$$

Note que a equação (1.1) pode ser vista como um operador  $\hat{A} = a_w \star$ , atuando nas funções  $b_w$ , tais que,  $\hat{A}(b_w) = a_w(q, p) \star b_w(q, p)$ . Nos contextos matemático e físico, o espaço de fase quântico e o produto de Moyal podem ser explorados sob diferentes aspectos [47, 55]. A estrutura algébrica não-comutativa no espaço de fase fornece, em particular, uma base sólida para desenvolver representações irredutíveis e unitárias de grupos cinemáticos. Nesse arcabouço, Oliveira et al. [57, 58] utilizaram os operadores-estrela para construir uma representação para o

grupo de Galilei no espaço de fase. A partir desta representação pôde ser obtida uma versão para a equação de Schrödinger no espaço de fase. Este formalismo da mecânica quântica no espaço de fase então obtido, possui estreita relação com a função de Wigner, uma vez que o produto-estrela entre a função de onda no espaço de fase e seu complexo conjugado nos fornece a função de Wigner relativa ao sistema considerado. Nesse panorama, obtem-se um formalismo autocontido para o cálculo da função de Wigner, o qual pode ser generalizado para outros contextos. A abordagem relativística deste formalismo foi apresentada por Amorim et al. [59, 60], os quais utilizaram os operadores-estrela para estudar representações simpléticas do grupo de Poincaré, obtendo as equações de Klein-Gordon e Dirac escritas no espaço de fase. Mais uma vez, o formalismo apresentado é relacionado à função de Wigner relativística. Em outro trabalho, Amorim et al [61] apresentaram uma primeira versão da teoria quântica de campos escrita no espaço de fase, na qual foi desenvolvida a versão simplética do Teorema de Noether e foi estabelecida a relação entre a função de Wigner e o propagador. Nos trabalhos [62, 63] Amorim et al apresentaram uma das grandes vantagens do formalismo por eles estabelecido, no sentido que foi construída a teoria de calibre no espaço de fase, tanto no arcabouço relativístico como no não-relativístico. Eles se apoiaram no fato que, ao contrário da função de Wigner, as funções de onda do espaço de fase podem ser complexas, o que leva à possibilidade da introdução de fase complexa. Com isso, fica estabelecido como se introduz a interação eletromagnética no âmbito da mecânica quântica no espaço de fase. Dentre os campos ainda em aberto no formalismo da mecânica quântica simplética está a pesquisa por soluções analíticas da equação de Schrödinger no espaço de fase para potenciais não-lineares, sobretudo o oscilador quártico e a equação de Gross-Pitaevskii.

Para estudar as soluções de equações diferenciais, podemos considerar técnicas numéricas ou técnicas analíticas. Tanto o tratamento numérico quanto o analítico, são de grande importância na busca por soluções de equações diferenciais. Nesta tese, a técnica analítica que usamos para tratar equações diferenciais foi a simetrias de Lie. A teoria de transformações infinitesimais aplicadas às equações diferenciais teve início no século XIX, com o matemático Sophus Lie. A partir das simetrias, é possível obter soluções das equações diferenciais e essas soluções são classificadas como soluções invariantes [64]. No entanto, essa teoria não recebeu a devida atenção por um longo tempo. Utilizar as transformações de simetria para obter equações diferenciais, leva-nos a cálculos muito extensos. Este fato conciliado com a não existência de computadores para a realização dos cálculos, justifica a pouca atenção inicial com essa teoria. Com o advento da computação algébrica, as equações diferenciais voltaram a ser objeto de pesquisa. Então o lápis e papel foram substituídos por programas de computação algébrica evitando possíveis erros [65]. Nesse caminho, outras simetrias têm sido desenvolvidas, como, por exemplo, simetrias não-clássicas introduzidas por Bluman e Cole [66]. A simetria não-clássica mantém invariante tanto a equação diferencial quanto a condição de invariância da solução. Esse método é menos restritivo no sentido de que existem mais simetrias não-clássicas que as de Lie, sendo o último um subconjunto do primeiro [66]. Outras generalizações são simetrias Lie-Bäcklund [67] e simetrias de potencial [68]. As simetrias podem estar relacionadas com grandezas conservadas desde que as equações sejam deduzidas de um princípio variacional, este resultado é devido a Noether [69]. Essas técnicas de simetrias têm sido aplicadas a diversos contextos como, por exemplo, o modelo Fitzhugh-Nagumo na neurociência [70], no modelo Black-Scholes no mercado financeiro [71], ou também, equação de Dirac não-linear em teoria quântica de campos [72].

Nos anos 90, o pacote computacional SADE (Symmetry Analysis Differential Equation) [73] desenvolvido pelos professores Tarcísio Marciano e Annibal Figueiredo ofereceram a comunidade científica uma perspectiva para tratar equações diferenciais. Este pacote calcula as simetrias

de Lie, Lie Backlund, não-clássicas, simetrias de potencial, soluções invariantes, integrais de primeira, solução e redução de ordem, teorema de Noether para sistemas discretos e contínuos, invariantes de Casimir e formalismo quase polinomial para EDOs. A robustez do pacote foi atestada ao reproduzir resultados clássicos e novos resultados. Uma comparação de tempo de cálculo de equações determinantes é feita no artigo [73]. Existem outros pacotes úteis para a pesquisa em simetrias de equações diferenciais: Para MAPLE, existem também alguns pacotes úteis: PDEtools de Cheb-Terrab [74], DESOLV por Vu e Carminati [75, 76], e GeM por Cheviakov [77]. SPDE por Schwarz [78], CRACK e LIEPDE por Wolf [79, 80] e DIMSYM por Sherring e Prince [81] em REDUCE, LIE e BIGLIE por Head [82, 83] em MUMATH e MATHLIE de Baumann [84] em Mathematica.

Nesse bojo, a pesquisa por soluções analíticas dessa equação e generalizações incluindo potências quinticas no potencial de autointeração, tem se dado em diferentes perspectivas [85, 86, 87, 88], incluindo a análise através dos métodos de Lie [89, 90, 91, 92, 93]. Nossa proposta para atacar o problema é encontrar geradores de simetria de Lie, que nos permitirão obter soluções invariantes para os modelos considerados. De posse das soluções, a associação com funções de Wigner é também realizada. Esse estudo será realizado em  $(1+1)$ , dimensões.

Para implementar os cálculos, fazemos uso sistemático do pacote de cálculo simbólico SADE [73], utilizado com sucesso na análise de outras equações da física, como a equação de Fokker-Planck e a equação de Gross-Neveu [72, 94, 95, 96, 97, 98, 99, 100, 101].

O presente trabalho está organizado da seguinte maneira. No capítulo 2, apresentamos o formalismo da equação de Gross-Pitaevskii e do Oscilador Quártico. No capítulo 3, introduzimos a função de Wigner e o produto de Moyal. Utilizando operadores-estrela, definidos a partir de uma geometria não-comutativa, revisamos as representações do grupo de Galilei num espaço de Hilbert associado a um espaço de fase, e como resultado, escrevemos a equação de Schrödinger no espaço de fase. Na capítulo 4, fazemos uma revisão da teoria de grupos e álgebras de Lie, que são os fundamentos matemáticos de simetrias contínuas de equações diferenciais. Introduzimos métodos de soluções invariantes de EDPs, utilizando simetrias de Lie e apresentamos soluções analíticas obtidas com métodos de simetria. Apresentamos alguns resultados preliminares. No capítulos 5 e 6, apresentamos os resultados obtidos e discussões dos modelos considerados neste trabalho e os artigos relacionados a estes resultados [114, 115]. Por fim, no capítulo 7 nossas considerações finais e perspectivas futuras são apresentadas.

## Capítulo 2

# Equação de Schrödinger Não Linear

Neste capítulo, uma breve discussão da equação de Schrödinger é feita. Em seguida, apresentamos uma revisão de dois modelos de equação de Schrödinger. A saber: a equação de Gross-Pitaevskii e o oscilador quártico. A equação de Gross-Pitaevskii independente do tempo, é deduzida de um princípio variacional a partir da minimização de uma função termodinâmica e a equação de Gross-Pitaevskii dependente do tempo é deduzida do quadro da segunda quantização numa aproximação de campo médio. O oscilador harmônico é introduzido e o oscilador quártico é tratado como uma extensão natural do oscilador harmônico. No caso, podemos ter diferentes autovalores a depender dos parâmetros do potencial. As informações desse capítulo, estão contidas principalmente nas referências [1, 3, 4, 5, 6, 8, 9, 11, 30, 35]. Outras referências também podem ser encontradas ao longo do capítulo.

A equação de Schrödinger descreve o comportamento dinâmico de sistemas subatômicos. Matematicamente, a equação é expressa da seguinte forma,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(x, t),$$

o conteúdo físico do sistema está associado ao hamiltoniano,

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V},$$

que representam as energias cinética e potencial. A função de onda é complexa e descrita no espaço de Hilbert. A função de onda em si não possui um significado físico. No entanto, o módulo quadrado é real e pode ser escrito como

$$\Psi^\dagger(x, t) \Psi(x, t) = |\Psi(x, t)|^2,$$

que é interpretado como densidade de probabilidade. Essa densidade possui a seguinte normalização,

$$\int dx \Psi^\dagger(x, t) \Psi(x, t) = 1.$$

No regime estacionário podemos escrever a equação Schrödinger na forma,

$$\hat{H} \psi(x) = E \psi(x),$$

note que essa equação depende apenas da parte espacial porque o sistema atingiu o regime estacionário, esse fato permite separar as partes espacial e temporal. Esta equação é também

denominada equação de Schrödinger independente do tempo. A equação linear descreve uma gama de fenômenos físicos. No estante, é natural considerarmos a equação não linear já que os termos não lineares nos permite uma abordagem fenomenológica mais ampla. Por exemplo, alguns autores estudam as soluções das equações em termos genéricos das equações de Schrödinger não-linear [89, 90, 91, 92, 93]. Outros autores têm estudado soluções de modelos de equação de Schrödinger não-linear que descrevem um determinado sistema físico [9, 10]. O condensado de Bose-Einstein é descrito com a equação de Gross-Pitaevskii, que é uma modelo de equação de Schrödinger não linear. Outro modelo interessante é o oscilador quártico que descreve uma série de fenômenos interessantes como, por exemplo, cosmologia quântica [38], caos quântico [39, 40], e a teoria de cristais [41].

## 2.1 Equação de Gross-Pitaevskii

A equação de Gross-Pitaevskii descreve a condensação de um gás de bósons. Um condensado é um conjunto de partículas bosônicas obtidas a temperatura zero. As partículas se encontram no mesmo estado energia (estado fundamental).

O Hamiltoniano deste sistema pode ser escrito da forma,

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_I \quad (2.1)$$

onde  $\hat{H}_0$  é,

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^n \frac{P_i^2}{2m}, \quad (2.2)$$

esse é o termo de energia cinética e o hamiltoniano  $\hat{H}_I$

$$\hat{H}_I = \sum_{i=1}^n V(r_i) + \sum_{i=1}^n \sum_{i \neq j} V(|r_i - r_j|), \quad (2.3)$$

este é o hamiltoniano de interação. O primeiro termo representa o potencial externo, que nesse caso é uma armadilha e o potencial de interação entre as n partículas. Podemos escrever explicitamente o Hamiltoniano (2.1) da seguinte forma

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^n \left( \frac{P_i^2}{2m} + V(r_i) \right) + \sum_{i=1}^n \sum_{i \neq j} V(|r_i - r_j|) \quad (2.4)$$

O potencial termodinâmico nos permite estudar o equilíbrio de um sistema que não esta isolado. Dessa forma, introduzimos a energia livre

$$F = E - \mu N, \quad (2.5)$$

onde  $E$  é a energia livre e  $\mu$  é o potencial químico. A equação de Gross-Pitaevskii pode ser calculada com o auxílio da equação,

$$F(\Psi) = \langle \Psi | H | \Psi \rangle - \mu \langle \Psi | \Psi \rangle, \quad (2.6)$$

onde esta variação é avaliada em  $\psi^*$ . Assim,

$$\frac{\delta F}{\delta \psi^*} = 0, \quad (2.7)$$

após alguns cálculos e aproximações, obtemos,

$$\left[ -\frac{1}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(r) + Ng |\psi(r)|^2 \right] \psi(r) = \mu \psi(r), \quad (2.8)$$

esta é a equação de Gross-Pitaevskii independente do tempo. Se  $g < 0$  a interação é atrativa e se  $g > 0$  a interação é repulsiva. As soluções desta equação para os dois casos foram estudadas nas condições de contorno periódica e de caixa nos artigos [9, 10]. Se o condensado for denso, o termo de energia cinética pode ser desprezado.

$$\left[ V_{ext}(r) + Ng |\psi(r)|^2 \right] \psi(r) = \mu \psi(r). \quad (2.9)$$

ou também,

$$V_{ext}(r) + Ng |\psi(r)|^2 = \mu. \quad (2.10)$$

Temos então uma equação algébrica. Resolvendo essa equação chegamos a

$$|\psi(r)|^2 = \frac{\mu - V_{ext}}{gN}, \quad (2.11)$$

onde  $\rho = |\psi(r)|^2$  é a densidade uniforme do gás condensado.

### 2.1.1 Equação de Gross-Pitaevskii dependente do tempo

A equação Gross Pitaevskii dependente do tempo pode ser deduzida por meio de um princípio variacional ou através da equação de movimento de Heisenberg. Vamos seguir a segunda forma.

- Segunda Quantização.

Podemos escrever o número de partículas que ocupam cada estado em um conjunto completo de partícula única. Assim podemos escrever vetores da forma,

$$|n_1, \dots, n_i, \dots\rangle. \quad (2.12)$$

Essa notação indica que temos  $n_1$  partículas no autoestado 1,  $n_2$  partículas no autoestado 2,  $n_i$  partículas no  $i$ -ésimo autoestado, etc. Nesse espaço, a relação dos operadores de criação e destruição é dada por,

$$\left[ \hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger \right] = \delta_{i,j}, \quad (2.13)$$

$$\left[ \hat{a}_i, \hat{a}_j \right] = \left[ \hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger \right] = 0. \quad (2.14)$$

A partir da relação de comutação e a normalização é possível obter as propriedades.

$$\hat{a}_i |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i} |n_1, \dots, n_i - 1, \dots\rangle, \quad (2.15)$$

e

$$\hat{a}_i^\dagger |n_1, \dots, n_i, \dots\rangle = \sqrt{n_i + 1} |n_1, \dots, n_i + 1, \dots\rangle. \quad (2.16)$$

O operador número é um operador hermitiano e, portanto, possui autovalores reais. Esse operador possui um espectro de autovalores maior ou igual a zero.

- Campos.

Podemos escrever combinações lineares dos operadores escada da forma,

$$\begin{aligned}\widehat{\Psi}(r, t) &= \sum_{i=1}^n \Psi(r, t) \widehat{a}_i, \\ \widehat{\Psi}^\dagger(r, t) &= \sum_{i=1}^n \Psi^\dagger(r, t) \widehat{a}_i^\dagger,\end{aligned}\tag{2.17}$$

onde os coeficientes são funções de onda de partícula única e a soma é sobre o conjunto completo de números quânticos de partícula única. As quantidades  $\widehat{\Psi}(r, t)$  e  $\widehat{\Psi}^\dagger(r, t)$  são os chamados operadores de campo. Eles são operadores no espaço de Fock porque são escritos em termos dos operadores escada. A relação de comutação entre os operadores é dada por,

$$\left[ \widehat{\Psi}(r, t), \widehat{\Psi}^\dagger(r', t) \right] = \delta(|r - r'|),\tag{2.18}$$

$$\left[ \widehat{\Psi}(r, t), \widehat{\Psi}(r', t) \right] = \left[ \widehat{\Psi}^\dagger(r, t), \widehat{\Psi}^\dagger(r', t) \right] = 0.\tag{2.19}$$

O Hamiltoniano no formalismo da segunda quantização é dado por

$$\widehat{H} = \int dr \Psi^\dagger(r, t) \widehat{H}_0 \Psi(r, t) + \frac{1}{2} \left( \int dr dr' \Psi^\dagger(r, t) \Psi^\dagger(r', t) V_{int}(r - r') \Psi(r', t) \Psi(r, t) \right).\tag{2.20}$$

Escrito em termos da energia cinética e potencial como antes, no entanto, aqui são operadores de campo. A equação de Heisenberg é então escrita na forma,

$$i\hbar \frac{\partial \widehat{\Psi}}{\partial t} = \left[ \widehat{\Psi}, \widehat{H} \right].\tag{2.21}$$

Introduzindo o lado direito no comutador e usando as relações de comutação dadas acima, chegamos a equação integro-diferencial. Aqui podemos usar a aproximação de campo médio,

$$\widehat{\Psi} = \Psi + \delta\widehat{\Psi},$$

nessa aproximação a equação é dada por,

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(r, t)}{\partial t} = -\frac{1}{2m} \nabla^2 \Psi(r, t) + V_{ext}(r, t) \Psi(r, t) + \left( \int dr' V_{int}(r - r') \Psi^*(r', t) \Psi(r', t) \right) \Psi(r, t)\tag{2.22}$$

Se o potencial interação de par de partículas for dado por  $V_{int}(r - r') = g\delta(|r - r'|)$ , a equação fica

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(r, t)}{\partial t} = \left[ -\frac{1}{2m} \nabla^2 + V_{ext}(r, t) + g |\Psi(r, t)|^2 \right] \Psi(r, t),\tag{2.23}$$

que é a equação de Gross-Pitaevskii.

## 2.2 Oscilador Quártico

Um modelo de equação de Schrödinger particularmente interessante, é o oscilador harmônico. O oscilador é um sistema que na física costumamos dizer de “boa física”, isto é, podemos tratar inúmeros sistemas físicos por uma aproximação ao oscilador. Um exemplo clássico é o pêndulo simples. Quando o pêndulo está sujeito a pequenas oscilações em torno do ponto de equilíbrio estável, o movimento do pêndulo pode ser aproximado por um oscilador. Na física molecular, a ligação atômica pode ser aproximada por um oscilador. Na mecânica quântica de partículas e campos um modelo didático usado na quantização da energia é o oscilador. Enfim, esses foram alguns de muitos outros exemplos que justificam a necessidade do oscilador como base para avançar na compreensão de outros sistemas físicos. O hamiltoniano do oscilador é dado por

$$\hat{H} = \frac{p^2}{2m} + \frac{mw^2x^2}{2}. \quad (2.24)$$

Os resultados do oscilador estão bem fundamentados na literatura da mecânica quântica. Uma extensão natural do oscilador harmônico é o oscilador quártico. Serve de guia para desenvolver modelos interessantes de vários sistemas físicos como exemplo temos cosmologia quântica [38], caos quântico [39, 40], e a teoria de cristais [41]. Além disso, diversos estudos tem mostrado a importância dos poços com potencial harmônico quártico no movimento de flexão do plano em anéis de quatro membros, como óxido de trimetileno e diazometano [42]. O potencial quártico é escrito na forma

$$V(x) = \alpha x^2 + \lambda x^4,$$

onde  $\lambda > 0$ , podemos calcular os pontos de equilíbrio desse potencial da forma,

$$\frac{dV(x)}{dx} = 0,$$

assim,

$$x = 0,$$

ou,

$$x = \pm \frac{\sqrt{|\alpha|}}{2\lambda},$$

o primeiro ponto crítico é um equilíbrio instável e os outros dois são pontos de equilíbrio estáveis. O potencial mínimo para  $\alpha$  negativo é dado por

$$V(x) = \frac{-\alpha^2}{2\lambda}, \quad (2.25)$$

onde o gráfico desse potencial é dado abaixo,

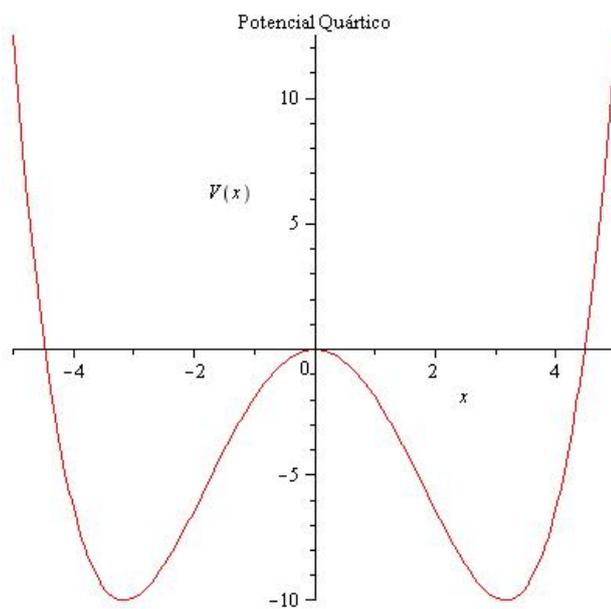


Figura 2.1: Gráfico do oscilador quártico para os parâmetros dados por  $\alpha = -2$  e  $\lambda = 0, 1$ .

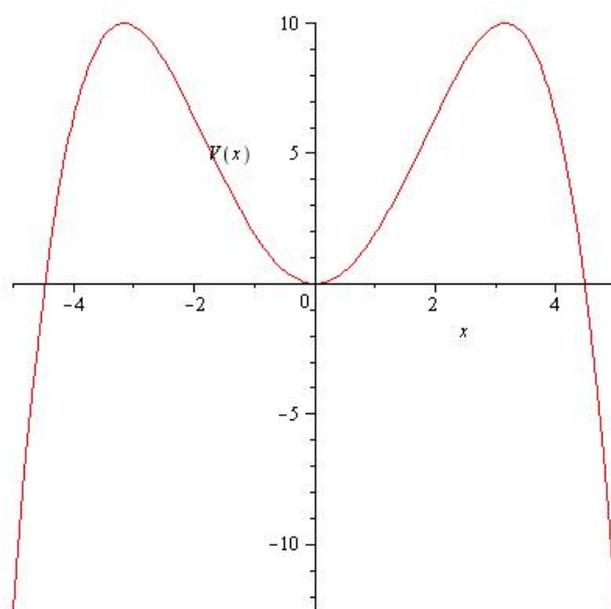


Figura 2.2: Gráfico do oscilador quártico para os parâmetros dados por  $\alpha = 2$  e  $\lambda = -0, 1$ .

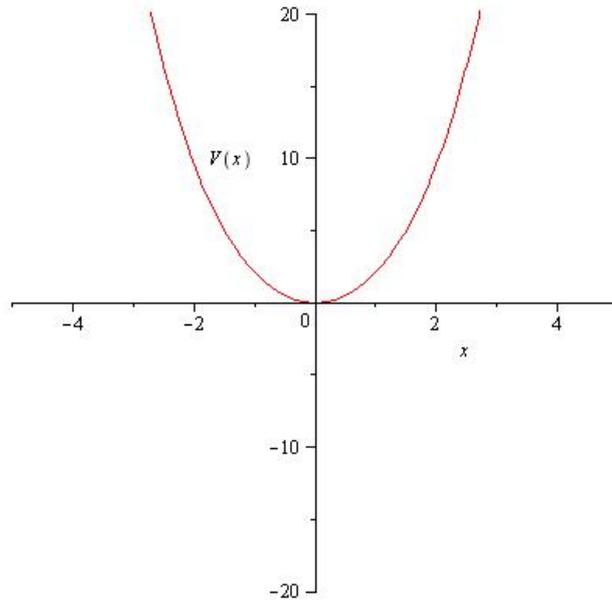


Figura 2.3: Gráfico do oscilador quártico para os parâmetros dados por  $\alpha = 2$  e  $\lambda = 0, 1$ .

Notamos que, para diferentes parâmetros, temos diferentes gráficos, embora sejam todos osciladores quárticos, mas cada um possui sua descrição física. Por exemplo, o primeiro apresenta uma possibilidade de confinamento. No terceiro, essa possibilidade não existe. A equação de Schrödinger no estado estacionário com um potencial quártico é dada por,

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{1}{2} x^2 \psi(x) + \lambda x^4 \psi(x) = E \psi(x).$$

Esse modelo tem sido objeto de estudo de diversos autores [28, 29, 30]. No entanto, o problema permaneceu por um longo período sem solução exata. Apenas aproximações e uma solução exata para o caso simétrico foi apresentada [33, 34]. Nos artigos [35, 36] os autores apresentaram uma abordagem para solução analítica considerando o fato de que a equação diferencial do oscilador quártico é um caso específico triconfluyente da equação diferencial de Heun.

Em 1932, Wigner propôs uma descrição alternativa da mecânica quântica, também denominada de representação de mecânica quântica no espaço de fase. Nesta representação, esse problema também tem sido investigado por alguns autores [111, 112, 113]. Neste artigo, os autores estudaram o oscilador quártico de duplo poço, que é um oscilador anarmônico com sinal diferente para os termos osciladores harmônico e quártico. As trajetórias quânticas foram comparadas com as clássicas e o tunelamento também foi analisado neste artigo. Um artigo particularmente interessante desenvolvido pelos autores Amorin et al [111]. Nesse artigo os autores calcularam as soluções perturbativas da oscilador quártico e as funções de Wigner associadas as funções de onda. As soluções aproximadas são interessantes, mas, a busca por soluções analíticas torna o resultado mais robusto já que torna a descrição do aspecto fenomenológico mais fiel. Neste contexto, apresentamos uma proposta para atacar este problema usando um pacote computacional de cálculo algébrico, SADE. A solução é obtida em termos da função especial HeunT [115]. Os resultados e as discussões físicas serão apresentadas no capítulo 6.

## Capítulo 3

# Mecânica quântica no espaço de fase

### 3.1 Função de Wigner

O conhecido princípio da incerteza de Heisenberg torna o conceito de espaço de fase na mecânica quântica bastante problemático, pois atesta que uma partícula não poder ter simultaneamente posição e momentum bem definidos, e também que não é possível definir uma verdadeira distribuição de probabilidades no espaço de fase. No entanto, funções que possuem conteúdo de espaço de fase, “funções distribuição de quase-probabilidades”, tem demonstrado grande utilidade no estudo de sistemas quânticos. Elas não são úteis somente como ferramentas de cálculos, mas também nos fornecem informações nas conexões entre a mecânica clássica e a mecânica quântica [59].

O problema de muitos corpos na mecânica quântica usual pode ser estudado via um tratamento estatístico, sendo que o estado macroscópico de um sistema pode ser representado mediante o operador densidade,

$$\rho = \sum_i \omega_i |\psi_i(t)\rangle \langle \psi_i(t)|,$$

onde  $\{|\psi_i\rangle\}$  são os estados microscópicos do ensemble estatístico e  $\omega_i = \frac{N_i}{N}$  é o peso estatístico para o estado quântico  $|\psi_i\rangle$ . A equação que governa a evolução temporal para  $\rho$  é dada por,

$$i\hbar \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = [H(t), \rho(t)], \quad (3.1)$$

que é a equação de Liouville-von Neumann.

A partir de  $\rho$  é possível introduzir uma formulação da mecânica quântica no espaço de fase, conhecida como método da função de Wigner. Este formalismo da mecânica quântica tem como ingrediente fundamental a denominada função de Wigner,  $f_W(q, p)$ , a qual é definida como uma transformada de Fourier dos elementos da matriz densidade, ou seja,

$$f_W(q, p) = (2\pi\hbar)^{-3} \int dz \exp\left(\frac{ipz}{\hbar}\right) \left\langle q - \frac{z}{2} \left| \rho \left| q + \frac{z}{2} \right. \right. \right\rangle, \quad (3.2)$$

ou, de forma equivalente,

$$f_W(q, p) = (2\pi\hbar)^{-3} \int dk \exp\left(\frac{-iqk}{\hbar}\right) \left\langle p - \frac{k}{2} \left| \rho \left| p + \frac{k}{2} \right. \right. \right\rangle. \quad (3.3)$$

É útil dizer que a função de Wigner não representa uma distribuição de probabilidades no espaço de fase, pois a mesma pode assumir tanto valores negativos como valores positivos, e como é conhecida da teoria estatística, uma autêntica distribuição de probabilidades deve ser positivo definida. No princípio do formalismo de Wigner, acreditava-se que a não-positividade da função de Wigner, que aparece em determinados contextos, seria um grande empecilho para o formalismo; porém, com a evolução das pesquisas na área, hoje há aplicações que atribuem às partes negativas da função de Wigner conexão com a não-classicalidade de sistemas físicos [107]. Em seguida, apresentaremos algumas propriedades das funções de Wigner.

### 3.1.1 Propriedades da Função de Wigner

Apesar da função de Wigner não representar uma distribuição de probabilidade no espaço de fase, densidades são conseguidas a partir da função de Wigner por meio da integração, são as denominadas probabilidades marginais.

- Propriedade 3.1.1.a: A função de Wigner quando projetada sobre  $p$  resulta na distribuição correta de probabilidades da posição, isto é,

$$|\psi(q)|^2 = \int f_W(q, p) dp = \langle q | \rho | q \rangle. \quad (3.4)$$

A demonstração dessa propriedade é realizada na sequência. Para esse fim, tomemos a integral da Eq.(3.2) em relação a  $p$ ,

$$\int f_W(q, p) dp = (2\pi\hbar)^{-3} \int dz dp \exp\left(\frac{ipz}{\hbar}\right) \langle q - \frac{z}{2} | \rho | q + \frac{z}{2} \rangle.$$

Identificando a delta de Dirac em  $p$ ,

$$\int f_W(q, p) dp = \int dz \left( (2\pi\hbar)^{-3} \int dp \exp\left(\frac{ipz}{\hbar}\right) \right) \langle q - \frac{z}{2} | \rho | q + \frac{z}{2} \rangle,$$

podemos escrever

$$\int f_W(q, p) dp = \int dz \delta(z) \langle q - \frac{z}{2} | \rho | q + \frac{z}{2} \rangle.$$

Isto nos fornece após o uso da propriedade da delta de Dirac na integração,  $\int \delta(x - a) h(x) dx = h(a)$ , o seguinte resultado

$$\int f_W(q, p) dp = \langle q | \rho | q \rangle,$$

que é o resultado procurado.

- Propriedade 3.1.1.b: Outra propriedade, que é simétrica a anterior, é dada por,

$$|\tilde{\psi}(p)|^2 = \int f_W(q, p) dq = \langle p | \rho | p \rangle, \quad (3.5)$$

ou seja, a densidade de probabilidade para se encontrar uma partícula entre  $p$  e  $p + dp$ . A demonstração desta propriedade segue o mesmo raciocínio da anterior, bastando para esse fim realizar a integração da eq.(3.3) com respeito a  $q$ .

- Propriedade 3.1.1.c: A normalização da função de Wigner é dada por

$$\int f_W(q, p) dq dp = \text{Tr} \rho = 1. \quad (3.6)$$

Esta equação justifica o fator multiplicativo  $(2\pi\hbar)^{-3}$  na definição da função de Wigner.

### 3.1.2 Operadores na Representação de Wigner

Assim como fizemos com o operador quântico usual, a partir do qual definimos a função de Wigner, podemos generalizar a obtenção de uma função no espaço de fase representativa a um operador quântico qualquer. Nesse sentido, seja um operador quântico usual,  $A(Q, P)$ , na representação de Wigner, este operador é dado mediante as transformadas,

$$A_W(q, p) = \int dz \exp\left(\frac{ipz}{\hbar}\right) \left\langle q - \frac{z}{2} \middle| A(Q, P) \middle| q + \frac{z}{2} \right\rangle, \quad (3.7)$$

ou

$$A_W(q, p) = \int dk \exp\left(\frac{-iqk}{\hbar}\right) \left\langle p - \frac{k}{2} \middle| A(Q, P) \middle| p + \frac{k}{2} \right\rangle. \quad (3.8)$$

Denominaremos estas funções de equivalentes de Wigner dos operadores  $A(Q, P)$ . Nesta tese, denominaremos esse procedimento de correspondência entre operadores e funções no espaço de fase como mapeamento de Wigner, representado por  $\Omega(A(Q, P)) = A_W(q, p)$ . Com a definição dos equivalentes de Wigner dos operadores  $A(Q, P)$ , escrevemos o valor esperado de um observável, num estado  $|\psi\rangle$  como

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle = \int dq dp A_W(q, p) f_W(q, p) = \text{Tr} \rho A. \quad (3.9)$$

Este resultado caracteriza que, apesar de admitir valores negativos, na integração a função de Wigner funciona como uma autêntica distribuição de probabilidades. A demonstração desta propriedade é realizada a seguir. Para esse fim, integraremos o produto das funções dadas nas Eq.(3.2) e Eq.(3.7) em todo o espaço de fase, isto é,

$$\begin{aligned} \int dq dp A_W(q, p) f_W(q, p) &= (2\pi\hbar)^{-3} \int dq dp dz dz' \exp\left(\frac{ipz}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{ipz'}{\hbar}\right) \\ &\times \left\langle q - \frac{z}{2} \middle| A(Q, P) \middle| q + \frac{z}{2} \right\rangle \left\langle q - \frac{z'}{2} \middle| \rho \middle| q + \frac{z'}{2} \right\rangle. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Se calcularmos a integral em  $p$  notamos a delta de Dirac, isto é,  $(2\pi\hbar)^{-3} \int \exp\left(\frac{ip(z+z')}{\hbar}\right) dp = \delta(z+z')$ . Assim, se usarmos a propriedade da delta na integração, obtemos

$$\int dq dp A_W(q, p) f_W(q, p) = \int dq dz \left\langle q - \frac{z}{2} \middle| A(Q, P) \middle| q + \frac{z}{2} \right\rangle \left\langle q + \frac{z}{2} \middle| \rho \middle| q - \frac{z}{2} \right\rangle.$$

Tomando a mudança de variáveis  $q_1 = q + \frac{z}{2}$  e  $q_2 = q - \frac{z}{2}$ , podemos escrever (o jacobiano dessa transformação é igual a 1)

$$\int dq dp A_W(q, p) f_W(q, p) = \int dq_1 dq_2 \langle q_2 | A(Q, P) | q_1 \rangle \langle q_1 | \rho | q_2 \rangle.$$

Se utilizarmos a relação de completeza  $\int dq_1 |q_1\rangle\langle q_1| = 1$ , temos

$$\int dqdp A_W(q, p) f_W(q, p) = \int dq_2 \langle q_2 | A(Q, P) | q_2 \rangle.$$

Isso nos fornece

$$\int dqdp A_W(q, p) f_W(q, p) = \text{Tr}(\rho A),$$

o qual é o resultado esperado.

### 3.1.3 Produto de Operadores na Representação de Wigner

Consideraremos agora a equivalência do produto de dois operadores  $AB$  na representação de Wigner. Existe uma relação que expressa  $(AB)_w$  em termos de  $A_w$  e  $B_w$  e é dada por

$$(AB)_w = A_w(q, p) e^{\frac{i\hbar\Lambda}{2}} B_w(q, p), \quad (3.11)$$

ou

$$(AB)_w = B_w(q, p) e^{-\frac{i\hbar\Lambda}{2}} A_w(q, p), \quad (3.12)$$

onde  $\Lambda$  é dado por

$$\Lambda = \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial q} \frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial p} - \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial p} \frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial q}. \quad (3.13)$$

A demonstração desta propriedade é apresentada a seguir. Para essa finalidade, consideremos dois operadores  $A$  e  $B$  e seus respectivos equivalentes na representação de Wigner, quais sejam,  $A_W(q, p)$  e  $B_W(q, p)$ , para as quais podemos associar os operadores por meio da correspondência de Weyl,

$$\tilde{A}(\sigma, \tau) = \frac{1}{2\pi} \int dqdp A_W(q, p) e^{i(\sigma q + \tau p)}, \quad (3.14)$$

$$A(Q, P) = \frac{1}{2\pi} \int d\sigma d\tau \tilde{A}(\sigma, \tau) e^{i(\sigma Q + \tau P)}. \quad (3.15)$$

e

$$\tilde{B}(\sigma, \tau) = \frac{1}{2\pi} \int dqdp B_W(q, p) e^{i(\sigma q + \tau p)}, \quad (3.16)$$

$$B(Q, P) = \frac{1}{2\pi} \int d\sigma d\tau \tilde{B}(\sigma, \tau) e^{i(\sigma Q + \tau P)}. \quad (3.17)$$

Notemos que o produto entre os operadores  $A$  e  $B$  pode ser escrito como

$$A(Q, P)B(Q, P) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\sigma d\tau d\sigma' d\tau' \tilde{A}(\sigma, \tau) e^{i(\sigma Q + \tau P)} \tilde{B}(\sigma', \tau') e^{i(\sigma' Q + \tau' P)}. \quad (3.18)$$

Definamos o operador  $C(Q, P)$ , tal que  $C(Q, P) = A(Q, P)B(Q, P)$ . Dessa forma, podemos escrever

$$C(Q, P) = \frac{1}{2\pi} \int d\sigma d\tau \tilde{C}(\sigma, \tau) e^{i(\sigma Q + \tau P)}. \quad (3.19)$$

A relação de Baker-Campbell-Hausdorff nos fornece

$$e^{i(\sigma Q + \tau P)} = e^{\frac{i}{2}\sigma\tau} e^{i\tau P} e^{i\sigma Q}.$$

E ainda,

$$e^{i(\sigma Q + \tau P)} e^{i(\sigma' Q + \tau' P)} = e^{\frac{i}{2}(\sigma'\tau - \sigma\tau')} e^{i(\sigma + \sigma')Q} e^{i(\tau + \tau')P}.$$

Se utilizarmos a última relação na equação (3.19), obtemos

$$C = AB = \int d\sigma d\tau d\sigma' d\tau' \tilde{A}(\sigma, \tau) \tilde{B}(\sigma', \tau') e^{\frac{i}{2}(\sigma'\tau - \sigma\tau')} e^{i(\sigma + \sigma')Q} e^{i(\tau + \tau')P}. \quad (3.20)$$

Se aplicarmos a transformação de variáveis dada por

$$\bar{\sigma} = \sigma + \sigma',$$

$$\bar{\tau} = \tau + \tau',$$

obtemos

$$C = AB = \int d\bar{\sigma} d\bar{\tau} d\sigma' d\tau' \tilde{A}(\bar{\sigma} - \sigma', \bar{\tau} - \tau') \tilde{B}(\sigma', \tau') e^{\frac{i}{2}(\sigma'\bar{\tau} - \bar{\sigma}\tau')} e^{i\bar{\sigma}Q} e^{i\bar{\tau}P}. \quad (3.21)$$

Observando o último resultado, podemos identificar

$$\tilde{C}(\sigma, \tau) = \int d\sigma' d\tau' \tilde{A}(\bar{\sigma} - \sigma', \bar{\tau} - \tau') \tilde{B}(\sigma', \tau') e^{\frac{i}{2}(\sigma'\bar{\tau} - \bar{\sigma}\tau')}. \quad (3.22)$$

Se aplicarmos a transformação de Fourier inversa, obtemos

$$C_W(q, p) = \int d\bar{\tau} d\bar{\sigma} d\sigma' d\tau' \tilde{A}(\bar{\sigma} - \sigma', \bar{\tau} - \tau') \tilde{B}(\sigma', \tau') e^{\frac{i}{2}(\sigma'\bar{\tau} - \bar{\sigma}\tau')} e^{-i(\bar{\sigma}q + \bar{\tau}p)} \quad (3.23)$$

Usando a mudança de variáveis dada por  $\bar{\sigma} = \sigma + \sigma'$  e  $\bar{\tau} = \tau + \tau'$ , chegamos a

$$C_W(q, p) = \int d\tau d\sigma d\sigma' d\tau' e^{\frac{i}{2}(\sigma'\tau - \sigma\tau')} \left( \tilde{A}(\sigma', \tau') e^{-i(\bar{\sigma}'q + \bar{\tau}'p)} \right) \left( \tilde{B}(\sigma, \tau) e^{-i(\bar{\sigma}q + \bar{\tau}p)} \right). \quad (3.24)$$

Percebamos que o fator  $e^{\frac{i}{2}(\sigma'\tau - \sigma\tau')}$  pode ser visto como a ação do operador  $e^{\frac{i}{2}\left(\frac{\partial}{\partial q'} \frac{\partial}{\partial p} - \frac{\partial}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p'}\right)}$  sobre os fatores  $\left(\tilde{a}(\sigma', \tau') e^{-i(\bar{\sigma}'q + \bar{\tau}'p)}\right)$  e  $\left(\tilde{b}(\sigma, \tau) e^{-i(\bar{\sigma}q + \bar{\tau}p)}\right)$ . Finalmente, podemos escrever a equação (3.24) na forma

$$C_W(q, p) = e^{\frac{i}{2}\left(\frac{\partial}{\partial q'} \frac{\partial}{\partial p} - \frac{\partial}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p'}\right)} \left( \int \int d\sigma' d\tau' \tilde{A}(\sigma', \tau') e^{-i(\bar{\sigma}'q + \bar{\tau}'p)} \right) \left( \int \int d\tau d\sigma \tilde{B}(\sigma, \tau) e^{-i(\bar{\sigma}q + \bar{\tau}p)} \right). \quad (3.25)$$

O último resultado pode ser escrito na forma

$$C_W(q, p) = e^{\frac{i}{2}\left(\frac{\partial}{\partial q'} \frac{\partial}{\partial p} - \frac{\partial}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p'}\right)} A_W(q', p') B_W(q, p); \quad (3.26)$$

e também

$$C_W(q, p) = A_W(q, p) e^{\frac{i}{2} \left( \overleftarrow{\frac{\partial}{\partial q}} \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial p}} - \overleftarrow{\frac{\partial}{\partial p}} \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial q}} \right)} B_W(q, p), \quad (3.27)$$

em que as setas indicam o sentido em que os operadores são aplicados. E este é o resultado inicialmente desejado, completando a demonstração.

$$C_W(q, p) = A_W(q, p) e^{\frac{i}{2} \left( \overleftarrow{\frac{\partial}{\partial q}} \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial p}} - \overleftarrow{\frac{\partial}{\partial p}} \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial q}} \right)} B_W(q, p) = A_W(q, p) \star B_W(q, p). \quad (3.28)$$

Com isso, define-se a operação denominada produto-estrela como,  $\Omega : AB \rightarrow (AB)_w$ , tal que

$$(AB)_w = A_w(q, p) e^{\frac{i\hbar\Lambda}{2}} B_w(q, p) = A_w(q, p) \star B_w(q, p), \quad (3.29)$$

ou seja  $\Omega(AB) = A_W(q, p) \star B_W(q, p)$ . Note que o mapeamento de Wigner,  $\Omega$ , é linear, isto é

$$\Omega(A + cB) = \Omega(A) + c\Omega(B). \quad (3.30)$$

O produto-estrela entre duas funções no espaço de fase pode ser escrito também da seguinte forma

$$(AB)_w = A_w \left( q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p}, p - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q} \right) B_w(q, p). \quad (3.31)$$

Nesta equação, percebemos que o produto-estrela entre duas funções definidas no espaço de fase eleva um delas à categoria de operador; a partir daí podemos definir o operador-estrela,  $A_W \star$ , dado por

$$A_W \star = A_w \left( q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p}, p - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q} \right). \quad (3.32)$$

Operadores-estrela serão muito úteis no próximo capítulo, quando apresentaremos uma representação do grupo de Galilei no espaço de fase.

### 3.1.4 Equação de Evolução

Considerando que a equação de Liouville Von-Neumann é dada por

$$i\hbar \partial_t \rho = H\rho - \rho H, \quad (3.33)$$

onde  $H$  é o Hamiltoniano e  $\rho$  é a matriz densidade. Vamos escrever a equação de evolução para a função de Wigner. Utilizando a aplicação de Wigner,  $\Omega$ , nesta equação, temos

$$i\hbar \partial_t \Omega(\rho) = \Omega(H\rho) - \Omega(\rho H). \quad (3.34)$$

Como  $\Omega(\rho) = f_w$ , e escrevendo  $\Omega(H) = H_w$ , encontramos

$$i\hbar \frac{\partial f_w}{\partial t} = \{H_w, f_w\}_M, \quad (3.35)$$

onde  $\{H_w, f_w\} = H_w \star f_w - f_w \star H_w$  é o parêntese de Moyal. O Hamiltoniano  $H_w(q, p)$  é uma função no espaço de fase, que coincide com o Hamiltoniano clássico, quando escrito em termos

da soma da energia cinética e potencial. De fato, se o operador  $H$  é do tipo  $H = \frac{\hat{p}^2}{2m} + v(\hat{q})$ , temos que  $H_w = \frac{p^2}{2m} + v(q)$ , que corresponde ao Hamiltoniano clássico. Um resultado bastante interessante é que no limite em que  $\hbar$  tende a zero, a função de Wigner obedece a equação de Liouville clássica, o que demonstra a praticidade de obtenção do princípio da correspondência no bojo do formalismo de Wigner. Para notar esse fato, basta tomar a equação

$$\frac{\partial f_w}{\partial t} = H_w \star f_w - f_w \star H_w, \quad (3.36)$$

e escrevê-la na forma

$$\frac{\partial f_w}{\partial t} = H_w e^{\frac{i\hbar\Lambda}{2}} f_w - H_w e^{-\frac{i\hbar\Lambda}{2}} f_w. \quad (3.37)$$

Utilizando a relação

$$\sin\left(\frac{i\hbar\Lambda}{2}\right) = \frac{e^{\frac{i\hbar\Lambda}{2}} - e^{-\frac{i\hbar\Lambda}{2}}}{2},$$

temos

$$\frac{\partial f_w}{\partial t} = 2iH_w \sin\left(\frac{i\hbar\Lambda}{2}\right) f_w. \quad (3.38)$$

Expandindo o  $\sin\left(\frac{i\hbar\Lambda}{2}\right)$  em série de Taylor, obtemos

$$\frac{\partial f_w}{\partial t} = 2iH_w \left[ \left(\frac{i\hbar\Lambda}{2}\right) - \frac{1}{3!} \left(\frac{i\hbar\Lambda}{2}\right)^3 + \dots \right] f_w. \quad (3.39)$$

Tomando  $\hbar \rightarrow 0$ , obtemos

$$\frac{\partial f_w}{\partial t} = H_w \Lambda f_w = \{H_w, f_w\}, \quad (3.40)$$

em que  $\{H_w, f_w\}$  é o parêntesis de Poisson, e essa última equação obtida é a equação de Liouville clássica. Este é um dos resultados mais importantes no formalismo de Wigner, pois evidencia que a correspondência entre a mecânica quântica e a mecânica clássica pode ser obtida tomando  $\hbar \rightarrow 0$ . Esse é um dos fatores que tornou o formalismo de Wigner ávido de estudos e aplicações posteriores.

O próximo passo será estudar o produto-estrela e suas propriedades, pois é a partir dele que definiremos operadores que permitem estabelecer uma representação simplética da álgebra de grupos cinemáticos.

### 3.1.5 Propriedades do Produto-Estrela

O enfoque nesta subseção será no estudo das propriedades do produto estrela. Já foi visto anteriormente que o produto envolvendo dois operadores quânticos na representação de Wigner é igual ao produto estrela dos respectivos equivalentes em Wigner. Também foi estudado que em toda equação dinâmica envolvendo a função de Wigner, o produto estrela sempre está envolvido.

Além disso, será importante o estudo do produto-estrela para se realizar a definição do operador-estrela, que será explorado para a construção de representações unitárias do grupos cinemáticos no espaço de fase.

$$f \star g = f(q, p) \exp \left[ \frac{i\hbar}{2} \left( \overleftarrow{\partial} \overrightarrow{\partial} - \overrightarrow{\partial} \overleftarrow{\partial} \right) \right] g(q, p), \quad (3.41)$$

onde as setas sobre os operadores diferenciais indicam o sentido em que eles se aplicam. Iremos discutir algumas propriedades envolvendo o produto estrela que serão muito úteis nos desenvolvimentos posteriores.

- Propriedade 1

Produto estrela onde um dos fatores é uma constante. Seja  $c \in C$ . Então

$$c \star f(q, p) = f(q, p) \star c = cf(q, p). \quad (3.42)$$

- Propriedade 2

Operador-Estrela: O produto estrela entre duas funções no espaço de fase eleva uma delas a categoria de operador,

$$\begin{aligned} f(q, p) \star g(q, p) &= f\left(q + \frac{i\hbar}{2} \overrightarrow{\partial}_p, p - \frac{i\hbar}{2} \overrightarrow{\partial}_p\right) g(q, p) \\ &= f(q, p) \star g(q, p) = f(q, p) g\left(q - \frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_p, p + \frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_q\right). \end{aligned}$$

Definimos

$$\widehat{f} = f(q, p) \star, \quad (3.43)$$

que será chamado de operador-estrela.

- Propriedade 3

O Produto estrela é associativo. Seja  $f, g$  e  $h$  funções no espaço de fase. Então,

$$(f(q, p) \star g(q, p)) \star h(q, p) = f(q, p) \star (g(q, p) \star h(q, p)). \quad (3.44)$$

- Propriedade 4

O produto estrela não é comutativo, isso significa que

$$f(q, p) \star g(q, p) \neq g(q, p) \star f(q, p).$$

Ou seja,  $f(q, p) e^{\frac{i\hbar\Lambda}{2}} g(q, p) \neq g(q, p) e^{\frac{i\hbar\Lambda}{2}} f(q, p)$ . Pois na verdade,

$$f(q, p) e^{\frac{i\hbar\Lambda}{2}} g(q, p) = g(q, p) e^{-\frac{i\hbar\Lambda}{2}} f(q, p). \quad (3.45)$$

- Propriedade 5

O Produto estrela e a Conjugação Complexa:

A conjugação complexa inverte a ordem do produto estrela. Um fato análogo ao conjugado complexo de dois operadores usuais.

$$(f \star g)^\dagger = g^\dagger \star f^\dagger. \quad (3.46)$$

- Propriedade 6

A Integral do Produto estrela no Espaço de Fase

$$\int f(q, p) \star g(q, p) dq dp = \int f(q, p) g(q, p) dq dp. \quad (3.47)$$

Para essa propriedade faça sentido é necessário a convergência da integral. A condição necessária para que a convergência ocorra é a anulação das funções  $f(q, p)$  e  $g(q, p)$  no infinito.

- Propriedade 7

O produto-estrela entre duas funções  $f(q, p)$  e  $g(q, p)$  no espaço de fase pode ser representado por meio de uma integral da seguinte forma:

$$f(q, p) \star g(q, p) = \frac{1}{(\pi\hbar)^2} \int dq' dq'' dp' dp'' f(q', p') g(q'', p'') e^{-\frac{2i}{\hbar} [p(q'-q'')+p'(q''-q)+p''(q-q')]}. \quad (3.48)$$

A última equação é conhecida como forma integral do produto-estrela. A dedução dessa equação é apresentada a seguir. Para esse fim, considere a expressão escrita por meio de delta de Dirac,

$$f(q, p) = \int dq' dp' f(q', p') g(q', p') \delta(q - q') \delta(p - p'). \quad (3.49)$$

Se utilizarmos a representação integral da delta de Dirac, podemos escrever a Eq.(3.49) como

$$f(q, p) = \left( \frac{1}{2\pi\hbar} \right)^2 \int dudvdq' dp' f(q', p') g(q', p') e^{-\frac{i}{\hbar} [v(p'-p)+u(q'-q)]}. \quad (3.50)$$

Se utilizarmos a Propriedade 2, ou seja,  $f(q, p) \star g(q, p) = f(q + \frac{i\hbar}{2} \vec{\partial}_p, p - \frac{i\hbar}{2} \vec{\partial}_p) g(q, p)$ , em conjunto com a Eq.(3.50), o produto-estrela pode ser escrito

$$\begin{aligned} f(q, p) \star g(q, p) &= \left( \frac{1}{2\pi\hbar} \right)^2 \int dudvdq' dp' f(q', p') g(q', p') e^{-\frac{i}{\hbar} [v(p'-p)+u(q'-q)]} \\ &\times e^{-\frac{i}{\hbar^2} [-iu\partial_p + iv\partial_q]} g(q, p). \end{aligned}$$

Note que a relação de Glauber,  $e^{(A+B)} = e^A e^B e^{\frac{1}{2}[A,B]}$ , foi utilizada para separar exponenciais no integrando da última equação. Por fim, se tomarmos a mudança de variáveis  $q'' = q + \frac{v}{2}$  e  $p'' = p - \frac{u}{2}$ , obtemos

$$f(q, p) \star g(q, p) = \frac{1}{(\pi\hbar)^2} \int dq' dq'' dp' dp'' f(q', p') g(q'', p'') e^{-\frac{2i}{\hbar} [p(q'-q'')+p'(q''-q)+p''(q-q')]}, \quad (3.51)$$

que é a forma integral do produto-estrela.

### 3.1.6 A Negatividade da Função de Wigner

Conforme já discutimos no início do capítulo, a função de Wigner pode admitir valores negativos. Esse fato era considerado problemático, pelo simples fato de que uma autêntica distribuição de probabilidades ser positivo-definida. Sendo assim, a função de Wigner passou a ser classificada como uma quase-probabilidade, pois apesar de não ser positivo-definida, probabilidades marginais são obtidas a partir da sua integração. Por muito tempo, a parte negativa da função de Wigner não era compreendida e não se enxergava vantagem nessa característica do formalismo de Wigner. Porém, estudos recentes tem considerado o volume da parte negativa da função de Wigner como um indicador de não-classicalidade do sistema, e essa proeminente interpretação passou a ser aplicada e várias áreas, dentre as quais destaca-se o emaranhamento quântico e a computação quântica [108, 109]. Esses estudos foram motivados pelo trabalho seminal de Kenfack e Życzkowsky [107], os quais definiram um parâmetro, denominado parâmetro de negatividade do sistema. Este parâmetro é uma medida do volume da parte negativa da função de Wigner, e é dado pela expressão

$$\eta(\psi) = \int [|f_W(q, p)| - 1] dq dp. \quad (3.52)$$

Nesse sentido,  $\eta(\psi)$  tem relação com a não-classicalidade do estado  $\psi$ . Compreender o que distingue a mecânica quântica da mecânica clássica é crucial para aplicações no bojo da teoria de informação quântica. Por este motivo, o estudo desse parâmetro tem auxiliado na análise de sistemas de qbits que podem ser vantajosos nas aplicações na computação quântica, por exemplo [110]. Nesta tese, utilizaremos este parâmetro para estudar a não-classicalidade de alguns sistemas físicos.

## 3.2 A Mecânica Quântica Simplética

Nesta seção, faremos uma revisão sobre o formalismo da mecânica quântica simplética proposto nas referências [57, 58, 59, 60]. Neste formalismo, a equação de Schrödinger é obtida no espaço de fase mediante uma representação unitária e irredutível do grupo de Galilei. O formalismo possui conexão com o formalismo de Wigner, conforme veremos no desenvolvimento do texto.

### 3.2.1 Variedade Simplética e Espaço de Hilbert

No primeiro momento, apresentamos a definição de espaço de fase, qual seja: considere uma variedade analítica  $\mathbb{M}$  onde cada ponto é especificado por coordenadas Euclidianas,  $q^i$  com  $i = 1, 2, 3$ . As coordenadas de cada ponto são fibrados cotangentes  $\Gamma = T^*\mathbb{M}$  é denotado por  $(q^i, p^i)$ . O espaço  $\Gamma$  é munido com uma estrutura simplética de 2-forma

$$\omega = \sum_{i=1}^3 dq^i \wedge dp^i, \quad (3.53)$$

chamada forma simplética. Essa forma simplética em conjunto com o operador,

$$\Lambda = \sum_{i=1}^3 \overleftarrow{\frac{\partial}{\partial q^i}} \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial p^i}} - \overleftarrow{\frac{\partial}{\partial p^i}} \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial q^i}}, \quad (3.54)$$

induz o parêntese de Poisson para as funções de classe  $C^\infty$ ,  $f(q, p)$  e  $g(q, p)$ , temos

$$\omega(f\Lambda, g\Lambda) = f\Lambda g = \{f, g\}, \quad (3.55)$$

onde  $\{f, g\} = \sum_{i=1}^3 \left( \frac{\partial f}{\partial q^i} \frac{\partial g}{\partial p^i} - \frac{\partial f}{\partial p^i} \frac{\partial g}{\partial q^i} \right)$ . Identificamos o campo vetorial em  $\Gamma$  por

$$f\Lambda = X_f = \sum_{i=1}^3 \left( \frac{\partial f}{\partial q^i} \frac{\partial}{\partial p^i} - \frac{\partial f}{\partial p^i} \frac{\partial}{\partial q^i} \right), \quad (3.56)$$

onde  $f = f(q^i, p^i) \in C^\infty(\Gamma)$ . O espaço  $\Gamma$  munido com essa estrutura simplética, é chamado espaço de fase.

Na sequência, trazemos o espaço de Hilbert associado ao espaço de fase  $\mathcal{H}(\Gamma)$ . Isso se faz necessário pelo fato de que será construído um formalismo para mecânica quântica no espaço de fase, em que deverá valer toda a estrutura de uma álgebra linear. Nesse sentido, necessitamos de um espaço em que os elementos básicos sejam funções definidas no espaço de fase  $\Gamma$ . Vamos construir um espaço de Hilbert sob  $\Gamma$  de modo que  $\mu$  seja uma medida invariante no fibrado cotangente. Se  $\varphi$  é um mapeamento:  $\Gamma \rightarrow \mathbb{R}$  que é mensurável, então definimos a integral de  $\varphi$  com relação a  $\mu$  como

$$\int_{\Omega} \varphi(z) d\mu(z), \quad (3.57)$$

onde  $z \in \Gamma$ . Seja  $\mathcal{H}(\Gamma)$  um subespaço linear do espaço de funções mensuráveis- $\mu$   $\psi: \Gamma \rightarrow \mathbb{C}$  que são de quadrado integrável tal que

$$\int_{\Omega} |\psi(z)|^2 d\mu(z) < \infty. \quad (3.58)$$

Onde  $\mathcal{H}(\Gamma)$  é munido do produto interno  $\langle \cdot | \cdot \rangle$  por

$$\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = \int_{\Omega} \psi_1(q, p)^\dagger \psi_2(q, p) d\mu(q, p), \quad (3.59)$$

tomamos  $z = (q^i, p^i) = (q, p)$ , e  $\psi(q, p) \in C^\infty(\Gamma)$  é tal que

$$\int d^3p d^3q \psi^\dagger(q, p) \psi(q, p) < \infty. \quad (3.60)$$

Então  $\mathcal{H}(\Gamma)$  é um espaço de Hilbert.

Neste caso, temos  $\psi(q, p) = \langle q, p | \psi \rangle$ , com

$$\int d^3p d^3q |q, p\rangle \langle q, p| = 1, \quad (3.61)$$

a qual é a relação de completeza.

### 3.2.2 Representação do Grupo de Galilei no Espaço de Fase

Vamos estudar o grupo de Galilei tomando  $H(\Gamma)$  como espaço de representação. Para este fim, utilizaremos os operadores-estrela definidos na seção anterior, mais especificamente na Eq. 3.43. Esses operadores podem ser escrito como

$$\widehat{F} = f(q, p) \star = f\left(q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p}, p - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q}\right). \quad (3.62)$$

Nesse bojo, os operadores-estrela correspondentes aos operadores posição e momentum são escritos como

$$\widehat{P} = p \star = p - \frac{i\hbar}{2} \partial_q, \quad (3.63)$$

$$\widehat{Q} = q \star = q + \frac{i\hbar}{2} \partial_p. \quad (3.64)$$

Os operadores definidos nas Eqs. 3.63-3.64 são de fato os operadores posição e momentum, no sentido que satisfazem a relação de incerteza de Heisenberg, a qual se manifesta algebricamente pela relação de comutação

$$[\widehat{P}_i, \widehat{Q}_j] = i\hbar \delta_{ij}, \quad (3.65)$$

em que  $\delta_{ij}$  é o delta de Kronecker.

Usando os operadores posição e momentum dados, podemos definir os seguintes operadores

$$\widehat{K} = k \star = mq \star - tp \star = m\widehat{Q} - t\widehat{P}, \quad (3.66)$$

$$\widehat{L} = \epsilon_{ijk} \widehat{Q}_j \widehat{P}_k \quad (3.67)$$

$$= \epsilon_{ijk} \widehat{q}_j \widehat{p}_k - \frac{i\hbar}{2} \epsilon_{ijk} q_j \frac{\partial}{\partial p_k} + \frac{i\hbar}{2} \epsilon_{ijk} p_k \frac{\partial}{\partial q_j} + \frac{\hbar^2}{4} \frac{\partial^2}{\partial q_j \partial p_k} \quad (3.68)$$

$$\widehat{H} = \frac{\widehat{P}^2}{2m}. \quad (3.69)$$

Os operadores assim definidos satisfazem à álgebra de Lie do Grupo de Galilei que é dada

pelas seguintes relações de comutação

$$\begin{aligned}
\left[\widehat{L}_i, \widehat{L}_j\right] &= i\hbar\epsilon_{ijk}\widehat{L}_k, \\
\left[\widehat{L}_i, \widehat{K}_j\right] &= i\hbar\epsilon_{ijk}\widehat{K}_k, \\
\left[\widehat{L}_i, \widehat{P}_j\right] &= i\hbar\epsilon_{ijk}\widehat{P}_k, \\
\left[\widehat{L}_i, \widehat{H}\right] &= 0, \\
\left[\widehat{K}_i, \widehat{K}_j\right] &= 0, \\
\left[\widehat{K}_i, \widehat{P}_j\right] &= i\hbar m\delta_{ij}, \\
\left[\widehat{K}_i, \widehat{H}\right] &= 2i\hbar m\widehat{P}_i, \\
\left[\widehat{P}_i, \widehat{P}_j\right] &= 0, \\
\left[\widehat{P}_i, \widehat{H}\right] &= 0.
\end{aligned} \tag{3.70}$$

A extensão central da algebra de Galilei-Lie é dada pela constante  $m$ . A demonstração da relação de comutação destes operadores pode ser encontrada na referência [58].

O conteúdo físico desta representação é deduzida, em primeiro lugar, ao observar que  $\widehat{Q}$  e  $\widehat{P}$  são transformados pelo boost de acordo com

$$\exp\left(-iv \cdot \widehat{K}/\hbar\right) \widehat{Q}_j \exp\left(iv \cdot \widehat{K}/\hbar\right) = \widehat{Q}_j + v_j t \tag{3.71}$$

e

$$\exp\left(-iv \cdot \widehat{K}/\hbar\right) \widehat{P}_j \exp\left(iv \cdot \widehat{K}/\hbar\right) = \widehat{P}_j + mv_j. \tag{3.72}$$

Ou seja, além de satisfazerem a relação de Heisenberg, os operadores  $\widehat{Q}$  e  $\widehat{P}$  se transformam, de acordo com o boost (mudança de referencial), como posição e momentum; podendo assim, serem caracterizados como os observáveis físicos posição e momentum.

Porém, pelo fato de não comutarem, os autovalores de  $\widehat{Q}$  e  $\widehat{P}$  não podem ser utilizados simultaneamente para definir uma função no espaço de fase. Porém, se definirmos os operadores c-numbers dados por

$$Q = q\mathbf{1} = \widehat{Q} - \frac{i\hbar}{2}\partial_p, \tag{3.73}$$

$$P = p\mathbf{1} = \widehat{P} + \frac{i\hbar}{2}\partial_q, \tag{3.74}$$

percebemos que  $Q$  e  $P$  se transformam pelo boosts de acordo com

$$\exp\left(-iv \cdot \widehat{K}/\hbar\right) Q_j \exp\left(iv \cdot \widehat{K}/\hbar\right) = Q_j + v_j t \tag{3.75}$$

e

$$\exp\left(-iv \cdot \widehat{K}/\hbar\right) P_j \exp\left(iv \cdot \widehat{K}/\hbar\right) = P_j + mv_j, \tag{3.76}$$

além de comutarem, isto é,  $[Q, P] = 0$ . A demonstração das equações (3.75) e (3.76) é apresentada a seguir. Para esse fim, utilizaremos a identidade

$$e^A B e^{-A} = \sum_{n=0}^{\infty} [A, B]_n,$$

em que  $[A, B]_0 = B$ ,  $[A, B]_1 = [A, B]$ ,  $[A, B]_2 = [A, [A, B]]$ , e em geral  $[A, B]_n = [A, [A, B]_{n-1}]$ . Dessa forma, temos que

$$\exp\left(-iv \cdot \widehat{K}/\hbar\right) Q_j \exp\left(iv \cdot \widehat{K}/\hbar\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{iv}{\hbar} [\widehat{K}, Q_j]_n.$$

Uma vez que  $[\widehat{K}, Q_j] = Q_j + \frac{i\hbar}{2} \delta_{ij}$ , obtemos o resultado

$$\exp\left(-iv \cdot \widehat{K}/\hbar\right) Q_j \exp\left(iv \cdot \widehat{K}/\hbar\right) = Q_j + v_j t.$$

Sendo assim, embora  $Q$  e  $P$  não possam ser interpretados como observáveis posição e momentum, eles guardam conteúdo de posição e momentum. E ainda, devido ao fato de valermem as seguintes relações,

$$Q|q, p\rangle = q|q, p\rangle \quad \text{e} \quad P|q, p\rangle = p|q, p\rangle, \quad (3.77)$$

com

$$\langle q, p|q', p'\rangle = \delta(q - q') \delta(p - p'), \quad (3.78)$$

e

$$\int dpdq |q, p\rangle \langle q, p| = 1, \quad (3.79)$$

os seus autovalores podem ser usados para se definir uma função no espaço de fase, já que eles comutam. Assim, podemos definir uma função no espaço de Hilbert associado ao espaço de fase,  $\mathcal{H}(\Gamma)$ , que denominaremos de  $\psi(q, p)$ . Esta função será utilizada para representar o estado de um sistema físico, isto é.  $\psi(q, p, t) = \langle q, p|\psi(t)\rangle$ .

Da equação (3.79), temos

$$\langle \psi|\phi\rangle = \langle \psi|\left(\int dpdq |q, p\rangle \langle q, p|\right)|\phi\rangle = \int dpdq \psi^\dagger(q, p) \phi(q, p). \quad (3.80)$$

Usando a definição de produto estrela temos,

$$\langle \psi|\phi\rangle = \int dpdq \psi^\dagger(q, p) \star \phi(q, p). \quad (3.81)$$

A média de um observável físico  $\widehat{A}(q, p) = a(q, p; t) \star$ , no estado  $\psi(q, p)$  é dado por

$$\begin{aligned} \langle \widehat{A}\rangle &= \int dpdq \psi^\dagger(q, p) \widehat{A} \phi(q, p) \\ &= \int dpdq \psi^\dagger(q, p) [a(q, p) \star \psi(q, p)] \\ &= \int dpdq a(q, p) [\psi(q, p) \star \psi^\dagger(q, p)] \end{aligned} \quad (3.82)$$

A quantidade  $\langle \widehat{A}\rangle$  pode ser real se o espectro de  $\langle \widehat{A}\rangle$  é real.

### 3.2.3 A Equação de Schrödinger no Espaço de Fase

Utilizando os elementos da seção precedente, podemos usar o operador evolução temporal  $\hat{H}$  para evoluir o estado físico  $\psi(q, p)$ , isto é,

$$\psi(q, p, t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\psi(q, p, 0). \quad (3.83)$$

Derivando ambos os lados dessa última equação em relação ao tempo, obtemos

$$-i\hbar\partial_t\psi(q, p, t) = \hat{H}\psi(q, p, t), \quad (3.84)$$

a qual pode ser escrita como

$$-i\hbar\partial_t\psi(q, p, t) = \left( \frac{p^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{8m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} - \frac{i\hbar p}{2m} \frac{\partial}{\partial q} \right) \psi(q, p, t) + \hat{V} \left( q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right) \psi(q, p, t), \quad (3.85)$$

a qual é a Equação de Schrödinger no espaço de fase. Esta mesma equação independente do tempo é dada por

$$\hat{H}\psi(q, p) = E\psi(q, p), \quad (3.86)$$

em que  $E$  representa na energia do sistema físico.

Um resultado físico fundamental neste formalismo é a conexão  $\psi(q, p; t)$  com a função de Wigner, que é dada por

$$f_W(q, p) = \psi(q, p) \star \psi^*(q, p). \quad (3.87)$$

Esta relação nos fornece a interpretação física do proeminente formalismo. A demonstração desta propriedade é feita por meio da comparação das propriedades satisfeitas pela função de Wigner e pela função definida por  $\psi(q, p) \star \psi^*(q, p)$ .

Primeiramente, a partir da Eq. (3.87), podemos provar que  $f(q, p, t) = \psi(q, p, t) \star \psi^\dagger(q, p, t)$  satisfaz a Eq. (3.86) [58]. Além disso, se utilizarmos a associatividade do produto-estrela e a relação

$$\int dqdp\psi(q, p, t) \star \psi^\dagger(q, p, t) = \int dqdp\psi(q, p, t)\psi^\dagger(q, p, t),$$

temos que

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \langle \psi | A | \psi \rangle \\ &= \int dqdp\psi(q, p, t)\hat{A}(q, p)\psi^\dagger(q, p, t) \\ &= \int dqdpf_W(q, p, t)A(q, p, t), \end{aligned}$$

em que  $\hat{A}(q, p) = A(q, p) \star$  é um observável. Nesse sentido, a função de Wigner pode ser calculada por meio da expressão

$$f_W(q, p) = \psi(q, p) \star \psi^\dagger(q, p). \quad (3.88)$$

Pode ser notado ainda que a equação de autovalores,

$$H(q, p) \star \psi = E\psi, \quad (3.89)$$

resulta em  $H(q, p) \star f_W = E f_W$ . Portanto,  $\psi(q, p)$  and  $f_W(q, p)$  satisfazem a mesma equação diferencial.

Esses últimos resultados mostram que a Eq. (3.84) é o ponto de partida fundamental para a descrição da mecânica quântica no espaço de fase, e é totalmente compatível com o formalismo de Wigner. Além disso, é importante enfatizar que o formalismo simplético apresentado faz emergir a possibilidade de superposição de soluções, o que não é possível, em geral, no formalismo usual da função de Wigner. Outro aspecto atrativo deste formalismo é a possibilidade de desenvolver técnicas perturbativas, tendo em vista que seu desenvolvimento utilizou como pano de fundo matemático a noção de espaços lineares.

### 3.2.4 Equação de Schrödinger no Espaço de Fase e Teoria de Calibre

Neste espaço discutiremos a introdução de interação entre campo de Schrödinger e outros campos, como por exemplo, o eletromagnético. A exposição aqui apresentada seguirá de perto a referência [63]. Cabe destacar que no formalismo de Wigner usual esse procedimento não é bem definido, pelo fato da função de Wigner ser real, e por conseguinte, não é possível sua vinculação a uma fase complexa. Para este fim, considere a seguinte densidade de Lagrangiana para o sistema livre ( $V(q) \star = 0$ ), a qual é dada por

$$\mathcal{L} = \psi^\dagger(q, p, t) \left( i\hbar \partial_t - \frac{p_\star^2}{2m} \right) \psi(q, p, t),$$

a partir da qual obtemos a equação de Schrödinger no espaço de fase

$$i\hbar \partial_t \psi(q, p, t) = p^2 \star \psi(q, p, t). \quad (3.90)$$

(a partir deste ponto consideramos  $\hbar = 1$ , sem perda de generalidade). Vamos investigar a invariância dessa equação sob transformações de calibre local. Considere a transformação dada por

$$\psi \rightarrow e^{-i\Lambda} \star \psi, \quad (3.91)$$

onde  $\Lambda \equiv \Lambda(q, p, t)$ . Para  $\Lambda \ll 1$ , temos

$$\delta\psi = -i\Lambda \star \psi. \quad (3.92)$$

Então, obtemos

$$\delta(p^2 \star \psi) = -ip^2 \star \Lambda \star \psi, \quad (3.93)$$

e

$$\delta(\partial_t \psi) = -i(\partial_t \Lambda) \star \psi - i\Lambda \star (\partial_t \psi). \quad (3.94)$$

É importante perceber que  $(p \star \psi)$  e  $\partial_t \psi$  não se transformam da mesma forma que  $\psi$ . Logo Eq. (3.90) não é invariante sob transformações definidas por Eq. (3.91). Na perspectiva de se resolver este problema definimos os operadores  $D_k \star = p \star - iA_k \star$  e  $D_0 = \partial_t - i\phi$ ,  $k = 1, 2, 3$ , tais que Eq. (3.90) é escrita como

$$(D_k)^2 \psi = iD_0 \psi, \quad (3.95)$$

onde  $A = (A_k, \phi)$ . Agora devemos mostrar a invariância da Eq. (3.95) com relação a transformações do tipo Eq. (3.91). A partir de Eq. (3.92), mostra-se que

$$\begin{aligned}
\delta(D_k \star \psi) &= \delta(p_k \star \psi) - i\delta(A_k \star \psi) \\
&= -ip_k \star (\Lambda \star \psi) - A_k \star (\Lambda \star \psi) - i(\delta A_k) \star \psi \\
&= -ip_k(\Lambda \star \psi) - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial q_k} (\Lambda \star \psi) - A_k \star (\Lambda \star \psi) \\
&\quad - i(\delta A_k) \star \psi \\
&= -ip_k(\Lambda \star \psi) - \frac{1}{2} \frac{\partial \Lambda}{\partial q_k} \star \psi - \frac{1}{2} \Lambda \star \frac{\partial \psi}{\partial q_k} \\
&\quad - A_k \star (\Lambda \star \psi) - i(\delta A_k) \star \psi.
\end{aligned} \tag{3.96}$$

Usando a identidade

$$p_k(f \star g) = f \star (p_k g) - \frac{i}{2} (\partial_{q_k} f) \star g, \text{ temos}$$

$$\begin{aligned}
\delta(D_k \star \psi) &= -i\Lambda \star (p_k \psi) - \frac{1}{2} \Lambda \star \frac{\partial \psi}{\partial q_k} - \frac{\partial \Lambda}{\partial q_k} \star \psi \\
&\quad - A_k \star (\Lambda \star \psi) - i(\delta A_k) \star \psi \\
&= -i\Lambda \star (p_k \star \psi) - \frac{\partial \Lambda}{\partial q_k} \star \psi \\
&\quad - A_k \star (\Lambda \star \psi) - i(\delta A_k) \star \psi.
\end{aligned} \tag{3.97}$$

E, sob transformações de segunda espécie, tem-se

$$A'_k \rightarrow A_k + i\{A_k, \Lambda\}_M + i\frac{\partial \Lambda}{\partial q_k}, \tag{3.98}$$

onde  $\{a, b\}_M = a \star b - b \star a$  é o parêntese de Moyal. Então, usando Eq. (3.98) e  $\delta A_k = A'_k - A_k$ , Eq. (3.97) reduz-se a

$$\begin{aligned}
\delta(D_k \star \psi) &= -i\Lambda \star (p_k \star \psi) - \Lambda \star A_k \star \psi \\
&= -i\Lambda \star (p_k \star -iA_k \star) \psi.
\end{aligned}$$

Finalmente obtemos

$$\delta(D_k \star \psi) = -i\Lambda \star (D_k \star \psi), \tag{3.99}$$

o qual é o resultado esperado.

Agora, analisamos a invariância de  $D_0 \star \psi = \partial_t \psi - i\phi \star \psi$ . A partir da Eq. (3.92), mostra-se que

$$\begin{aligned}
\delta D_0 \psi &= \partial_t(-i\Lambda \star \psi) - i(\delta \phi) \star \psi - i\phi \star (-i\Lambda \star \psi) \\
&= -i(\partial_t \Lambda) \star \psi - i\Lambda \star (\partial_t \psi) \\
&\quad - i(\delta \phi) \star \psi - \phi \star \Lambda \star \psi.
\end{aligned} \tag{3.100}$$

Sob a transformação de calibre, desejamos que

$$\phi' \rightarrow \phi + i\{\phi, \Lambda\}_M - \frac{\partial \Lambda}{\partial t}. \tag{3.101}$$

então, usando Eq. (3.101) e  $\delta\phi = \phi' - \phi$ , Eq. (3.100) fica dada por

$$\delta(D_0 \star \psi) = -i\Lambda \star (D_0\psi). \quad (3.102)$$

o que prova a invariância de calibre.

É importante enfatizar que a equação de Schrödinger no espaço de fase é invariante sob transformações de calibre de segunda espécie, isto é,

$$(D'_k \star)^2 \psi' = iD'_0 \psi', \quad (3.103)$$

onde  $D'_k \star = p \star - iA' \star$  e  $D'_0 = \partial_t - i\phi'$ . Com isso, é possível introduzir a interação eletromagnética no espaço de fase. Exigindo a invariância de  $\mathcal{L}$  por uma transformação de calibre local, i.e.  $\psi(q, p, t) \rightarrow e^{i\Lambda(q,p)}\psi(q, p, t)$ , somos induzidos à derivada covariante tal que  $\hat{p}_k \rightarrow \hat{p}_k - iA_k(q)\star$ .

Este resultado traz outra vantagem do formalismo da mecânica quântica simplética apresentado em relação ao formalismo usual de Wigner. Aqui é possível a definição, sem conflito, da interação entre o campo de Schrödinger e outros campos da natureza no âmbito do espaço de fase. Na sequência, definiremos a densidade de Lagrangiana para a equação de Schrödinger com interação quártica no espaço de fase, a qual é também denominada equação de Gross-Pitaevskii no espaço de fase.

Agora consideraremos casos com interação. Nesse sentido, temos que a densidade Lagrangiana invariante de Galilei para bósons com uma auto-interação não-linear é

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \frac{i\hbar}{2} \left( \psi^\dagger \partial_t \psi - \psi \partial_t \psi^\dagger \right) + \frac{i\hbar p}{4m} \left( \psi^\dagger \partial_q \psi - \psi \partial_q \psi^\dagger \right) \\ & - \frac{p^2}{2m} \left( \psi \psi^\dagger \right) - \frac{\hbar^2}{8m} \partial_q \psi \partial_q \psi^\dagger + \left( \psi \psi^\dagger \right)^2. \end{aligned} \quad (3.104)$$

Então da equação de Euler-Lagrange temos [56],

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(q, p, t) = \left( \frac{p^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{8m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} - \frac{i\hbar p}{2m} \frac{\partial}{\partial q} \right) \psi(q, p, t) + \lambda \left( \psi \psi^\dagger \right) \psi(q, p, t),$$

que descreve uma extensão da equação Gross-Pitaevskii para o espaço de fase. Esta será uma das equações de interesse no nosso trabalho.

### 3.2.5 Exemplo

É também relevante mostrarmos um exemplo do formalismo de espaço de fase apresentado neste capítulo. Para esse fim, apresentaremos a equação de Schrödinger no espaço de fase submetida ao potencial do oscilador harmônico e então determinaremos a função de Wigner associada. Para esse fim, consideremos a equação dada por

$$\frac{1}{2}(q^2 + p^2) \star \psi(q, p) = E\psi(q, p), \quad (3.105)$$

note que consideramos  $m = 1$ ,  $\hbar = 1$ ,  $\omega = 1$ . A Eq.(3.105) pode ser escrita como

$$\left( q^2 + iq\partial_p - \frac{1}{4}\partial_p^2 + p^2 - ip\partial_q - \frac{1}{4}\partial_q^2 \right) \psi(q, p) = 2E\psi(q, p). \quad (3.106)$$

Façamos agora a seguinte mudança de variáveis  $z = q^2 + p^2$ . Com isso, obtemos  $\partial_q = 2q\partial_z$ ,  $\partial_p = 2p\partial_z$ ,  $\partial_q^2 = 2\partial_z + 4q^2\partial_z^2$  e  $\partial_p^2 = 2\partial_z + 4p^2\partial_z^2$ . Substituindo essas derivadas na Eq.(3.106), obtemos

$$z\partial_z^2\psi(z) + \partial_z\psi(z) + (2E - z)\psi(z) = 0. \quad (3.107)$$

Tomando  $\psi(z) = e^{-z}L(z)$ , e  $z = \frac{1}{2}\omega$ , obtemos

$$\omega\partial_\omega^2L + (1 - \omega)\partial_\omega L + \frac{1}{2}(2E - 1)L = 0, \quad (3.108)$$

a qual é a equação diferencial de Laguerre. Logo, devemos ter necessariamente

$$\frac{1}{2}(2E - 1) = n,$$

em que  $n$  é um número natural, isto é,  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ . E a solução ficará dada por

$$\psi(q, p) = e^{-(q^2+p^2)}L_n\left(\frac{1}{2}(q^2 + p^2)\right), \quad (3.109)$$

em que  $L_n$  representa o polinômio de Legendre de ordem  $n$ . Usando as amplitudes no espaço de fase obtidas, podemos calcular a função de Wigner associada ao oscilador harmônico. Para esse fim, usaremos a relação

$$f_W(q, p) = \psi^*(q, p) \star \psi(q, p).$$

Note que a amplitude é uma função real, e por isso, o resultado do produto-estrela é proporcional à própria função, isto é  $\phi \star \phi \sim \phi$ . Assim, temos que a função de Wigner para o oscilador harmônico é dada por

$$f_W(q, p) = Ne^{-(q^2+p^2)}L_n\left(\frac{1}{2}(q^2 + p^2)\right), \quad (3.110)$$

em que  $N$  é uma constante de normalização. Para determinar esta constante, usamos a relação

$$\int f_W(q, p)dqdp = 1.$$

Fazendo isso, temos que

$$N \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-(q^2+p^2)}L_n\left(\frac{1}{2}(q^2 + p^2)\right) dqdp = 1.$$

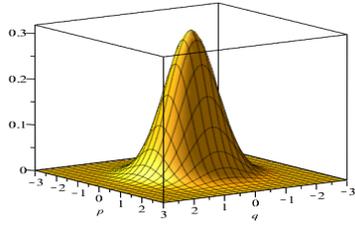
Isso nos leva a

$$N = \frac{(-1)^n}{\pi}.$$

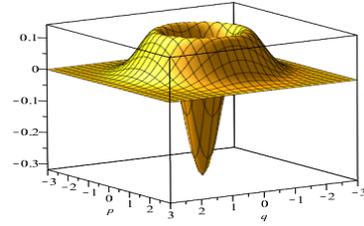
E a função de Wigner correspondente ao oscilador harmônico no espaço de fase fica dada por

$$f_W(q, p) = \frac{(-1)^n}{\pi} e^{-(q^2+p^2)}L_n\left(\frac{1}{2}(q^2 + p^2)\right). \quad (3.111)$$

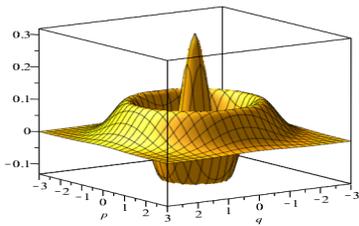
Se plotarmos o resultado dado na Eq.(3.111) para alguns valores de  $n$ , obtemos os comportamentos dados nas Figuras (3.1(a)-3.1(d)).



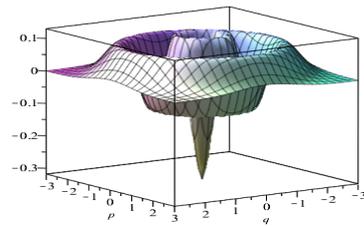
(a) Função de Wigner - oscilador harmônico -  $n=0$



(b) Função de Wigner - oscilador harmônico -  $n=1$



(c) Função de Wigner - oscilador harmônico -  $n=2$



(d) Função de Wigner - oscilador harmônico -  $n=3$

Os gráficos dados nas Figuras (3.1(a)-3.1(d)) representam a função de Wigner para  $n = 0$ ,  $n = 1$ ,  $n = 2$  e  $n = 3$ , respectivamente. Observamos que são condizentes com os disponíveis na literatura [46] para o mesmo sistema. Além disso, percebemos que ao aumentarmos o valor de  $n$ , a parte negativa do gráfico se torna maior. Uma medida quantitativa desta parte negativa é obtida a partir do parâmetro de negatividade, o qual está relacionado ao volume da parte negativa da função de Wigner. A Tabela (3.1), mostrada a seguir, traz o valor calculado do parâmetro de negatividade para alguns valores de  $n$ .

Tabela 3.1: Parâmetro de Negatividade - Oscilador Harmônico

$n$	Parâmetro de Negatividade
0	0
1	0,4261
2	0,7289
3	0,9767
4	1,1914

Note que para  $n = 0$ , o parâmetro de negatividade é nulo, e com o aumento de  $n$  o seu valor também aumenta. Uma interpretação que podemos inferir do crescimento do parâmetro de negatividade com o aumento de  $n$  é que à medida que o nível de energia do oscilador harmônico vai crescendo, o sistema vai se afastando do análogo clássico. A partir desta interpretação, o fato de o parâmetro ser nulo quando  $n = 0$  nos leva a concluir que no nível fundamental há proximidade entre o sistema quântico e o clássico. É muito interessante enfatizarmos que todos os resultados apresentados neste exemplo são compatíveis com os resultados já obtidos na literatura e calculados por outros métodos [46, 107].

## Capítulo 4

# Métodos de simetria

### 4.1 Introdução aos Grupos e Álgebras de Lie

Vamos fazer uma revisão sobre grupos e álgebras de Lie, desenvolvidos inicialmente por Lie para o estudo de soluções e classificação de equações diferenciais utilizando grupos de simetrias contínuas que denominamos aqui grupos de Lie. A revisão apresentada segue as referências [102, 104, 105]. Nesta primeira parte, iniciamos com a noção de grupo e conduzimos até a noção de grupos e álgebras de Lie.

#### Propriedades Algébricas

Um grupo é um conjunto dotado de uma lei de composição  $(\cdot)$  satisfazendo os seguintes axiomas:

- Associatividade

Seja  $a, b, c$  elementos de  $G$  então  $(a \cdot b) \cdot c = a \cdot (b \cdot c)$ .

- Elemento Identidade

Existe um elemento de  $G$  que denotamos por  $e$  e denominado elemento neutro ou unidade de  $G$  tal que  $e \cdot a = a \cdot e = a$ , para todo  $a \in G$ .

- Elemento Inverso

Para todo elemento  $a \in G$ , existe um elemento  $a^{-1}$  e denominado inversa de  $a$ , tal que  $a \cdot a^{-1} = a^{-1} \cdot a = e$ .

Caso a lei de composição seja comutativa, ou seja, se  $a \cdot b = b \cdot a$  para todo  $a, b \in G$ , dizemos que  $G$  é um grupo comutativo ou abeliano.

## Propriedades Topológicas

Seja  $S$  um conjunto e seja uma coleção  $D = \{A_1, A_2, A_3, \dots\}$  de conjuntos de  $S$  ( $A_1, A_2, A_3, \dots \subset S$ ), dizemos que  $D$  define uma topologia em  $S$  se as seguintes condições forem satisfeitas, para todo  $A_1, A_2 \in D$ :

- Propriedade 1

A união de dois conjuntos pertence à  $D$ :  $A_1 \cup A_2 \in D$ ;

- Propriedade 2

A intersecção de dois conjuntos pertence à  $D$ :  $A_1 \cap A_2 \in D$ ;

- Propriedade 3

O conjunto  $S$  pertence à  $D$ :  $S \in D$ .

O espaço  $S$ , munido da topologia  $D$  é dito ser um espaço topológico, e os elementos de  $D$  são chamados abertos de  $S$ . Uma vizinhança de um ponto  $p \in S$  é um conjunto  $V \subset S$  que contenha um aberto de  $S$ . Podemos então falar de aplicações contínuas entre dois espaços topológicos  $S$  e  $S'$ . Seja  $f : S \rightarrow S'$  uma aplicação. A aplicação  $f$  é dita contínua no ponto  $p \in S$  se para qualquer vizinhança  $V'$  de  $f(p)$  existir uma vizinhança  $V$  de  $p$  tal que  $f(V) \subset V'$ . Um grupo que possui a estrutura de espaço topológico é dito ser um grupo topológico.

## Variedades Diferenciáveis

Um espaço topológico é dito ser uma variedade se para todo ponto  $p \in S$  existe uma vizinhança  $V_p$  que seja levada em um conjunto aberto de  $R^n$  para algum  $n$ , por uma aplicação bijetiva  $\phi_{V_p} : V_p \rightarrow R^n$  contínua, no sentido dado acima. O menor valor possível de  $n$  é denominado dimensão da variedade  $S$ . Dessa maneira, é possível definir sistemas de coordenadas nas vizinhanças de todos os pontos de  $S$ , as coordenadas de  $p$  sendo dadas por

$$\phi_{V_p}(p) \equiv (x^1(p), \dots, x^n(p)). \quad (4.1)$$

A associação  $\phi_{V_p}$  é denominada de carta (mapa) na vizinhança  $V_p$ . Dessa maneira, podemos usar os abertos da topologia definida em  $S$  para construir conjunto de cartas de maneira a recobrir  $S$ ; cartas estas que podem ter intersecções não-nulas. Esse conjunto é denominado de Atlas em  $S$ . Vamos supor que um ponto  $p \in S$  pertence a duas vizinhanças  $V_r$  e  $V_s$ . Sabemos que  $U = V_r \cap V_s$  é também uma vizinhança de  $p$ . Temos assim definidos dois sistemas de coordenadas em  $U$ , dados pelas cartas  $\phi_{V_r}$  e  $\phi_{V_s}$ , que denotamos por  $\{x^i\}$  e  $\{y^i\}$ , respectivamente, com  $(i = 1, \dots, n)$ . Podemos passar livremente de um sistema de coordenada para outro da seguinte maneira:

$$(x^1, \dots, x^n) = \phi_{V_s} \circ \phi_{V_r}^{-1}(y^1, \dots, y^n), \quad (4.2)$$

ou

$$(y^1, \dots, y^n) = \phi_{V_r} \circ \phi_{V_s}^{-1}(x^1, \dots, x^n). \quad (4.3)$$

Dessa forma, definimos uma mudança de sistema de coordenadas em  $U$ . Dizemos então que  $S$  é uma variedade  $C^k$  se as funções que fazem as mudanças de coordenadas nas intersecções de duas cartas forem  $C^k$  (contínuas e  $k$  vezes diferenciáveis). Uma variedade  $C^1$  é também denominada de variedade diferenciável, enquanto que uma variedade  $C^\infty$  é dita ser uma variedade suave.

#### 4.1.1 Grupos de Lie

Seja  $S$  um grupo com uma estrutura da variedade diferenciável. Podemos então associar a cada ponto  $p \in S$  um conjunto de coordenadas  $\alpha_i^p = \phi_i(p)$ . A lei de composição do grupo pode então ser expressa em termos das coordenadas dos elementos do grupo, ou seja, se  $p, q, r \in S$  e  $r = p \cdot q$ , onde  $\cdot$  é a lei de composição, então temos que

$$\alpha_i^r = \phi_i(\alpha^p, \alpha^q). \quad (4.4)$$

Se as funções  $f_i$  forem analíticas, i. e. funções  $C^\infty$ , então  $S$  é dito ser um grupo de Lie.

#### 4.1.2 Álgebras de Lie

As simetrias contínuas de um sistema de equações diferenciais formam um grupo de Lie. Os elementos de uma vizinhança da identidade, isto é, as transformações infinitesimais permite determinar o subgrupo de Lie conexo à identidade [102]. Vamos construir o gerador de simetria partindo de transformações infinitesimais. Para tal, tomemos o grupo de simetria  $S$  a  $m$  parâmetros  $(\alpha_1, \dots, \alpha_m)$  onde ( $m$  é a dimensão de  $S$ ) agindo no espaço  $F$  das funções de classe  $C^1$  em  $R^n$ . Denotamos então um elemento de  $S$  por  $g(\alpha_1, \dots, \alpha_m)$ , e assumimos, sem perda de generalidade, que a parametrização é tal que  $g(0, \dots, 0)$  corresponde ao elemento identidade de  $S$ , ou seja, à transformação identidade. A ação de um elemento de  $S$  em  $F$  é dada por ( $f \in F$ ):

$$f'(x) = f(x') = g(\alpha_1, \dots, \alpha_m) f(x), \quad (4.5)$$

onde  $x \equiv (x^1, \dots, x^n)$  e  $x' = g(\alpha_1, \dots, \alpha_n) x$ . Tomemos agora  $\alpha_i = 0$  exceto para  $i = k$  para o qual  $\alpha_k \ll 1$ . Temos então que

$$x'^i - x^i = \alpha^k \eta^i(x), \quad (4.6)$$

para certas funções  $\eta^i$ . Expandindo o lado esquerdo de Eq. (4.5) obtemos

$$f'(x) = f(x + \alpha_k \eta) = \left( 1 + \alpha_k \sum_{i,k} \eta^i \frac{\partial}{\partial x^i} \right) f(x) \quad (4.7)$$

$$= g(0, \dots, \alpha_k, \dots, 0), \quad (4.8)$$

com  $\eta = (\eta^1, \dots, \eta^n)$ . Da mesma maneira, podemos mostrar que tomando todos os  $\alpha_i$  não-nulos e  $\alpha_i \ll 1$  temos que:

$$f'(x) = g(\alpha_1, \dots, \alpha_m) f(x) = \left( 1 + \sum_{i,k} \alpha_k \eta_k^i \frac{\partial}{\partial x^i} \right) f(x). \quad (4.9)$$

Dizemos então que os operadores

$$G_k = \sum_i \eta_k^i \frac{\partial}{\partial x^i} \quad k = 1, \dots, m, \quad (4.10)$$

são os geradores infinitesimais do grupo de Lie  $S$ . O termo gerador vem do fato de que os operadores  $G_k$  permitem construir o grupo  $S$ , como veremos a seguir. Eles representam no nosso caso transformações infinitesimais de simetria.

O comutador de dois elementos do espaço vetorial é um outro elemento do mesmo espaço,

$$G_i G_j - G_j G_i = \sum_k C_{ij}^k G_k, \quad (4.11)$$

que são as relações de comutação entre os geradores do grupo, e  $C_{ij}^k$  são as constantes de estrutura que caracterizam o grupo.

O espaço vetorial gerado pelos geradores  $G_i$  de um grupo de Lie, munido da operação de comutação

$$[A, B] \equiv AB - BA, \quad (4.12)$$

possui uma estrutura de álgebra. O comutador satisfaz a identidade de Jacobi:

$$[[A, B], C] + [[C, A], B] + [[B, C], A] = 0, \quad (4.13)$$

e dizemos que temos uma estrutura de álgebra de Lie. Em conclusão, todo grupo de Lie tem associado uma álgebra de Lie, que por sua vez pode ser usada para reconstruir o grupo na sua parte conectada a identidade. Mais ainda, toda a álgebra de Lie permite gerar um grupo de Lie.

Na próxima seção, extendemos a noção de geradores de simetria aqui introduzida e construímos soluções invariantes de EDPs com esses geradores.

## 4.2 Simetrias e Equações Diferenciais

Nesta seção, vamos apresentar como obter as simetrias de Equações Diferenciais Parciais (EDPs). Esta revisão se baseia nas referências [73, 103, 104].

### 4.2.1 EDPs escalares com duas variáveis dependentes

Para simplificar a apresentação, vamos considerar EDPs com uma variável dependente  $u$ , e duas variáveis independentes,  $x$  e  $t$ . Uma transformação de ponto é um difeomorfismo no espaço da variável dependente  $u$ , e das variáveis independentes  $x$  e  $t$ .

$$\Pi : (x, t, u) \mapsto (\hat{x}(x, t, u), \hat{t}(x, t, u), \hat{u}(x, t, u)). \quad (4.14)$$

Essa transformação mapeia a superfície  $u = u(x, t)$  em  $R^3$  para a seguinte (que é parametrizada por  $x$ ,  $t$  e  $u$ ):

$$\left. \begin{aligned} \hat{x} &= \hat{x}(x, t, u), \\ \hat{t} &= \hat{t}(x, t, u), \\ \hat{u} &= \hat{u}(x, t, u). \end{aligned} \right\}$$

Para poder determinar como o difeomorfismo em (4.15), que atua em uma dada equação diferencial, precisamos calcular a maneira como esse difeomorfismo induz uma prolongação de uma dada transformação. Para isso, introduzimos a seguinte derivada total

$$\begin{aligned} D_x &= \partial_x + u_x \partial_u + u_{xx} \partial_{u_t} + \dots, \\ D_t &= \partial_t + u_t \partial_u + u_{xt} \partial_{u_t} + \dots \end{aligned} \quad (4.15)$$

(Derivadas totais tratam a variável dependente  $u$  e suas derivadas como funções de variáveis independentes). As duas primeiras equações de (4.15) podem ser invertidas (localmente) para obtermos  $x$  e  $t$  em termos de  $\hat{x}$  e  $\hat{t}$ , desde que o jacobiano seja diferente de zero, ou seja,

$$J \equiv \begin{vmatrix} D_x \hat{x} & D_x \hat{t} \\ D_t \hat{x} & D_t \hat{t} \end{vmatrix} \neq 0. \quad \text{quando} \quad u = u(x, t). \quad (4.16)$$

Se (4.16) é satisfeita, então a última equação de (4.15) pode ser reescrita como

$$\hat{u} = \hat{u}(x, t). \quad (4.17)$$

Aplicando a regra da cadeia para (4.17), obtemos

$$\begin{bmatrix} D_x \hat{u} \\ D_t \hat{u} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_x \hat{x} & D_x \hat{t} \\ D_t \hat{x} & D_t \hat{t} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{u}_{\hat{x}} \\ \hat{u}_{\hat{t}} \end{bmatrix},$$

e portanto (pela regra de Cramer)

$$\hat{u}_{\hat{x}} = \frac{1}{J} \begin{vmatrix} D_x \hat{u} & D_t \hat{t} \\ D_t \hat{x} & D_t \hat{t} \end{vmatrix}, \quad \hat{u}_{\hat{t}} = \frac{1}{J} \begin{vmatrix} D_x \hat{x} & D_x \hat{u} \\ D_t \hat{x} & D_t \hat{u} \end{vmatrix}. \quad (4.18)$$

Prolongações de ordem superior são obtidas recursivamente repetindo-se o argumento acima. Se  $\hat{u}_J$  é qualquer derivada de  $\hat{u}$  com relação a  $\hat{x}$  e  $\hat{t}$  então

$$\begin{aligned} \hat{u}_J \hat{x} &\equiv \frac{\partial \hat{u}_J}{\partial \hat{x}} = \frac{1}{J} \begin{vmatrix} D_x \hat{u} & D_t \hat{t} \\ D_t \hat{x} & D_t \hat{t} \end{vmatrix}, \\ \hat{u}_J \hat{t} &\equiv \frac{\partial \hat{u}_J}{\partial \hat{t}} = \frac{1}{J} \begin{vmatrix} D_x \hat{x} & D_x \hat{u} \\ D_t \hat{x} & D_t \hat{u} \end{vmatrix}. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Estamos agora em condições de definir simetrias pontuais de uma EDP de enésima ordem:

$$\Delta(x, t, u, u_x, u_t, \dots) = 0. \quad (4.20)$$

Por simplicidade, vamos considerar EDPs da forma

$$\Delta = u_\sigma - \omega(x, t, u, u_x, u_t, \dots) = 0, \quad (4.21)$$

onde  $u_\sigma$  é uma das derivadas de enésima ordem de  $u$  e  $\omega$  é independente de  $u_\sigma$ . A transformação de ponto  $\Pi$  é uma simetria de (4.20) se

$$\Delta(\hat{x}, \hat{t}, \hat{u}, \hat{u}_{\hat{x}}, \hat{u}_{\hat{t}}, \dots) = 0, \quad (4.22)$$

quando a equação (4.20) for válida. O conjunto das simetrias de uma EDP forma um grupo de Lie, basta determinar as respectivas transformações infinitesimais para encontrar os geradores, consideramos então transformações da seguinte forma,

$$\begin{aligned} \hat{x} &= x + \varepsilon\xi(x, t, u) + O(\varepsilon^2), \\ \hat{t} &= t + \varepsilon\tau(x, t, u) + O(\varepsilon^2), \\ \hat{u} &= u + \varepsilon\eta(x, t, u) + O(\varepsilon^2). \end{aligned} \quad (4.23)$$

Essas simetrias são também denominadas grupos de Lie a um parâmetro. Com gerador:

$$G = \xi\partial_x + \tau\partial_t + \eta\partial_u. \quad (4.24)$$

Equivalentemente, obtemos  $(\hat{x}, \hat{t}, \hat{u})$  pela resolução de

$$\frac{d\hat{x}}{d\varepsilon} = \xi(\hat{x}, \hat{t}, \hat{u}); \quad \frac{d\hat{t}}{d\varepsilon} = \tau(\hat{x}, \hat{t}, \hat{u}); \quad \frac{d\hat{u}}{d\varepsilon} = \eta(\hat{x}, \hat{t}, \hat{u}),$$

sujeitas às condições iniciais equação

$$(\hat{x}, \hat{t}, \hat{u})|_{\varepsilon=0} = (x, t, u).$$

Uma superfície  $u = u(x, t)$  é mapeada nela mesma pelo grupo de transformações gerado por  $G$  se

$$G(u - u(x, t)) = 0, \quad (4.25)$$

quando  $u = u(x, t)$ . Esta condição pode ser expressa pela função característica como

$$Q = \eta - \xi u_x - \tau u_t = 0. \quad (4.26)$$

Da equação (4.25), a superfície é invariante desde que

$$Q = 0, \quad (4.27)$$

quando  $u = u(x, t)$ . A equação (4.27) é chamada de *condição de superfície invariante* e é utilizada para obter soluções exatas de EDPs. A prolongação da transformação de ponto (4.23) para derivadas de primeira ordem:

$$\begin{aligned}\hat{u}_{\hat{x}} &= u_x + \varepsilon \eta^x(x, t, u, u_x, u_t) + O(\varepsilon^2), \\ \hat{u}_{\hat{t}} &= u_t + \varepsilon \eta^t(x, t, u, u_x, u_t) + O(\varepsilon^2),\end{aligned}\quad (4.28)$$

onde, da equação (4.18),

$$\begin{aligned}\eta^x(x, t, u, u_x, u_t) &= D_x \eta - u_x D_x \xi - u_t D_x \tau, \\ \eta^t(x, t, u, u_x, u_t) &= D_t \eta - u_x D_t \xi - u_t D_t \tau.\end{aligned}\quad (4.29)$$

A transformação pode ser prolongada para derivadas de ordem superior recursivamente usando (4.19). Suponhamos que

$$\hat{u}_J = u_J + \varepsilon \eta^J + O(\varepsilon^2), \quad (4.30)$$

onde

$$u_J \equiv \frac{\partial^{j_1+j_2} u}{\partial x^{j_1} \partial t^{j_2}}, \quad \hat{u}_J \equiv \frac{\partial^{j_1+j_2} \hat{u}}{\partial \hat{x}^{j_1} \partial \hat{t}^{j_2}}, \quad (4.31)$$

para alguns números  $j_1$  e  $j_2$ . Então (4.19) fornece

$$\begin{aligned}\hat{u}_{J\hat{x}} &= u_{Jx} + \varepsilon \eta^{Jx} + O(\varepsilon^2), \\ \hat{u}_{J\hat{t}} &= u_{Jt} + \varepsilon \eta^{Jt} + O(\varepsilon^2),\end{aligned}\quad (4.32)$$

onde

$$\begin{aligned}\eta^{Jx} &= D_x \eta^J - u_{Jx} D_x \xi - u_{Jt} D_x \tau, \\ \eta^{Jt} &= D_t \eta^J - u_{Jx} D_t \xi - u_{Jt} D_t \tau.\end{aligned}\quad (4.33)$$

Alternativamente, podemos expressar as funções  $\eta^j$  em termos da característica, por exemplo,

$$\begin{aligned}\eta^x &= D_x Q + \xi u_{xx} + \tau u_{xt}, \\ \eta^t &= D_t Q + \xi u_{xt} + \tau u_{tt}.\end{aligned}\quad (4.34)$$

Termos de ordem superior são obtidos por indução em  $j_1$  e  $j_2$ ,

$$\eta^J = D_J Q + \xi D_J u_x + \tau D_J u_t, \quad (4.35)$$

onde

$$D_J \equiv D_x^{j_1} D_t^{j_2}. \quad (4.36)$$

O gerador infinitesimal é prolongado por derivadas adicionando-se todos os termos da forma  $\eta^j \partial_{u_j}$  acima até a ordem desejada. Por exemplo

$$G^1 = \xi \partial_x + \tau \partial_t + \eta \partial_u + \eta^x \partial_{u_x} + \eta^t \partial_{u_t} = G + \eta^x \partial_{u_x} + \eta^t \partial_{u_t}, \quad (4.37)$$

$$G^2 = G^1 + \eta^{xx} \partial_{u_{xx}} + \eta^{xt} \partial_{u_{xt}} + \eta^{tt} \partial_{u_{tt}}. \quad (4.38)$$

De agora em diante, adotaremos a convenção de que o gerador seja prolongado quantas vezes forem necessárias para descrever a ação do grupo em todas as variáveis. Para encontrar a simetria de Lie de ponto necessitamos da expressão (4.33). Simetrias de Lie de ponto são obtidas diferenciando a condição de simetria (4.22) com relação a  $\varepsilon$ . Obtemos assim a condição de simetria linearizada,

$$G^{(2)} \Delta = 0 \quad \text{quando} \quad \Delta = 0. \quad (4.39)$$

Como exemplo tomemos a equação

$$u_t = u_x^2. \quad (4.40)$$

A condição de simetria linearizada é

$$\eta^t = 2u_x \eta^x \quad \text{quando} \quad (4.40) \quad \text{vale} \quad (4.41)$$

escrevendo explicitamente e usando (4.40) para eliminar  $u_t$ , obtemos

$$\begin{aligned} & \eta_t - \xi_t u_x + (\eta_u - \tau_t) u_x^2 - \xi_u u_x^3 - \tau_u u_x^4 \\ &= 2u_x (\eta_x + (\eta_u - \xi_x) u_x + (\eta_u - \xi_x) u_x^2 - \tau_u u_x^3). \end{aligned}$$

Depois igualando os termos de coeficiente de  $u_x$ , teremos um sistema de equações determinantes:

$$\tau_u = 0, \quad (4.42)$$

$$\xi_u + 2\tau_x = 0, \quad (4.43)$$

$$\eta_u + \tau_t - 2\xi_x = 0, \quad (4.44)$$

$$\xi_t + 2\eta_x = 0, \quad (4.45)$$

$$\eta_t = 0. \quad (4.46)$$

Iniciamos resolvendo (4.42) obtemos:

$$\tau = A(x, t).$$

onde  $A$  é uma função arbitrária. A solução geral de (4.43) é assim dada por:

$$\xi = -2A_x u + B(x, t), \quad (4.47)$$

e de (4.44)

$$\eta = -2A_{xx} u^2 + (2B_x - A_t) u + C(x, t),$$

para algumas funções  $B$  e  $C$ . Substituindo estes resultados em (4.45) e (4.46), obtemos:

$$-4A_{xxx}u^2 + 4(2B_{xx} - A_{xt})u + B_t + 2C_x = 0, \quad (4.48)$$

$$-2A_{xxx}tt^2 + (2B_{xt} - A_{tt})u + C_t = 0. \quad (4.49)$$

As funções  $A, B$  e  $C$  são independentes de  $u$ , assim (4.48) e (4.49) podem ser decompostas igualando coeficientes de  $u$ , as seguintes equações:

$$C_t = 0, \quad (4.50)$$

$$B_t + 2C_x = 0, \quad (4.51)$$

$$2B_{xt} + A_{tt} = 0, \quad (4.52)$$

$$B_{xx} - A_{xt} = 0, \quad (4.53)$$

$$A_{xxt} = 0, \quad (4.54)$$

$$A_{xxx} = 0. \quad (4.55)$$

Das equações (4.50), (4.51) e (4.52), obtemos:

$$\begin{aligned} C &= \alpha(x), B = \alpha'(x)t + \beta(x), \\ A &= \alpha''(x)t^2 + \gamma(x)t + \delta(x). \end{aligned} \quad (4.56)$$

As funções  $\alpha, \beta, \gamma$  e  $\delta$  são funções de  $x$  determinadas pela substituição de (4.56) em (4.53), (4.54) e (4.55). Igualando os coeficientes de potências de  $t$ , e resolvendo obtemos finalmente

$$\begin{aligned} \xi &= -4c_1tx - 2c_2t + c_4\left(\frac{1}{2}x^2 - 2tu\right) + c_6x + c_7 - 4c_8xu - 2c_9u, \\ \tau &= -4c_1t^2 - c_4xt + c_5t + c_8x^2 + c_9x + 2c_{10}, \\ \eta &= 4c_1x^2 + c_2x + c_3 + c_4xu + c_5u + 2c_6u - 4c_8u^2, \end{aligned} \quad (4.57)$$

que contêm 10 constantes arbitrárias, significando que a álgebra de Lie tem 10 dimensões. A álgebra de simetria infinitesimal da equação (4.40), é então definida pelos geradores:

$$\begin{aligned}
G_1 &= -4tx \frac{\partial}{\partial x} - 4t^2 \frac{\partial}{\partial t} + 4t^2 \frac{\partial}{\partial u}, \\
G_2 &= -2t \frac{\partial}{\partial x} + x \frac{\partial}{\partial u}, \\
G_3 &= \frac{\partial}{\partial u}, \\
G_4 &= \left( \frac{1}{2}x^2 - 2tu \right) \frac{\partial}{\partial x} + 4xt^2 \frac{\partial}{\partial t} + xu \frac{\partial}{\partial u}, \\
G_5 &= t \frac{\partial}{\partial t} + u \frac{\partial}{\partial u}, \\
G_6 &= -x \frac{\partial}{\partial x} + 2u \frac{\partial}{\partial u}, \\
G_7 &= \frac{\partial}{\partial x}, \\
G_8 &= -4ux \frac{\partial}{\partial t} + x^2 \frac{\partial}{\partial t} - 4u^2 \frac{\partial}{\partial u}, \\
G_9 &= -2u \frac{\partial}{\partial x} + x \frac{\partial}{\partial t}, \\
G_{10} &= -2t \frac{\partial}{\partial t},
\end{aligned}$$

### 4.2.2 Soluções invariantes

Nesta seção vamos introduzir o método das características, que consiste em obter soluções invariantes por um determinado grupo de simetria. Tomemos o gerador

$$G = \xi \frac{\partial}{\partial x} + \tau \frac{\partial}{\partial t} + \eta \frac{\partial}{\partial u}.$$

Uma solução  $u(x, t)$  é invariante pela transformação gerada por  $G$  se

$$Q \equiv \eta - \xi u_x - \tau u_t = 0, \quad (4.58)$$

que é usualmente mais fácil de resolver que a equação original. Resolvemos a condição de superfície invariante com as equações características

$$\frac{dx}{\xi} = \frac{dt}{\tau} = \frac{du}{\eta}. \quad (4.59)$$

Introduzimos então coordenadas canônicas  $r(x, t, u)$  e  $v(x, t, u)$  que são duas integrais primeiras de (4.59) funcionalmente independentes. A solução da condição de superfície é dada por

$$v = F(r). \quad (4.60)$$

Podemos tomar como exemplo o gerador

$$G = cG_1 + G_2 = c \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial t}.$$

A condição de superfície invariante é dada por

$$cu_x + u_t = 0.$$

Assim as equações características são,

$$\frac{dx}{c} = \frac{dt}{1}.$$

Com uma quadratura nas equações características obtemos,  $r = x - ct$  e  $u = F(r)$  como solução invariante, que é também conhecida como solução de onda.

Vamos considerar o oscilador usual estudado em mecânica quântica. Conhecemos as autofunções deste sistema. No entanto, apresentamos aqui a solução pelo método de simetrias de lie. A equação do oscilador é apresentada na forma,

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{1}{2} x^2 \psi(x) = E \psi(x),$$

com o auxílio do SADE os geradores de simetria apresentamos na forma,

$$G_1 = \psi \frac{\partial}{\partial \psi},$$

$$G_2 = \frac{\mathbf{M}(1/2 E, 1/4, x^2)}{\sqrt{x}} \frac{\partial}{\partial \psi},$$

$$\begin{aligned} G_3 &= \frac{1}{x^2} \left[ 4E\psi \mathbf{M}(1/2 E, 1/4, x^2) \mathbf{W}(1/2 E, 1/4, x^2) \right. \\ &\quad - 2E\psi \mathbf{W}(1/2 E, 1/4, x^2) \mathbf{M}(1/2 E + 1, 1/4, x^2) \\ &\quad - 3\psi \mathbf{W}(1/2 E, 1/4, x^2) \mathbf{M}(1/2 E, 1/4, x^2) \\ &\quad + 4\psi \mathbf{M}(1/2 E, 1/4, x^2) \mathbf{W}(1/2 E + 1, 1/4, x^2) \\ &\quad - 4x^2 \mathbf{M}(1/2 E, 1/4, x^2) \mathbf{W}(1/2 E, 1/4, x^2) \\ &\quad \left. + 2\psi \mathbf{W}(1/2 E, 1/4, x^2) \mathbf{M}(1/2 E, 1/4, x^2) \right] \frac{\partial}{\partial \psi} \\ &\quad - \left[ \frac{4}{x} \mathbf{M}(1/2 E, 1/4, x^2) \mathbf{M}(1/2 E, 1/4, x^2) \right] \frac{\partial}{\partial x}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} G_4 &= \frac{1}{x^{\frac{3}{2}}} \left[ \psi \left( -2\psi \mathbf{M}(1/2 E, 1/4, x^2) x^2 + 4\psi \mathbf{M}(1/2 E + 1, 1/4, x^2) \right) \right. \\ &\quad \left. + 2\psi E \mathbf{M}(1/2 E, 1/4, x^2) + \psi \mathbf{M}(1/2 E, 1/4, x^2) \right] \frac{\partial}{\partial \psi} \\ &\quad - \left[ \frac{2}{\sqrt{x}} \left( \mathbf{M}(1/2 E, 1/4, x^2)^2 \right) \right] \frac{\partial}{\partial x}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
G_5 &= \frac{1}{x^{\frac{3}{2}}} \left[ \psi \left( \psi \mathbf{M} (1/2 E, 1/4, x^2) - 2x^2 \psi \mathbf{M} (1/2 E, 1/4, x^2) \right. \right. \\
&\quad - \left. \left. 3\psi \mathbf{M} (1/2 E + 1, 1/4, x^2) + 2\psi E \mathbf{M} (1/2 E, 1/4, x^2) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - 2\psi E \mathbf{M} (1/2 E + 1, 1/4, x^2) \right) \right] \frac{\partial}{\partial \psi} \\
&\quad - \left[ \frac{2}{\sqrt{x}} \left( \mathbf{M} (1/2 E, 1/4, x^2) \right)^2 \right] \frac{\partial}{\partial x},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
G_6 &= \frac{1}{x^2} \left[ \mathbf{M} (1/2 E, 1/4, x^2) \left( \psi \mathbf{M} (1/2 E, 1/4, x^2) x^2 \right. \right. \\
&\quad - \left. \left. 2\psi \mathbf{M} (1/2 E, 1/4, x^2) - 3\psi \mathbf{M} (1/2 E + 1, 1/4, x^2) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + 2\psi E \mathbf{M} (1/2 E, 1/4, x^2) - 2\psi \mathbf{M} (1/2 E, 1/4, x^2) \right) \right] \frac{\partial}{\partial \psi} \\
&\quad - \left[ \frac{2}{x} \left( \mathbf{M} (1/2 E, 1/4, x^2) \right)^2 \right] \frac{\partial}{\partial x},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
G_7 &= \frac{1}{x^2} \left[ \mathbf{M} (1/2 E, 1/4, x^2) \left( -2\psi \mathbf{W} (1/2 E, 1/4, x^2) x^2 \right. \right. \\
&\quad + \left. \left. 4\psi \mathbf{W} (1/2 E + 1, 1/4, x^2) + 2\psi E \mathbf{M} (1/2 E, 1/4, x^2) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \psi \mathbf{W} (1/2 E, 1/4, x^2) \right) \right] \frac{\partial}{\partial \psi} - \left[ \frac{2}{x} \left( \mathbf{M} (1/2 E, 1/4, x^2) \right)^2 \right] \frac{\partial}{\partial x},
\end{aligned}$$

onde  $\mathbf{M}(\kappa, \mu, x)$  and  $\mathbf{W}(\kappa, \mu, x)$  são funções Whittaker. A partir desses geradores, obtemos a seguinte solução invariante,

$$\psi(x) = C \frac{\mathbf{W} (1/2 E, 1/4, x^2)}{\sqrt{x}},$$

onde  $C$  é uma constante. Usando a seguinte identidade,

$$W(1/4 + 1/2 n, 1/4, x^2) = 2^{-n} \exp -1/2 x^2 \sqrt{x} H_n(x),$$

com o uso da identidade aqui considerada a autofunção é escrita em termos dos polinômios de hermite [116],

$$\psi(x) = C 2^{-n} \exp -1/2 x^2 H_n(x),$$

usando a condição de normalização, obtemos,

$$\psi(x) = 2^{-n/2} \pi^{-1/4} (n!)^{-1/2} e^{-1/2 x^2} H_n(x),$$

que é o mesmo resultado obtido na literatura [1, 2]. Este resultado mostra a robustez do SADE para cálculos analíticos. Ou seja, a partir de considerações de simetrias da equação diferencial, encontrou-se os geradores de tais simetrias e com o uso desses geradores determinou-se a solução da equação diferencial. Nos próximos capítulos aplicaremos a metodologia descrita neste para estudarmos potenciais não-lineares no espaço de fase.

## Capítulo 5

# Simetrias e Soluções da Equação de Gross-Pitaevskii no espaço de fase

### 5.1 Simetrias e Soluções da Equação de Gross-Pitaevskii no espaço de fase

Neste e no próximo capítulo, apresentamos os resultados desta tese. Primeiro, realizamos um estudo analítico da equação de Gross-Pitaevskii no estado estacionário e também, quando o sistema apresenta uma evolução no tempo. Para o caso estacionário, utilizamos um ansatz na busca de solução. Para o caso da equação de Gross-Pitaevskii dependente do tempo o estudo de soluções se dá via simetrias de Lie. Uma busca sistemática por geradores de simetria de Lie é realizada com posterior estudo da álgebra associada. De posse dos geradores, é possível obter soluções analíticas da equação de Gross-Pitaevskii no espaço de fase. Usando as amplitudes no espaço de fase então obtidas, calculamos a função de Wigner associada ao problema, pois é a partir desta função que estabelecemos a interpretação física dos sistemas analisados.

#### 5.1.1 Equação de Gross-Pitaevskii no estado estacionário

A equação de Gross-Pitaevskii no espaço de fase é dada por

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left( \frac{p^2}{2M} - \frac{\hbar^2}{8M} \frac{\partial^2}{\partial q^2} - \frac{i\hbar p}{2M} \frac{\partial}{\partial q} \right) \psi + V(q + i\hbar \frac{\partial}{\partial p}) \psi + g(\psi \psi^\dagger) \psi. \quad (5.1)$$

A interpretação das constantes dadas nesta equação é a mesma apresentada no capítulo 2.

O nosso objetivo aqui é solucionar essa equação, pois encontrando a função de onda no espaço de fase,  $\psi(q, p, t)$ , podemos determinar a função de Wigner associada ao problema de Gross-Pitaevskii, a qual é dada por  $f_W(q, p) = \psi(q, p, t) \star \psi^*(q, p, t)$ . Conduziremos a nossa análise física com o tratamento do condensado de Bose-Einstein, o qual é uma das aplicações da equação de Gross-Pitaevskii. No espaço das configurações, o denominaremos como espaço usual,  $\rho = \psi(x, t)\psi^*(x, t)$  representa a densidade uniforme do gás condensado. No bojo do espaço de fase, o equivalente na representação de Wigner para a densidade uniforme do gás condensado é a própria função de Wigner, ou seja,

$$\Omega_W(\rho) = \psi(q, p, t) \star \psi^*(q, p, t).$$

Vamos tratar o caso da interação repulsiva,  $g > 0$  [9]. Consideraremos o caso em que o potencial externo é nulo. Dessa forma, a equação de Gross-Pitaevskii no espaço de fase é dada por

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(q, p, t) = \left( \frac{p^2}{2M} - \frac{\hbar^2}{8M} \frac{\partial^2}{\partial q^2} - \frac{i\hbar p}{2M} \frac{\partial}{\partial q} \right) \psi(q, p, t) + g (\psi\psi^\dagger) \psi(q, p, t), \quad (5.2)$$

Considerando o ansatz,

$$\psi(q, p, t) = \phi(q, p) e^{-i\frac{\mu t}{\hbar}}, \quad (5.3)$$

onde  $\mu$  é o potencial químico. Substituindo (5.3) em (5.2), obtemos

$$\left( \frac{p^2}{2M} - \frac{\hbar^2}{8M} \frac{\partial^2}{\partial q^2} - \frac{i\hbar p}{2M} \frac{\partial}{\partial q} \right) \phi(q, p) + g (\phi\phi^\dagger) \phi(q, p) = \mu\phi(q, p). \quad (5.4)$$

Considerando o ansatz,

$$\phi(q, p) = \varphi(q) e^{-2i\frac{qp}{\hbar}}. \quad (5.5)$$

Substituindo (5.5) em (5.4), obtemos,

$$-\frac{\hbar^2}{8M} \frac{\partial^2}{\partial q^2} \varphi(q) + g |\varphi(q)|^2 \varphi(q) = \mu\varphi(q), \quad (5.6)$$

Note que a Eq.(5.6) é similar às equações que aparecem na literatura [4]. Dessa forma, seguiremos um método análogo para resolvê-la. Se  $\varphi$  for real, então, a equação (5.6) pode ser escrita na forma,

$$-\frac{\hbar^2}{8M} \frac{\partial^2}{\partial q^2} \varphi(q) + g\varphi(q)^3 - \mu\varphi(q) = 0, \quad (5.7)$$

multiplicando ambos os lados por  $\varphi'$

$$-\frac{\hbar^2}{8M} \frac{\partial^2}{\partial q^2} \varphi(q) \varphi' + g\varphi(q)^3 \varphi' - \mu\varphi(q) \varphi' = 0, \quad (5.8)$$

reescrevendo a equação (5.8), obtemos

$$-\frac{1}{2} \frac{d}{dq} \left( \varphi'^2 - \frac{4Mg}{\hbar^2} (\varphi^2 - a^2)^2 \right) = 0, \quad (5.9)$$

onde  $a = \sqrt{\frac{\mu}{g}}$ , esta quantidade é a função de onda distante da parede. Integrando a equação (5.9),

$$\varphi'^2 - \frac{4Mg}{\hbar^2} (\varphi^2 - a^2)^2 = k, \quad (5.10)$$

fazendo  $\lambda = \sqrt{\frac{Mg}{\hbar^2}}$ ,

$$\varphi'^2 = 4\lambda^2 (\varphi^2 - a^2)^2 + k. \quad (5.11)$$

A condição  $\varphi \rightarrow \pm a$  quando  $q \rightarrow \pm\infty$ , quando  $k = 0$ ,

$$\varphi' = \pm 2\lambda (\varphi^2 - a^2), \quad (5.12)$$

considerando a parte negativa e reescrevendo a equação (5.12), chegamos a,

$$\frac{d\varphi}{dq} = -2\lambda (\varphi^2 - a^2), \quad (5.13)$$

podemos escrever a equação (5.13) na forma,

$$\frac{d\varphi}{(\varphi^2 - a^2)} = -2\lambda dq, \quad (5.14)$$

integrando a equação (5.14) e considerando nula a constante de integração,

$$\varphi(q) = a \tanh 2a\lambda q, \quad (5.15)$$

podemos escrever a equação acima da forma,

$$\varphi(q) = a \tanh \frac{2q}{\xi}, \quad (5.16)$$

onde  $\xi = \sqrt{\frac{1}{2\lambda^2 a^2}}$  é o comprimento de cura. Essa é uma escala de comprimento característico sobre a qual a densidade do condensado retoma seu valor médio longe de um defeito acentuado ou de uma parede perfeitamente confinada [9]. Podemos escrever (5.14) de forma explícita,

$$\varphi(q) = \sqrt{\frac{\mu}{g}} \tanh \left( 2\sqrt{\frac{\mu M}{\hbar^2}} q \right), \quad (5.17)$$

se considerarmos a parte positiva da equação (5.12), temos a seguinte solução,

$$\varphi(q) = -\sqrt{\frac{\mu}{g}} \tanh \left( 2\sqrt{\frac{\mu M}{\hbar^2}} q \right), \quad (5.18)$$

onde os gráficos das ondas solitárias referentes as equações (5.15) e (5.12) são apresentadas a seguir.

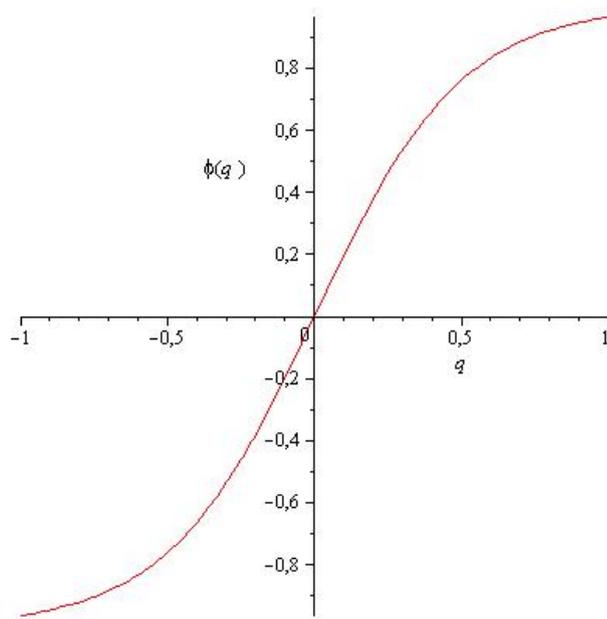


Figura 5.1: Esse gráfico é denominado kink.

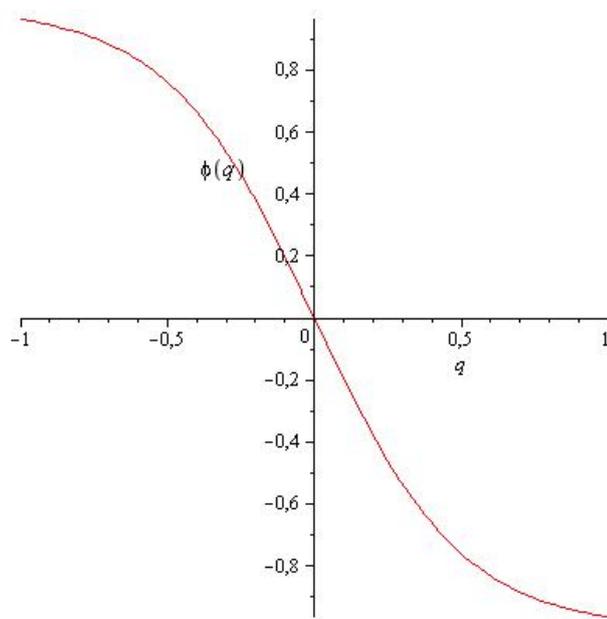


Figura 5.2: Esse gráfico é denominado antikink.

A solução da equação (5.7) é denominada sóliton. A solução geral é dada da forma,

$$\psi(q, p, t) = \sqrt{\frac{\mu}{g}} \tanh\left(2\sqrt{\frac{\mu M}{\hbar^2}} q\right) e^{-2i\frac{qp}{\hbar}} e^{-i\frac{\mu t}{\hbar}}, \quad (5.19)$$

a qual é a solução da equação de Gross-Pitaevskii no espaço de fase.

A partir da solução encontrada, podemos conduzir uma análise bastante interessante para os nossos propósitos. Para esse fim, aplicaremos a forma integral do produto-estrela, dada na Eq.(3.51), para calcularmos a função de Wigner associada ao problema. Assim, temos que

$$f_W(q, p) = \frac{1}{(\pi\hbar)^2} \int dq' dq'' dp' dp'' \psi(q', p') \psi^*(q'', p'') e^{-\frac{2i}{\hbar}[p(q'-q'')+p'(q''-q)+p''(q-q')]}.$$

Ou seja,

$$\begin{aligned} f_W(q, p) &= \frac{1}{(\pi\hbar)^2} \frac{\mu}{g} \int dq' dq'' dp' dp'' \tanh\left(2\sqrt{\frac{\mu M}{\hbar^2}} q'\right) e^{-2i\frac{q'p'}{\hbar}} \\ &\times \tanh\left(2\sqrt{\frac{\mu M}{\hbar^2}} q''\right) e^{2i\frac{q''p''}{\hbar}} e^{-\frac{2i}{\hbar}[p(q'-q'')+p'(q''-q)+p''(q-q')]} . \end{aligned}$$

Reorganizando as exponenciais, podemos escrever

$$\begin{aligned} f_W(q, p) &= \frac{1}{(\pi\hbar)^2} \frac{\mu}{g} \int dq' dq'' dp' dp'' \tanh\left(2\sqrt{\frac{\mu M}{\hbar^2}} q'\right) \tanh\left(2\sqrt{\frac{\mu M}{\hbar^2}} q''\right) \\ &\times e^{-\frac{2i}{\hbar}[p(q'-q'')+p'(q''-q+q')+p''(q-q'-q'')]} . \end{aligned}$$

Identificando as deltas de Dirac em  $p'$  e  $p''$  nas exponenciais do integrando, podemos escrever

$$\begin{aligned} f_W(q, p) &= \frac{\mu}{g} \int dq' dq'' \tanh\left(2\sqrt{\frac{\mu M}{\hbar^2}} q'\right) \tanh\left(2\sqrt{\frac{\mu M}{\hbar^2}} q''\right) \\ &\times e^{-\frac{2i}{\hbar}p(q'-q'')}\delta(q''-q+q')\delta(q'-q''+q). \end{aligned}$$

Esta última expressão é uma representação integral para a função de Wigner do problema de Gross-Pitaevskii. Um resultado interessante é obtido quando integramos o último resultado em relação a  $p$ ,

$$\begin{aligned} \int f_W(q, p) dp &= \frac{\mu}{g} \int dq' dq'' dp \tanh\left(2\sqrt{\frac{\mu M}{\hbar^2}} q'\right) \tanh\left(2\sqrt{\frac{\mu M}{\hbar^2}} q''\right) \\ &\times e^{-\frac{2i}{\hbar}p(q'-q'')}\delta(q''-q+q')\delta(q'-q''+q), \end{aligned}$$

obtendo,

$$\int f_W(q, p) dp = \mathcal{N} \tanh^2\left(2\sqrt{\frac{\mu M}{\hbar^2}} q\right), \quad (5.20)$$

em que  $\mathcal{N}$  é uma constante de normalização. Este último resultado corresponde à densidade de probabilidade de encontrar uma partícula numa determinada posição, e é idêntico ao resultado obtido no espaço das configurações, o que mostra a consistência do formalismo de espaço de fase aqui utilizado.

Prosseguindo a discussão, a função de Wigner relativa ao problema de Gross-Pitaevskii pode ser calculada a partir da solução encontrada, dada na equação (5.19). O cálculo é realizado a partir da expansão do produto-estrela. Fazendo isso obtemos

$$f_w(q, p) = \frac{\mu}{g} \left( \tanh \left( 2\sqrt{\frac{\mu M}{\hbar^2}} q \right) \right)^2 - \frac{4\mu q}{g} \sqrt{\frac{\mu M}{\hbar^2}} \frac{\sinh \left( 2\sqrt{\frac{\mu M}{\hbar^2}} q \right)}{\left( \cosh \left( 2\sqrt{\frac{\mu M}{\hbar^2}} q \right) \right)^3}. \quad (5.21)$$

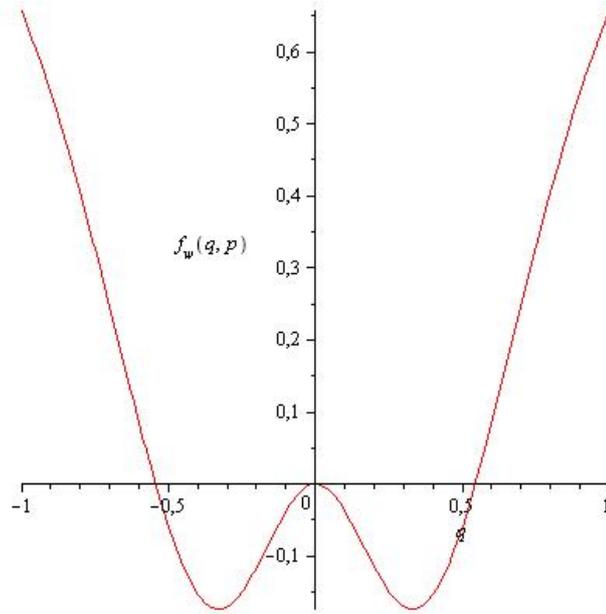


Figura 5.3: Gráfico da função de wigner relativo à equação de Gross-Pitaevskii no regime estacionário

O gráfico relativo à equação (5.21) é mostrado na Figura 5.3. Nele, observamos uma importante característica da função de Wigner, a existência de valores negativos. Percebemos que há duas regiões em que a função de Wigner é negativa. Tal característica aparece na literatura como um indicador da não-classicalidade do sistema, ou seja, nas regiões em que a função de Wigner é negativa há uma predominância das propriedades quânticas do sistema, e isso pode ser utilizado em estudos posteriores para se conhecer melhor sistemas regidos pela equação de Gross-Pitaevskii, sobretudo o condensado de Bose-Einstein. É importante salientar que a relação que existe entre a negatividade da função de Wigner e a não-classicalidade do sistema é baseada na conclusão de diversos trabalhos já analisados e disponíveis na literatura, ou seja, não há uma prova matemática, como por exemplo um Teorema, para este fato [107, 108, 109, 110]. Deixamos como perspectiva a demonstração matemática para esta correlação. As possibilidades outrora comentadas, mostram-se factíveis no arcabouço experimental, inclusive. Nos gráficos, adotamos os valores  $m = 1$ ,  $g = 1$ ,  $\mu = 1$  e  $\hbar = 1$ .

Podemos inferir que esse gráfico possui três pontos de equilíbrio: um instável na origem e outros dois estáveis. Um ponto de equilíbrio estável na parte positiva e outra na parte negativa do eixo  $q$ . A origem é um ponto onde ocorre uma quebra de simetria do sistema.

## 5.2 Equação de Gross-Pitaevskii dependente do tempo

Na ausência do potencial externo, a equação de Gross-Pitaevskii é dada por,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(q, p, t) = \left( \frac{p^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{8m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} - \frac{i\hbar p}{2m} \frac{\partial}{\partial q} \right) \psi(q, p, t) + g (\psi \psi^\dagger) \psi(q, p, t),$$

na qual a função de onda e seu complexo conjugado são dados por

$$\psi = \phi_1 + i\phi_2 \quad \text{e} \quad \psi^* = \phi_1 - i\phi_2,$$

a fim de simplificar os cálculos, consideraremos  $\hbar = m = 1$ . A seguir, obtemos os geradores de simetria de Lie e uma solução invariante em (1+1) dimensão.

- Geradores de Simetria de Lie.

$$\begin{aligned} G_1 &= F_4(p) \frac{\partial}{\partial t}, \\ G_2 &= F_5(p) \frac{\partial}{\partial q}, \\ G_3 &= F_6(p) \left[ \phi_2 \frac{\partial}{\partial \phi_1} - \phi_1 \frac{\partial}{\partial \phi_2} \right], \\ G_4 &= F_3(p) \left[ 2t \frac{\partial}{\partial q} - \phi_2 (q - pt) \frac{\partial}{\partial \phi_1} + \phi_1 (q - pt) \frac{\partial}{\partial \phi_2} \right], \\ G_5 &= F_2(p) \left[ (q + pt) \frac{\partial}{\partial q} + 2t \frac{\partial}{\partial t} - (\phi_1 - 2p^2 t \phi_2) \frac{\partial}{\partial \phi_1} - (\phi_2 + 2p^2 t \phi_1) \frac{\partial}{\partial \phi_2} \right], \\ G_6 &= F_1(p) \left[ 2\phi_2 p t \frac{\partial}{\partial \phi_1} - 2\phi_1 p t \frac{\partial}{\partial \phi_2} + \frac{\partial}{\partial p} + \frac{\partial}{\partial q} \right]. \end{aligned} \tag{5.22}$$

Os geradores de simetria apresentam uma dependência funcional em  $p$ . Isso significa que  $p$  é um parâmetro na equação de Schrödinger não-linear no espaço de fase.

- Solução Analítica.

A solução invariante por simetria de Lie é dada por,

$$\begin{aligned} \psi(q, p, t) = \frac{h(p)}{\sqrt{t}} & \left( \left( \sin\left(\frac{2q^2}{t}\right) \sin(2qp) + i \sin\left(\frac{2q^2}{t}\right) \cos(2qp) \right. \right. \\ & + \cos\left(\frac{2q^2}{t}\right) \cos(2qp) - i \cos\left(\frac{2q^2}{t}\right) \sin(2qp) \Big) \\ & + i \left( \sin\left(\frac{2q^2}{t}\right) \sin(2qp) + i \sin\left(\frac{2q^2}{t}\right) \cos(2qp) \right. \\ & \left. \left. - \cos\left(\frac{2q^2}{t}\right) \cos(2qp) + i \cos\left(\frac{2q^2}{t}\right) \sin(2qp) \right) \right), \end{aligned}$$

com o uso de relações trigonométricas  $\psi(q, p, t)$  pode ser escrita como,

$$\psi(q, p, t) = \frac{h(p)}{\sqrt{t}} \left( \cos\left(\frac{2q^2}{t} - 2qp\right) + i \sin\left(\frac{2q^2}{t} - 2qp\right) \right),$$

ou

$$\psi(q, p, t) = \frac{h(p)}{\sqrt{t}} \left( \exp\frac{2iq}{t}(q - pt) \right).$$

Essa solução pertence a uma classe de soluções de equações diferenciais não-lineares, também chamada de sólitons [106]. Uma interpretação física pode ser obtida por meio da função de Wigner,

$$f_w(q, p, t) = \psi(q, p, t) \star \psi^\dagger(q, p, t).$$

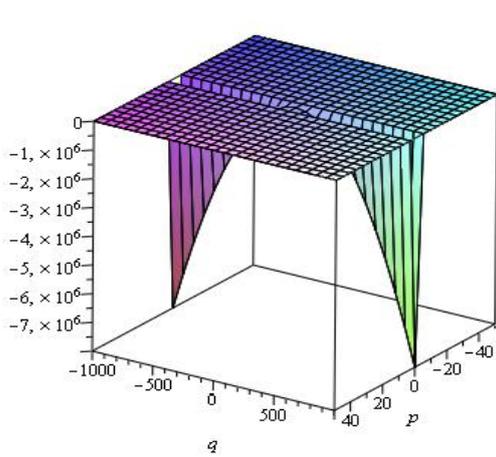
A função de Wigner escrita com a expansão dos três primeiros termos oriundos do produto-estrela é dada por

$$\begin{aligned} f_w(q, p, t) = A(t) e^{-2\gamma p^2} & \left\{ 1 - \frac{4\gamma p(-2q + pt)}{t} + \right. \\ & \left. \frac{2(8\gamma^2 p^4 t^2 + t^2 - 32\gamma^2 p^3 q t + 8\gamma q p t - 6\gamma p^2 t^2 - 8\gamma^2 q^2 p^2 - 8\gamma q^2)}{t^2} \right\}. \end{aligned}$$

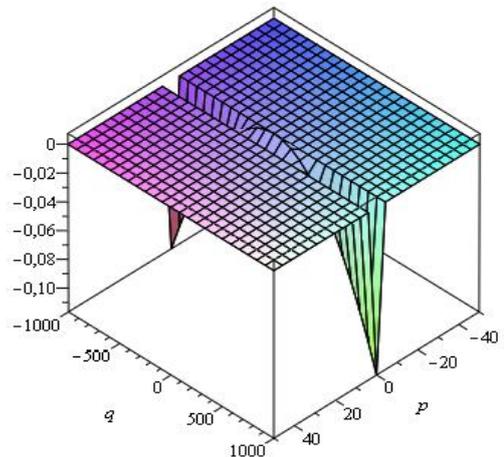
onde  $A(t) = \frac{1}{t}$ .

Nas figuras (5.4(a)-5.4(h)) podemos visualizar o comportamento da função de Wigner para diferentes valores de tempo. Nos gráficos, adotamos  $\hbar = 1$  e  $m = 1$ . Dessa forma, podemos verificar como a função de Wigner evolui com o tempo, mais especificamente, percebemos o que ocorre com a parte negativa da função de Wigner. Observando os gráficos, percebemos que o volume da parte negativa da função de Wigner diminui com o tempo, desaparecendo a partir de  $t = 1601$ . Os valores de tempo aqui considerados foram escolhidos pelo fato de o gráfico da função de Wigner sofrer modificações nestes pontos, não havendo outro motivo para tal escolha. A literatura relaciona o volume da parte negativa da função de Wigner ao caráter quântico do sistema. Há estudos que apontam que a parte negativa da função de Wigner possui relação ao emaranhamento do sistema em questão, e quanto maior o volume da parte negativa, mais

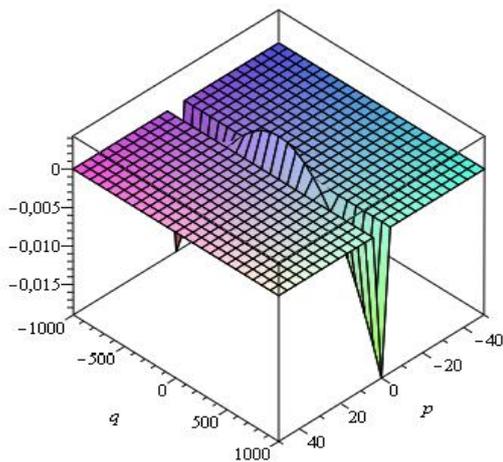
emaranhado está o sistema. Dessa forma, podemos inferir que o sistema analisado, que pode representar um condensado de Bose-Einstein, vai perdendo o seu caráter quântico com o passar do tempo, ou, se levarmos em consideração os estudos sobre emaranhamento, podemos sugerir que o emaranhamento do sistema vai diminuindo à medida que o tempo passa. Tal conjectura é alicerçada nos trabalhos já citados [107, 108, 109, 110]. Esse resultado pode atestar uma limitação na utilização deste sistema na computação quântica, por exemplo [110]. A partir do presente estudo fica em aberto a análise da possibilidade de preparar o sistema para que a negatividade da função de Wigner seja mantida, ou seja, a manutenção do caráter quântico do sistema.



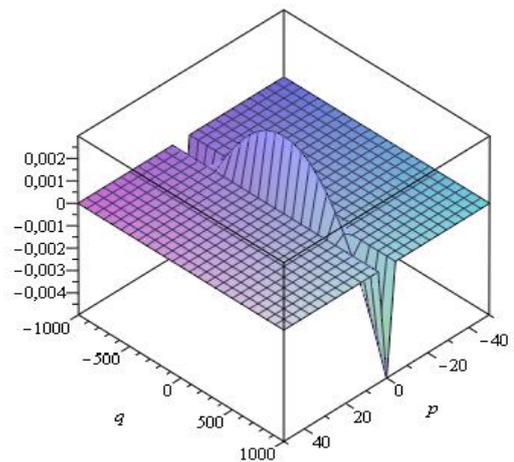
(a)  $t=1$



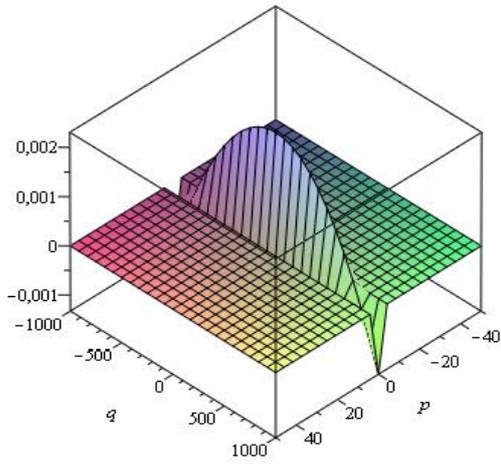
(b)  $t=401$



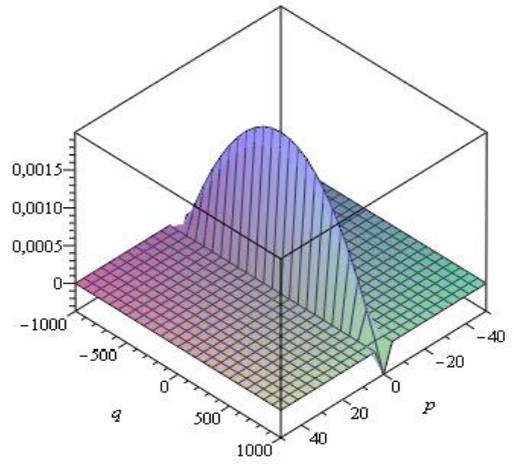
(c)  $t=701$



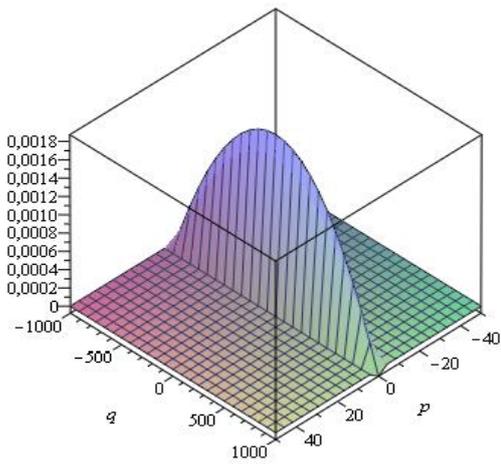
(d)  $t=1001$



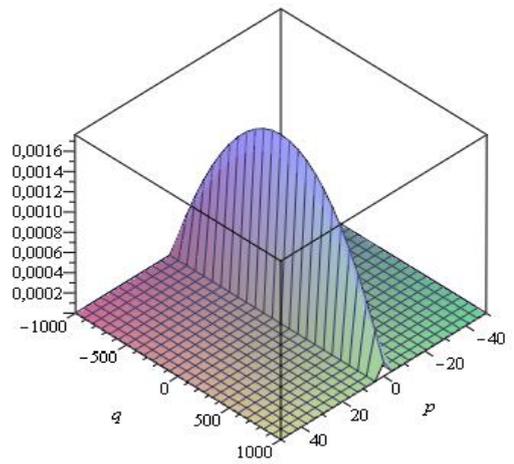
(e)  $t=1301$



(f)  $t=1501$



(g)  $t=1601$



(h)  $t=1701$

Cabe ressaltar que protótipos de computação quântica implementados a partir de condensados de Bose-Einstein já foram realizados. Como exemplo, nos trabalhos de Bunkov e Volovik [117, 118] foi analisada a possibilidade de qubits de longa vida a partir de condensados de Bose-Einstein estabelecidos a partir de magnons, polariton e exciton. Como resultado, descobriu-se que devido aos magnons serem eletricamente neutros e por essa razão interagirem fracamente com os arredores, os condensados de Bose-Einstein elaborados a partir de magnons podem apresentar um tempo de decoerência com escala de alguns segundos. Contudo, percebe-se que mesmo nessas circunstâncias a decoerência é algo, a princípio, inevitável. Nesse sentido, os gráficos apresentados nas Figuras (5.4(a)-5.4(h)) destacam essa mesma característica, pois o fato da parte negativa da função de Wigner diminuir com o tempo, possui correlação com o sistema tender à decoerência [119, 120, 121]. Em um próximo passo, seria estudar a evolução no tempo do modelo analisado nesta seção com a presença de um campo externo, tal qual o campo eletromagnético.

## Capítulo 6

# Simetrias e Soluções do Oscilador Quártico no Espaço de Fase

Neste capítulo, de maneira análoga ao capítulo anterior, buscamos por geradores de simetria de Lie e em seguida as soluções do oscilador quártico no espaço de fase. A obtenção da solução do oscilador quártico seguiu dois panoramas: soluções baseadas em simetrias e soluções algébricas. Além disso, um estudo da interpretação física de soluções foi obtida através da função de Wigner. Os resultados apresentados foram publicados de acordo com a referência [115].

### 6.1 Simetrias e Solução do Oscilador Harmônico no Espaço de Fase

Nesta seção, abordaremos o problema do oscilador harmônico no espaço de fase via método de simetrias de Lie. Este problema já foi abordado algebricamente, sendo encontrado nas referências [58, 60]. O abordaremos aqui, segundo uma metodologia diferente afim de calibrarmos o procedimento que adotamos para procurar soluções. A análise de um problema cuja solução já é conhecida, nos auxiliará nesta proposta de calibração.

Nesse sentido, no espaço de fase a equação é dada por

$$\left( \frac{p^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{8m} \frac{\partial^2}{\partial q^2} - \frac{i\hbar p}{2m} \frac{\partial}{\partial q} \right) \psi(q, p) + \left( \frac{q^2}{2m} + \frac{\hbar^2}{8m} \frac{\partial^2}{\partial p^2} - \frac{i\hbar q}{2m} \frac{\partial}{\partial p} \right) \psi(q, p) = E\psi(q, p),$$

assim, utilizando o SADE, as simetrias para o oscilador no espaço de fase são dadas por,

$$\begin{aligned}
G_1 &= q \frac{\partial}{\partial p} - p \frac{\partial}{\partial q}, \\
G_2 &= \phi_1 \frac{\partial}{\partial \phi_1} + \phi_2 \frac{\partial}{\partial \phi_2}, \\
G_3 &= -\phi_2 \frac{\partial}{\partial \phi_1} + \phi_1 \frac{\partial}{\partial \phi_2}, \\
G_4 &= F_1(q, p) \frac{\partial}{\partial \phi_1} + F_2(q, p) \frac{\partial}{\partial \phi_2}, \\
G_5 &= -2p\phi_2 \frac{\partial}{\partial \phi_1} + 2p\phi_1 \frac{\partial}{\partial \phi_2} + \frac{\partial}{\partial q}, \\
G_6 &= 2q\phi_2 \frac{\partial}{\partial \phi_1} - 2q\phi_1 \frac{\partial}{\partial \phi_2} + \frac{\partial}{\partial p}
\end{aligned} \tag{6.1}$$

De posse do grupo de simetria, podemos construir a álgebra de lie. E é esse resultado que apresentamos abaixo,

$$\begin{bmatrix}
0 & 0 & 0 & -G_6 & -1/2 G_5 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\
G_6 & 0 & 0 & 0 & -G_3 \\
1/2 G_5 & 0 & 0 & G_3 & 0
\end{bmatrix},$$

aqui desconsideramos o  $G_4$ , pois queríamos obter uma álgebra finita.

Utilizando o gerador de simetria  $G_1$  encontramos a seguinte solução invariante,

$$\begin{aligned}
\psi(q, p) &= \{C_1 M(1/2 - E, 1, (2q^2 + 2p^2)) + C_2 U(1/2 - E, 1, (2q^2 + 2p^2)) \\
&\quad + iC_1 M(1/2 - E, 1, (2q^2 + 2p^2)) + C_2 U(1/2 - E, 1, (2q^2 + 2p^2))\} e^{-(q^2+p^2)}.
\end{aligned}$$

Simplificando a expressão acima ficamos com,

$$\psi(q, p) = (1 + i) \{ (C_1 M(1/2 - E, 1, 2p^2 + 2q^2) + C_2 U(1/2 - E, 1, 2p^2 + 2q^2)) \} e^{-(q^2+p^2)},$$

onde  $M(a, c, x)$  e  $U(a, c, x)$  são funções hipergeométricas confluentes. Considerando  $C_2 = 0$  e usando a relação,

$$M(-n, 1, x) = L_n(x),$$

onde  $L_n(x)$  são os polinômios de Laguerre, a equação acima pode ser escrita da forma,

$$\psi(q, p) = \frac{2(1+i)}{\pi} e^{-(q^2+p^2)} L_n(2p^2 + 2q^2),$$

e que tem a mesma forma que as já apresentadas na literatura [58].

## 6.2 Simetrias e Solução do Oscilador Quártico no Espaço de Fase: Solução Analítica

Nesta seção, apresentaremos a solução algébrica da equação de Schrödinger no espaço de fase submetida ao potencial quártico. Nesse contexto, consideraremos o seguinte potencial

$$V(q) = \lambda q^4 + \frac{1}{2}q^2,$$

em que  $\lambda$  é um parâmetro constante. A equação de Schrödinger no espaço de fase é então escrita como

$$\left( \frac{1}{2}p^2 + \frac{1}{2}q^2 + \lambda q^4 \right) \star \psi(q, p) = E\psi(q, p). \quad (6.2)$$

Tomamos  $\hbar = 1$ ,  $\omega = 1$ ,  $m = 1$ . Isso é equivalente a tomarmos as constantes adimensionais  $E \rightarrow E/\hbar\omega$ ,  $x \rightarrow \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$  e  $\lambda \rightarrow \left(\frac{\hbar}{m^2\omega^3}\right)\lambda$ . Usando as propriedades do produto-estrela, podemos escrever

$$\left[ \begin{aligned} & \frac{1}{2} \left( p^2 - ip\partial_q - \frac{1}{4}\partial_q^2 \right) + \frac{1}{2} \left( q^2 + iq\partial_p - \frac{1}{4}\partial_p^2 \right) \\ & + \lambda \left( q^4 + 2iq^3\partial_p - \frac{3}{2}q^2\partial_p^2 - \frac{i}{2}q\partial_p^3 + \frac{1}{16}\partial_p^4 \right) \end{aligned} \right] \psi(q, p) = E\psi(q, p). \quad (6.3)$$

As simetrias para esta equação são dadas por

$$\begin{aligned} G_1 &= \phi_1 \frac{\partial}{\partial \phi_1} + \phi_2 \frac{\partial}{\partial \phi_2}, \\ G_2 &= -\phi_2 \frac{\partial}{\partial \phi_1} + \phi_1 \frac{\partial}{\partial \phi_2}, \\ G_3 &= F_1(q, p) \frac{\partial}{\partial \phi_1} + F_2(q, p) \frac{\partial}{\partial \phi_2}, \\ G_4 &= -2p\phi_2 \frac{\partial}{\partial \phi_1} + 2p\phi_1 \frac{\partial}{\partial \phi_2} + \frac{\partial}{\partial q}, \\ G_5 &= 2q\phi_2 \frac{\partial}{\partial \phi_1} - 2q\phi_1 \frac{\partial}{\partial \phi_2} + \frac{\partial}{\partial p}. \end{aligned} \quad (6.4)$$

A álgebra de lie dos geradores é dada por,

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -4G_2 \\ 0 & 0 & 4G_2 & 0 \end{bmatrix}. \quad (6.5)$$

O gerador  $G_3$  foi desprezado porque trabalhamos com uma álgebra finita. A partir do gerador  $G_5$ , obtemos a seguinte solução invariante,

$$\psi(q, p) = \left\{ C_1 e^{-4/3 \frac{q(16q^2\alpha+3)\sqrt{2}}{\sqrt{\alpha}(1+i\sqrt{3})^3} \text{HT1}} + C_2 e^{4/3 \frac{q(16q^2\alpha+3)\sqrt{2}}{\sqrt{\alpha}(1+i\sqrt{3})^3} \text{HT2}} \right\} e^{-2iqp}, \quad (6.6)$$

onde HT1 e HT2 são dadas por,

$$\text{HT1} = \text{HeunT} \left( 16 \frac{3^{2/3} (16 \lambda E + 1)}{\lambda^{4/3} (1 + i\sqrt{3})^8}, 0, 8/3 \frac{9^{2/3}}{(1 + i\sqrt{3})^4 \sqrt[3]{\lambda^2}}, 1/3 \sqrt{2} \sqrt[6]{\lambda} q \left( 3^{2/3} + 3i\sqrt[6]{3} \right) \right), \quad (6.7)$$

e

$$\text{HT2} = \text{HeunT} \left( 16 \frac{3^{2/3} (16 \lambda E + 1)}{\lambda^{4/3} (1 + i\sqrt{3})^8}, 0, 8/3 \frac{9^{2/3}}{(1 + i\sqrt{3})^4 \sqrt[3]{\lambda^2}}, -1/3 \sqrt{2} \sqrt[6]{\lambda} q \left( 3^{2/3} + 3i\sqrt[6]{3} \right) \right), \quad (6.8)$$

e *HeunT* representa a função de Heun Triconfluente. Na próxima seção, vamos explorar as propriedades da equação diferencial de Heun e logo após calcular as quantidades físicas.

### 6.3 Oscilador Quártico no Espaço de Fase: Solução Algébrica

Nesta seção, apresentaremos a solução algébrica da equação de Schrödinger no espaço de fase submetida ao potencial quártico, a Eq.(6.4) . A fim de resolver a equação, tomaremos o ansatz  $\psi(q, p) = e^{-2iqp} \phi(q)$ , o qual é justificado pelo uso do SADE na obtenção dos geradores de simetria estabelecidos na seção anterior. Calculando as derivadas de  $\psi(q, p)$  para posterior substituição na Eq.(6.4), obtemos:

$$\begin{aligned} \partial_q \psi &= -2ipe^{-2iqp} \phi(q) + e^{-2iqp} \partial_q \phi(q), \\ \partial_q^2 \psi &= -4p^2 e^{-2iqp} \phi(q) - 4ipe^{-2iqp} \partial_q \phi(q) + e^{-2iqp} \partial_q^2 \phi(q), \\ \partial_p \psi &= -2iqe^{-2iqp} \phi(q), \\ \partial_p^2 \psi &= -4q^2 e^{-2iqp} \phi(q), \\ \partial_p^3 \psi &= 8iq^3 e^{-2iqp} \phi(q), \\ \partial_p^4 \psi &= 16q^4 e^{-2iqp} \phi(q). \end{aligned}$$

Substituindo tais derivadas na Eq.(6.4), obtemos

$$\partial_q^2 \phi(q) + (8E - 16q^2 - 128\lambda q^4) \phi(q) = 0. \quad (6.9)$$

A equação (6.9) é a equação diferencial triconfluente de Heun escrita na forma normal. Nesse sentido, sua solução pode ser escrita em termos da função de Heun triconfluente. Portanto, para compreendermos como se estabelece tal relação, vamos revisitar a equação diferencial triconfluente de Heun.

#### 6.3.1 A equação diferencial tricounfluente de Heun nas formas normal e padrão

A equação diferencial tricounfluente de Heun é usualmente escrita como

$$\frac{d^2 y}{dx^2} - (3x^2 + \gamma) \frac{dy}{dx} - [(3 - \beta)x - \alpha]y = 0, \quad (6.10)$$

em que  $y \equiv y(x)$  e  $\alpha, \beta, \gamma$  são parâmetros. Sendo assim,  $y(x)$  é denominada função de Heun triconfluente, representada por  $y(x) = \text{HeunT}(\alpha, \beta, \gamma, x)$ . A equação(6.10) pode ser representada na forma normal, a qual é dada por,

$$\frac{d^2y}{dx^2} + (Ax^4 + Bx^3 + Cx^2 + Dx + F)y = 0, \quad (6.11)$$

em que  $A, B, C, D$  e  $F$  são constantes. O nosso objetivo aqui é mostrar a relação que há entre a equação de Heun na formas normal e usual. Para esse propósito, considere que  $y(x) = u(x)v(x)$ . Com isso, temos  $y' = u'v + uv'$  e  $y'' = u''v + 2u'v' + uv''$ , em que  $f' = \frac{df}{dx}$ . Nesse caso, a equação (6.10) é escrita como

$$v \frac{d^2u}{dx^2} + \left[ 2 \frac{dv}{dx} - (3x^2 + \gamma)v \right] \frac{du}{dx} + \left[ \frac{d^2v}{dx^2} - (3x^2 + \gamma) \frac{dv}{dx} - ((3 - \beta)x + \alpha)v \right] u = 0. \quad (6.12)$$

A fim de obtermos a equação diferencial na forma normal, devemos tomar o coeficiente da derivada primeira da função  $u(x)$  como zero, ou seja,

$$2 \frac{dv}{dx} - (3x^2 + \gamma)v = 0,$$

o que fornece, após integração com respeito a  $x$ ,

$$v(x) = e^{\frac{1}{2}(x^3 + \gamma x)}. \quad (6.13)$$

Substituindo a Eq.(6.13) na Eq.(6.12), obtemos

$$\frac{d^2u}{dx^2} + \left[ -\frac{9}{4}x^4 - \frac{3\gamma}{2}x^2 - \beta x + \left( -\frac{\gamma^2}{4} - \alpha \right) \right] u = 0, \quad (6.14)$$

que é a forma normal da equação diferencial triconfluente de Heun, em que  $A = -\frac{9}{4}$ ,  $B = 0$ ,  $C = -\frac{3\gamma}{2}x^2$ ,  $D = -\beta$  e  $F = \left( -\frac{\gamma^2}{4} - \alpha \right)$ . Agora, comparando a Eq.(6.9) e Eq.(6.14), temos  $x = \pm 2\lambda^{\frac{1}{6}}q$  e

$$\gamma = \frac{1}{3} \frac{2^{\frac{1}{3}}}{3} \lambda^{-\frac{2}{3}},$$

$$\beta = 0,$$

$$\alpha = -\frac{3^{-\frac{1}{2}}}{4} \lambda^{-\frac{1}{3}} \left( 2E + \frac{1}{4} \right).$$

Como  $y = uv$ , neste caso,  $u = v^{-1}y$ , ou seja,

$$\begin{aligned} \phi(q) &= K_1 e^{\frac{1}{2}(q^3 + \gamma q)} \text{HeunT} \left( -\frac{3^{-\frac{1}{2}}}{4} \lambda^{-\frac{1}{3}} \left( 2E + \frac{1}{4} \right), 0, \frac{1}{3} \frac{2^{\frac{1}{3}}}{3} \lambda^{-\frac{2}{3}}, 2 \frac{4^{\frac{1}{6}}}{3} \lambda^{\frac{1}{6}} q \right) \\ &+ K_2 e^{-\frac{1}{2}(q^3 + \gamma q)} \text{HeunT} \left( -\frac{3^{-\frac{1}{2}}}{4} \lambda^{-\frac{1}{3}} \left( 2E + \frac{1}{4} \right), 0, \frac{1}{3} \frac{2^{\frac{1}{3}}}{3} \lambda^{-\frac{2}{3}}, -2 \frac{4^{\frac{1}{6}}}{3} \lambda^{\frac{1}{6}} q \right), \end{aligned}$$

em que  $K_1$  e  $K_2$  são constantes, e  $\text{HeunT}(a, b, c, x)$  representa a função de Heun triconfluente. Note que essa parte da solução é bastante similar à obtida na referência [36] na qual o potencial

quártico foi analisado no espaço das configurações. Por fim, a solução do problema considerado é dada por,

$$\begin{aligned} \psi(q, p) = & K_1 e^{-2iqp} e^{\frac{1}{2}(q^3 + \gamma q)} \text{HeunT} \left( -\frac{3}{4} \lambda^{-\frac{1}{3}} (2E + \frac{1}{4}), 0, \frac{1}{3} \frac{2}{3} \lambda^{-\frac{2}{3}}, 2 \frac{4}{3} \lambda^{\frac{1}{6}} q \right) \\ & + K_2 e^{-2iqp} e^{-\frac{1}{2}(q^3 + \gamma q)} \text{HeunT} \left( -\frac{3}{4} \lambda^{-\frac{1}{3}} (2E + \frac{1}{4}), 0, \frac{1}{3} \frac{2}{3} \lambda^{-\frac{2}{3}}, -2 \frac{4}{3} \lambda^{\frac{1}{6}} q \right). \end{aligned}$$

A função de Wigner para este sistema é obtida a partir de  $f_W(q, p) = \psi(q, p) \star \psi^*(q, p)$ . O cálculo do produto-estrela foi realizado com a utilização do código em Maple dado no Apêndice B. Na próxima seção analisaremos a solução obtida.

## 6.4 Função de Wigner

Nesta seção, analisamos as soluções obtidas na última seção para o oscilador quártico no espaço de fase. Primeiramente, notamos que a solução algébrica tem a mesma forma da solução computacional. Esse fato sugere a eficácia das duas metodologias utilizadas. Em seguida, calculamos a função de Wigner para o oscilador quártico para os três primeiros níveis de energia. Para  $\lambda = 1$  e os valores de energia dado pelo artigo [111], temos os gráficos seguem nas Figs. 1-3.

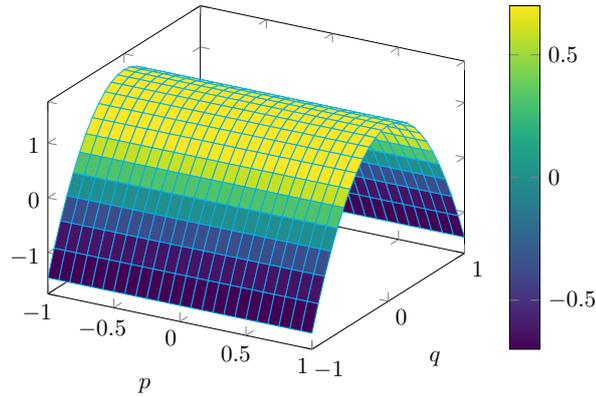


Figura 6.1: Função de Wigner para o oscilador quártico,  $n = 0$ ,

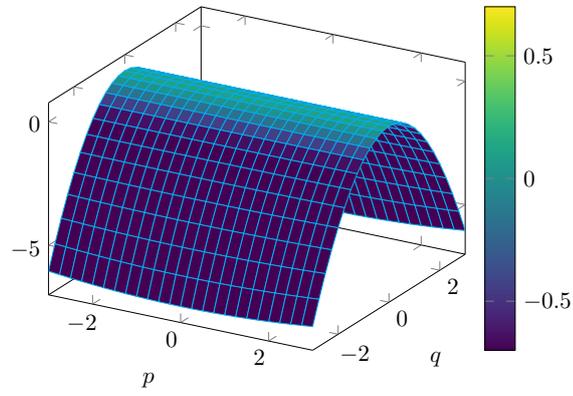


Figura 6.2: Função de Wigner para o oscilador quártico,  $n = 1$

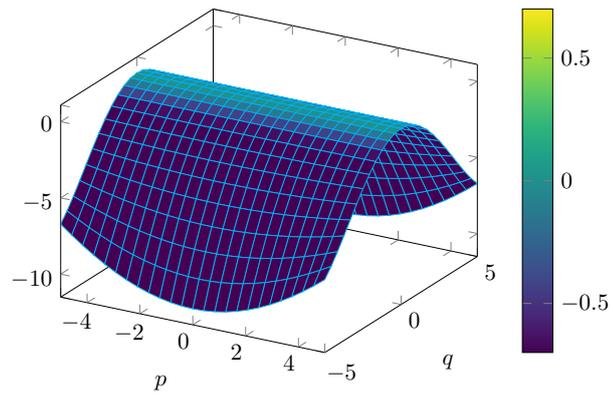


Figura 6.3: Função de Wigner para o oscilador quártico,  $n = 2$

Usando a função de Wigner, o parâmetro de negatividade para o sistema é calculado. Os resultados são

Tabela 6.1: Parâmetro de negatividade para  $n = 0, 1, 2$ .

$n$	$\eta(\psi)$
0	0.7
1	2.4
2	2.7

O parâmetro de negatividade aumenta com o aumento dos níveis de energia  $n$ , isso indica que o sistema apresenta mais características não-clássicas. Além disso, esse aumento da negatividade diretamente relacionado ao aumento da ordem do oscilador pode ser interessante em sistemas que o emaranhamento quântico seja necessário, pois o desvio de comportamento clássico pode ser relacionado a níveis mais fortes de entrelaçamento do sistema.

No caso do oscilador harmônico o parâmetro de negatividade é zero para  $n$  zero, ou seja, não há diferença entre o sistema clássico ou quântico. No oscilador quártico, o parâmetro de negatividade é diferente de zero, ou seja, não tem um análogo clássico.

## Capítulo 7

# Conclusões e Perspectivas

As simetrias estão no âmago desta tese. Seja no aspecto de técnica utilizando simetrias para obter soluções, seja no aspecto de construção da representação de grupo cinemático que permite o estudo de equações diferenciais, por exemplo, o grupo de simetria de Galilei permite deduzir a equação de Schrödinger no espaço de fase. Nesse sentido, nos capítulos 2, 3 e 4 fizemos uma revisão de bibliografia. No capítulo 2, revisamos a equação de Gross-Pitaevskii e o oscilador quártico. Iniciamos o capítulo como uma discussão a respeito da equação de Schrödinger. Seguimos o capítulo com a dedução da equação de Gross-Pitaevskii independente e dependente do tempo. O oscilador quártico foi tratado como uma extensão natural do oscilador harmônico. Observamos que, a depender dos parâmetros podemos ter diferentes potenciais quárticos. No capítulo 3, estudamos a função de Wigner e suas propriedades. Uma propriedade particularmente interessante é o operador estrela. Esta propriedade permitiu estudar representações unitárias de grupos cinemáticos. Seguindo o procedimento de oliveira et. al [57], estudamos representações unitárias do grupo de Galilei; e assim, obtemos a equação de Schrödinger no espaço de fase. Nesse formalismo, a função de Wigner é obtida de forma direta. Nesse contexto, discutimos a medida da negatividade da função de Wigner e sua interpretação contemporânea. No capítulo 4, introduzimos alguns conceitos que são fundamentais no estudo de grupos e álgebras de Lie. Aplicamos o estudo dessas simetrias nas equações diferenciais parciais para obter geradores, a álgebra e soluções invariantes. Definimos um grupo de Lie a partir da noção de variedade diferenciável. Consideramos um grupo de simetria e obtemos os geradores infinitesimais do grupo. A álgebra de Lie é construída pelas relações de comutação que os elementos infinitesimais do grupo de Lie estabelecem entre si. Consideramos uma EDP de duas variáveis e obtemos os geradores de simetria a partir das transformações infinitesimais que são impostas nesta equação. De posse dos geradores, construímos soluções invariantes utilizando o método das características. No final do capítulo, calculamos analiticamente os geradores de duas equações para evidenciar a necessidade do uso de um pacote computacional. No caso do oscilador, ainda fomos adiante e calculamos a solução e encontramos o resultado obtido na literatura, o que mostra a robustez do SADE para esse tipo de cálculo.

No capítulo 5, fizemos um estudo analítico da equação de Gross-pitaevskii no espaço de fase. Para realizar esse estudo, utilizamos o pacote SADE para efetuar os cálculos ou obter ansatz interessantes que seriam utilizados na obtenção das soluções analíticas. Na seção 5.1, realizamos cálculos da equação de Gross-Pitaevskii no regime estacionário via ansatz. A partir da função de onda, calculamos a densidade de quase probabilidade. A função de Wigner foi calculada a partir da função de onda. A partir do gráfico da função de Wigner, extraímos informações

físicas relevantes, como a existência de duas regiões negativas da função de Wigner. Na seção 5.2, calculamos as simetrias e as funções de onda no espaço de fase para a equação de Gross-Pitaevskii dependente do tempo na ausência de um potencial externo. Posteriormente, o cálculo da função de Wigner também foi realizado e através do gráfico percebemos que com a evolução temporal a parte negativa deixa de existir, isto é, a partir de um certo instante as características quânticas deixarão de existir. Notamos que esse resultado pode indicar um limite na utilização de um sistema quântico.

No capítulo 6, fizemos um estudo algébrico e analítico do oscilador no espaço de fase. O SADE também foi imprescindível no nosso estudo neste capítulo. Na seção 6.1, revisamos o oscilador harmônico no espaço de fase pelo método de simetrias de Lie. Calculamos geradores, álgebra e solução invariante por simetria de Lie. A solução invariante é conhecida na literatura [1, 2], no entanto, foi obtida técnicas algébricas e analíticas no espaço usual. Isso reforça a confiança nos resultados. Na seção 6.2, prosseguimos com a mesma análise para o oscilador quártico. Na seção 6.3, utilizamos um método algébrico para encontrar uma solução. Por fim, na seção 6.4 a partir da função de onda quantidades físicas como a função de Wigner e o parâmetro de negatividade foram obtidas. Notamos que o parâmetro de negatividade aumenta com o aumento dos níveis de energia. Isso indica que o sistema apresenta mais características não-clássicas. O emaranhamento é um exemplo de fenômeno que cujo comportamento pode ser analisado a partir do aumento do parâmetro de negatividade. Observamos também que não podemos obter um análogo clássico para o oscilador quártico.

A continuidade dessa pesquisa encontra possibilidades interessantes tanto no aspecto de um estudo voltado para técnicas matemáticas a serem empregadas como o estudo da descrição física do problema abordado. No que se refere ao estudo de aspectos de natureza matemática, é interessante a análise da equação por outras simetrias além da simetria de Lie. Outro aspecto interessante, é a busca por uma transformação que mapeia soluções do espaço de fase para soluções do espaço usual. No que se refere aos aspectos físicos, pode ser analisado: as simetrias físicas, leis de conservação, colisões de kinks e sólitons, e o emaranhamento no espaço de fase. O estudo de potenciais de confinamento de partículas, tipo armadilhas de aprisionamento, também pode ser abordado. Além dos pontos já levantados, também é promissor o estudo da conexão entre o parâmetro de negatividade e a caoticidade do sistema, pois a literatura atesta que há correlação, mas esse ateste é baseado em indução; logo há a carência de uma dedução matemática desta propriedade, e isto pode ser mais facilmente obtido a partir do formalismo de espaço de fase que denominamos de mecânica quântica simplética. Outra possibilidade de futuros trabalhos, é considerar um estudo para 2+1 e 3+1 dimensões para os sistemas já estudados nesta tese e considerar outros sistemas físicos.

Capítulo 8

Apêndice

## Apêndice A

# Simetrias não-clássicas

Neste apêndice, vamos apresentar uma classe de grupo de transformações mais gerais em um sentido que as transformações de Lie que podem levar a soluções invariantes de uma EDP [103, 104]. Consideremos EDPs que possuem a seguinte forma,

$$\Delta_\beta \equiv u_{\sigma_\beta} - w_\beta(x, u^{(n)}) = 0, \quad \beta = 1, \dots, M. \quad (\text{A.1})$$

onde  $u = (u^1, \dots, u^n)$  são variáveis dependentes e  $x = (x^1, \dots, x^n)$  são as variáveis independentes;  $u^{(n)}$  representa o conjunto de variáveis dependentes e suas derivadas de ordem  $n$  ou menores.

Cada  $u_{\sigma_\beta}$  é a maior derivada para algum  $u_\sigma$ .

$$G^{(J)} \Delta_\beta = 0.$$

As transformações infinitesimais de simetria são,

$$\begin{aligned} \hat{x} &= x + \varepsilon \theta^i(x, t, u), \\ \hat{u} &= u + \varepsilon \eta_\alpha(x, t, u), \end{aligned}$$

onde  $\varepsilon$  é o parâmetro infinitesimal do grupo e  $\theta^i$  e  $\eta_\alpha$  são funções de variáveis dependentes e variáveis independentes juntas. O gerador infinitesimal de simetria é dado por

$$G = \sum_i \theta^i(x, u) \partial_{x^i} + \sum_\alpha \eta_\alpha(x, u) \partial_{u^\alpha}.$$

A característica  $Q$  do grupo é ,

$$Q_\alpha = \eta_\alpha - \sum_i \theta^i u_{x^i}^\alpha \quad \alpha = 1, \dots, M.$$

O conjunto das transformações infinitesimais, com seus respectivos geradores  $\{G_1, \dots, G_n\}$  forma uma álgebra de Lie  $n$ -dimensional com relação ao produto definido pelo comutador de dois geradores,

$$[G_i, G_j] = \sum_k C_{ij}^k G_k.$$

Os geradores infinitesimais prolongados podem ser expressos por uma fórmula geral,

$$G^{(J)} = \sum_i \theta^i(x, u) \partial_{x^i} + \sum_\alpha \eta_\alpha(x, u) \partial_{u^\alpha} + \sum_{\alpha, J} \eta_\alpha^J \partial_{u_\alpha^J}. \quad (\text{A.2})$$

onde

$$u_\alpha^J = D_J u^\alpha, \quad (\text{A.3})$$

em que

$$D_J = D_{x^1}^{j_1} D_{x^2}^{j_2} \dots D_{x^M}^{j_M}, \quad (\text{A.4})$$

sendo  $J_R$  um número inteiro e podemos agora definir simetria não clássica como uma transformação que mantém invariante não apenas a equação original, mas também a própria condição de invariância,

$$G^{(J)} \Delta = 0, \quad (\text{A.5})$$

e

$$G^{(J)} Q = 0, \quad (\text{A.6})$$

com  $J$  grande o suficiente. O sistema determinante que daí decorre é não-linear nas incógnitas  $\eta_\alpha$  e  $\theta^i$ . O conjunto de todas as simetrias não-clássicas inclui as simetrias de Lie e não formam um espaço vetorial (portanto não formam uma álgebra). Como consequência e sem perda de generalidade podemos considerar  $\theta^1 = 1$  ou  $\theta^1 = 0$ . Neste último caso podemos considerar  $\theta^2 = 1$  ou  $\theta^2 = 0$  e assim por diante. Uma propriedade útil é que se  $G$  for um gerador de simetria não-clássica, então  $F(x, u)G$  também será. O sistema de equações não-lineares obtidos é muito complicado e portanto o uso de computação algébrica se faz necessário. A seguir, as técnicas introduzidas nesta seção serão implementadas com o auxílio do SADE [73].

## A.1 Exemplo: Equação de Schrödinger Não-Linear

Neste apêndice apresentamos soluções analíticas da ESNL. A análise foi feita em (1+1) dimensões, ou seja, uma dimensão de espaço e uma de tempo [104]. Para esse estudo utilizamos o pacote SADE para busca a busca por simetrias e determinação de soluções invariantes de equações diferenciais parciais não-lineares. Na primeira seção encontramos os geradores de simetria de Lie. Na segunda seção construímos soluções invariantes por simetrias não-clássica. A EDP de nosso interesse é a ESNL quártica dependente do tempo:

$$\Delta(x, t, \psi, \psi_x, \dots) = i \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} - \frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} - a_0 \psi - a_1 \psi |\psi|^2 - a_2 \psi |\psi|^4 = 0 \quad (\text{A.7})$$

na qual a função de onda e seu complexo conjugado são dados por

$$\psi = \phi_1 + i\phi_2 \quad \text{e} \quad \psi^* = \phi_1 - i\phi_2$$

com  $a_0$ ,  $a_1$  e  $a_2$  sendo coeficientes e  $\hbar = 1$ . Temos dois valores para  $\theta$ ,  $\theta_1 = 0$  e  $\theta_1 = 1$ . Para o cálculo computacional, é conveniente separar as partes real(A) e imaginária(B) da equação (A.7):

$$A = -\frac{\partial\phi_2}{\partial t} + \frac{\partial\phi_1^2}{\partial x^2} - a_0\phi_1 - a_1(\phi_1)^3 - a_1\phi_1(\phi_2)^2 - a_2(\phi_1)^5 - 2a_2(\phi_1)^3(\phi_2)^2 - a_2\phi_1(\phi_2)^4 = 0,$$

$$B = \frac{\partial\phi_1}{\partial t} + \frac{\partial\phi_2^2}{\partial x^2} - a_1(\phi_2)^3 - a_1(\phi_1)^2\phi_2 - a_2(\phi_1)^4\phi_2 - 2a_2(\phi_1)^2(\phi_2)^3 - a_2(\phi_2)^5 - a_0\phi_2.$$

A transformação infinitesimal de simetria é então:

$$\begin{aligned}\phi_1' &= \phi_1 + \epsilon\eta_1(x, t, \phi_1, \phi_2), \\ \phi_2' &= \phi_2 + \epsilon\eta_2(x, t, \phi_1, \phi_2), \\ t' &= t + \epsilon\theta_1(x, t, \phi_1, \phi_2), \\ x' &= x + \epsilon\theta_2(x, t, \phi_1, \phi_2).\end{aligned}\tag{A.8}$$

Gerador de simetria de Lie:

$$G = \eta_1 \frac{\partial}{\partial\phi_1} + \eta_2 \frac{\partial}{\partial\phi_2} + \theta_1 \frac{\partial}{\partial t} + \theta_2 \frac{\partial}{\partial x}.$$

As simetrias de Lie associadas à ESNL para diferentes coeficientes.  
 Caso1:  $a_0 \neq 0, a_1 \neq 0, a_2 \neq 0$ . Geradores de Simetria:

$$\begin{aligned}
 G_1 &= \frac{\partial}{\partial t}, \\
 G_2 &= , \\
 G_3 &= \phi_2 \frac{\partial}{\partial \phi_1} - \phi_1 \frac{\partial}{\partial \phi_2}, \\
 G_4 &= \phi_2 x \frac{\partial}{\partial \phi_1} - \phi_1 x \frac{\partial}{\partial \phi_2} - 2t \frac{\partial}{\partial x}.
 \end{aligned} \tag{A.9}$$

A relação de comutação entre os geradores é dada pela seguinte tabela, a entrada linha  $i$  e coluna  $j$  representa  $[G_i, G_j]$ :

Álgebra de Lie da ESNL				
$[G_i, G_j]$	$G_1$	$G_2$	$G_3$	$G_4$
$G_1$	0	0	0	$-2G_2$
$G_2$	0	0	0	$G_3$
$G_3$	0	0	0	0
$G_4$	$2G_2$	$-G_3$	0	0

CASO2:  $a_0 \neq 0, a_1 \neq 0, a_2 = 0$ . Geradores de Simetria:

$$\begin{aligned}
 G_1 &= \frac{\partial}{\partial t}, \\
 G_2 &= \frac{\partial}{\partial x}, \\
 G_3 &= -\phi_2 \frac{\partial}{\partial \phi_1} + \phi_1 \frac{\partial}{\partial \phi_2}, \\
 G_4 &= -\phi_2 x \frac{\partial}{\partial \phi_1} + \phi_1 x \frac{\partial}{\partial \phi_2} + 2t \frac{\partial}{\partial x}, \\
 G_5 &= (-\phi_1 + 2\phi_2 a_0 t) \frac{\partial}{\partial \phi_1} + (-2\phi_1 a_0 t - 2\phi_2) \frac{\partial}{\partial \phi_2} + 2t \frac{\partial}{\partial t} + x \frac{\partial}{\partial x}.
 \end{aligned} \tag{A.10}$$

Elementos da álgebra Lie:

Álgebra de Lie da ESNL					
$[G_i, G_j]$	$G_1$	$G_2$	$G_3$	$G_4$	$G_5$
$G_1$	0	0	0	$2G_2$	$2G_1 - 2a_0 G_3$
$G_2$	0	0	0	$G_3$	$G_2$
$G_3$	0	0	0	0	0
$G_4$	$-2G_2$	$-G_3$	0	0	$-G_4$
$G_5$	$-2G_1 + 2a_0 G_3$	$-G_2$	0	$G_4$	0

CASO3:  $a_0 \neq 0, a_1 = 0, a_2 \neq 0$ . Geradores de Simetria:

$$\begin{aligned}
G_1 &= \frac{\partial}{\partial t}, \\
G_2 &= \frac{\partial}{\partial x}, \\
G_3 &= -\phi_2 \frac{\partial}{\partial \phi_1} + \phi_1 \frac{\partial}{\partial \phi_2}, \\
G_4 &= -\phi_2 x \frac{\partial}{\partial \phi_1} + \phi_1 x \frac{\partial}{\partial \phi_2} + 2t \frac{\partial}{\partial x}, \\
G_5 &= \left( \frac{-1}{2} \phi_1 + 2\phi_2 a_0 t \right) \frac{\partial}{\partial \phi_1} + \left( -2\phi_1 a_0 t - \frac{1}{2} \phi_2 \right) \frac{\partial}{\partial \phi_2} + 2t \frac{\partial}{\partial t} + x \frac{\partial}{\partial x}, \\
G_6 &= \left( -\frac{1}{2} \phi_1 + 2\phi_2 a_0 t \right) \frac{\partial}{\partial \phi_1} + (-2\phi_1 a_0 t - 2\phi_2) \frac{\partial}{\partial \phi_2} + 2t^2 \frac{\partial}{\partial t} + 2xt \frac{\partial}{\partial x}. \quad (\text{A.11})
\end{aligned}$$

Elementos da álgebra Lie:

Álgebra de Lie da ESNL						
$[G_i, G_j]$	$G_1$	$G_2$	$G_3$	$G_4$	$G_5$	$G_6$
$G_1$	0	0	0	$2G_2$	$2G_1 - 2a_0 G_3$	$2G_5$
$G_2$	0	0	0	$G_3$	$G_2$	$G_4$
$G_3$	0	0	0	0	0	0
$G_4$	$-2G_2$	$-G_3$	0	0	$-G_4$	0
$G_5$	$-2G_1 + 2a_0 G_3$	$-G_2$	0	$G_4$	0	$2G_6$
$G_6$	$-2G_5$	$-G_4$	0	0	$-2G_6$	0

CASO4:  $a_0 \neq 0, a_1 = 0, a_2 = 0$ . Geradores de Simetria:

$$\begin{aligned}
G_1 &= \frac{\partial}{\partial t}, \\
G_2 &= \frac{\partial}{\partial x}, \\
G_3 &= \phi_1 \frac{\partial}{\partial \phi_1} + \phi_2 \frac{\partial}{\partial \phi_2}, \\
G_4 &= -\phi_2 \frac{\partial}{\partial \phi_1} + \phi_1 \frac{\partial}{\partial \phi_2}, \\
G_5 &= -\phi_2 x \frac{\partial}{\partial \phi_1} + \phi_1 x \frac{\partial}{\partial \phi_2} + 2t \frac{\partial}{\partial x}, \\
G_6 &= \left( -\phi_1 t - \frac{1}{2} \phi_2 x^2 + \phi_2 a_0 t^2 \right) \frac{\partial}{\partial \phi_1} + \left( \frac{1}{2} \phi_1 x^2 - \phi_1 a_0 t^2 - \phi_2 t \right) \frac{\partial}{\partial \phi_2} + 2t^2 \frac{\partial}{\partial t} + 2xt \frac{\partial}{\partial x}, \\
G_7 &= 2\phi_2 a_0 t \frac{\partial}{\partial \phi_1} - 2\phi_1 a_0 t \frac{\partial}{\partial \phi_2} + 2t \frac{\partial}{\partial t} + x \frac{\partial}{\partial x}.
\end{aligned}$$

Elementos da álgebra Lie:

Álgebra de Lie da ESNL							
$[G_i, G_j]$	$G_1$	$G_2$	$G_3$	$G_4$	$G_5$	$G_6$	$G_7$
$G_1$	0	0	0	0	$2G_2$	$-G_3 + 2G_7$	$2G_1 - 2a_0G_4$
$G_2$	0	0	0	0	$G_4$	$G_5$	$G_2$
$G_3$	0	0	0	0	0	0	0
$G_4$	0	0	0	0	0	0	0
$G_5$	$-2G_2$	$-G_4$	0	0	0	0	$-G_5$
$G_6$	$G_3 - 2G_7$	$-G_5$	0	0	0	0	$-2G_6$
$G_7$	$-2G_1 + 2a_0G_4$	$-G_2$	0	0	$G_5$	$2G_6$	0

CASO5:  $a_0 = 0, a_1 \neq 0, a_2 \neq 0$ . Geradores de Simetria:

$$\begin{aligned}
G_1 &= \frac{\partial}{\partial t}, \\
G_2 &= \frac{\partial}{\partial x}, \\
G_3 &= -\phi_2 \frac{\partial}{\partial \phi_1} + \phi_1 \frac{\partial}{\partial \phi_2}, \\
G_4 &= -\phi_2 x \frac{\partial}{\partial \phi_1} + \phi_1 x \frac{\partial}{\partial \phi_2} + 2t \frac{\partial}{\partial x}.
\end{aligned} \tag{A.12}$$

Elementos da álgebra de Lie:

Álgebra de Lie da ESNL				
$[G_i, G_j]$	$G_1$	$G_2$	$G_3$	$G_4$
$G_1$	0	0	0	$2G_2$
$G_2$	0	0	0	$G_3$
$G_3$	0	0	0	0
$G_4$	$-2G_2$	$-G_3$	0	0

CASO6:  $a_0 = 0, a_1 \neq 0, a_2 = 0$ . Geradores de Simetria:

$$\begin{aligned}
G_1 &= \frac{\partial}{\partial t}, \\
G_2 &= \frac{\partial}{\partial x}, \\
G_3 &= -\phi_2 \frac{\partial}{\partial \phi_1} + \phi_1 \frac{\partial}{\partial \phi_2}, \\
G_4 &= -\phi_2 x \frac{\partial}{\partial \phi_1} + \phi_1 x \frac{\partial}{\partial \phi_2} + 2t \frac{\partial}{\partial x}, \\
G_5 &= -\phi_1 \frac{\partial}{\partial \phi_1} - \phi_2 \frac{\partial}{\partial \phi_2} + 2t \frac{\partial}{\partial t} + x \frac{\partial}{\partial x}.
\end{aligned} \tag{A.13}$$

Elementos da álgebra Lie:

Álgebra de Lie da ESNL					
$[G_i, G_j]$	$G_1$	$G_2$	$G_3$	$G_4$	$G_5$
$G_1$	0	0	0	$2G_2$	$2G_1$
$G_2$	0	0	0	$G_3$	$G_2$
$G_3$	0	0	0	0	0
$G_4$	$-2G_2$	$-G_3$	0	0	$-G_4$
$G_5$	$-2G_1$	$-G_2$	0	$G_4$	0

CASO7:  $a_0 = 0, a_1 = 0, a_2 \neq 0$ . Geradores de simetria:

$$\begin{aligned}
G_1 &= \frac{\partial}{\partial t}, \\
G_2 &= \frac{\partial}{\partial x}, \\
G_3 &= -\phi_2 \frac{\partial}{\partial \phi_1} + \phi_1 \frac{\partial}{\partial \phi_2}, \\
G_4 &= -\phi_2 x \frac{\partial}{\partial \phi_1} + \phi_1 x \frac{\partial}{\partial \phi_2} - 2t \frac{\partial}{\partial x}, \\
G_5 &= -\frac{1}{2} \phi_1 \frac{\partial}{\partial \phi_1} + \frac{1}{2} \phi_2 t \frac{\partial}{\partial \phi_2} + 2t \frac{\partial}{\partial t} + x \frac{\partial}{\partial x}, \\
G_6 &= \left( -\phi_1 t - \frac{1}{2} \phi_2 x^2 \right) \frac{\partial}{\partial \phi_1} + \left( \frac{1}{2} \phi_1 x^2 - \phi_2 t \right) \frac{\partial}{\partial \phi_2} + 2t^2 \frac{\partial}{\partial t} + 2xt \frac{\partial}{\partial x}. \tag{A.14}
\end{aligned}$$

Elementos da álgebra Lie:

Álgebra de Lie da ESNL						
$[G_i, G_j]$	$G_1$	$G_2$	$G_3$	$G_4$	$G_5$	$G_6$
$G_1$	0	0	0	$2G_2$	$2G_1$	$2G_5$
$G_2$	0	0	0	$G_3$	$G_2$	$G_4$
$G_3$	0	0	0	0	0	0
$G_4$	$-2G_2$	$-G_3$	0	0	$-G_4$	0
$G_5$	$-2G_1$	$-G_2$	0	$G_4$	0	$2G_6$
$G_6$	$-2G_5$	$-G_4$	0	0	$-2G_6$	0

Temos dois casos de simetria não-clássica  $\theta_1 = 0$  e  $\theta_1 = 1$  para serem estudados. Vamos considerar inicialmente o segundo caso:

$$G = \eta_1 \frac{\partial}{\partial \phi_1} + \eta_2 \frac{\partial}{\partial \phi_2} + \frac{\partial}{\partial t} + \theta_2 \frac{\partial}{\partial x}. \tag{A.15}$$

A condição de superfície invariante,  $Q_i = 0$  se escreve como:

$$\frac{\partial \phi_1}{\partial t} = \eta_1 - \theta_2 \frac{\partial \phi_1}{\partial x}, \tag{A.16}$$

$$\frac{\partial \phi_2}{\partial t} = \eta_2 - \theta_2 \frac{\partial \phi_2}{\partial x}, \tag{A.17}$$

e o gerador de infinitesimal de simetria prolongado como:

$$G^{(2)} = \frac{\partial}{\partial t} + \theta_2 \frac{\partial}{\partial x} + \eta_1 \frac{\partial}{\partial \phi_1} + \eta_2 \frac{\partial}{\partial \phi_2} + \eta_2^x \frac{\partial}{\partial \phi_{2x}} + \eta_1^x \frac{\partial}{\partial \phi_{1x}} + \eta_2^t \frac{\partial}{\partial \phi_{2t}} + \eta_1^t \frac{\partial}{\partial \phi_{1t}} + \eta_2^{xx} \frac{\partial}{\partial \phi_{2xx}} + \eta_1^{xx} \frac{\partial}{\partial \phi_{1xx}}. \quad (\text{A.18})$$

A condição de simetria linearizada para a simetria não-clássica é

$$G^{(2)}A = 0, \\ -2\eta_2 a_1 \phi_1 \phi_2 - 4\eta_2 a_2 \phi_1^3 \phi_2 - 4\eta_2 a_2 \phi_1 \phi_2^3 - \eta_1 a_0 - 3\eta_1 a_1 \phi_1 \phi_2^2 \\ -2\eta_1 a_1 \phi_1 \phi_2 - 5\eta_1 a_2 \phi_1^4 - 6\eta_1 a_2 \phi_1^2 \phi_2^2 - \eta_1 a_2 \phi_1 \phi_2^4 - \eta_2^t + \eta_1^{xx} = 0 \quad (\text{A.19})$$

$$G^{(2)}B = 0, \\ -\eta_2 a_0 - \eta_2 a_1 \phi_1^2 - 3\eta_2 a_1 \phi_2^2 - \eta_2 a_2 \phi_1^4 - 6\eta_2 a_2 \phi_1 \phi_2^2 - 5\eta_2 a_2 \phi_2^4 - 2\eta_1 \phi_1 \phi_2 \\ -4\eta_1 a_2 \phi_1^3 \phi_2 - 4\eta_1 a_2 \phi_1 \phi_2^3 - \eta_1^t + \eta_2^{xx} = 0, \quad (\text{A.20})$$

Substituindo (A.16) e (A.17) nas equações determinantes para eliminar as derivadas temporais. Isolando  $\phi_{xx}$  e  $\phi_{2xx}$  na equação (A.7) e substituindo nos respectivos termos  $\phi_{1xx}$  e  $\phi_{2xx}$  das equações (A.19) e (A.20). Obtemos duas equações que dependem de  $\phi_{1x}$  e  $\phi_{2x}$ . Igualando a zero os coeficientes das potências de  $\phi_{1x}$  e  $\phi_{2x}$  obtemos um conjunto de 15 equações:

$$\frac{\partial^2 \theta_2}{\partial \phi_1^2} = 0, \quad (\text{A.21})$$

$$\frac{\partial^2 \theta_2}{\partial \phi_2 \partial \phi_1} = 0, \quad (\text{A.22})$$

$$\frac{\partial^2 \theta_2}{\partial \phi_2^2} = 0, \quad (\text{A.23})$$

$$\theta_2 \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_2} + \frac{\partial^2 \eta_1}{\partial \phi_2^2} = 0, \quad (\text{A.24})$$

$$\frac{\partial^2 \eta_2}{\partial \phi_1^2} - \theta_2 \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_1} = 0, \quad (\text{A.25})$$

$$\theta_2 \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_1} + \frac{\partial^2 \eta_2}{\partial \phi_2^2} - 2 \frac{\partial^2 \theta_2}{\partial x \partial \phi_2} = 0, \quad (\text{A.26})$$

$$\theta_2 \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_1} - \frac{\partial^2 \theta_2}{\partial x \partial \phi_2} + \frac{\partial^2 \eta_1}{\partial \phi_2 \partial \phi_1} = 0, \quad (\text{A.27})$$

$$\frac{\partial^2 \eta_2}{\partial \phi_2 \partial \phi_1} - \frac{\partial^2 \theta_2}{\partial x \partial \phi_1} - \theta_2 \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_2} = 0, \quad (\text{A.28})$$

$$-2 \frac{\partial^2 \theta_2}{\partial x \partial \phi_1} - \theta_2 \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_2} + \frac{\partial^2 \eta_1}{\partial \phi_1^2} = 0, \quad (\text{A.29})$$

$$\begin{aligned} & -\theta_2 \frac{\partial \theta_2}{\partial x} + \frac{\partial \theta_2}{\partial t} + \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_1} \right) \eta_1 - \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_2} \right) \eta_2 + \theta_2 \frac{\partial \eta_2}{\partial \phi_2} - \theta_2 \frac{\partial \eta_1}{\partial \phi_1} - 4 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_2} \right) a_2 \phi_1^3 \phi_2^2 \\ & - 2 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_2} \right) a_2 \phi_1 \phi_2^4 - 2 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_2} \right) a_1 \phi_1 \phi_2^2 + 2 \frac{\partial^2 \eta_2}{\partial x \partial \phi_1} - 2 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_2} \right) a_0 \phi_1 \\ & - 2 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_2} \right) a_2 \phi_1^5 - 2 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_2} \right) a_1 \phi_1^3 = 0, \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

$$\begin{aligned} & 2 \frac{\partial^2 \eta_2}{\partial x \partial \phi_1} - \theta_2 \frac{\partial \eta_1}{\partial \phi_1} + \theta_2 \frac{\partial \eta_2}{\partial \phi_2} + \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_1} \right) \eta_1 - \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_2} \right) \eta_2 - \frac{\partial \theta_2}{\partial t} - 2 \theta_2 \frac{\partial \theta_2}{\partial x} \\ & - 4 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_1} \right) a_2 \phi_1^2 \phi_2^3 - 2 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_1} \right) a_1 \phi_1^2 \phi_2 - 2 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_1} \right) a_2 \phi_1^4 \phi_2 - 2 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_1} \right) a_2 \phi_2^5 \\ & - 2 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_1} \right) a_0 \phi_2 - 2 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_1} \right) a_1 \phi_2^3 = 0, \end{aligned} \quad (\text{A.31})$$

$$\begin{aligned} & 2 \frac{\partial^2 \eta_1}{\partial x \partial \phi_1} - \frac{\partial^2 \theta_2}{\partial x^2} - 3 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_1} \right) a_2 \phi_1 \phi_2^4 - 6 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_1} \right) a_2 \phi_1^3 \phi_2^2 \\ & - 2 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_2} \right) a_2 \phi_1^2 \phi_2^3 - \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_2} \right) a_2 \phi_1^4 \phi_2 - 3 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_1} \right) a_1 \phi_1 \phi_2^2 - \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_2} \right) a_1 \phi_1^2 \phi_2 \\ & - 3 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_1} \right) a_0 \phi_1 - 3 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_1} \right) a_2 \phi_1^5 - \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_2} \right) a_2 \phi_2^5 - \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_2} \right) a_0 \phi_2 - 3 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_1} \right) a_1 \phi_1^3 \\ & - \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_2} \right) a_1 \phi_2^3 + \theta_2 \frac{\partial \eta_1}{\partial \phi_2} + \theta_2 \frac{\partial \eta_2}{\partial \phi_1} - 3 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_1} \right) \eta_2 + \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_2} \right) \eta_1 = 0, \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

$$\begin{aligned}
& 2 \frac{\partial^2 \eta_2}{\partial x \partial \phi_2} - \frac{\partial^2 \theta_2}{\partial x^2} - \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_1} \right) a_2 \phi_1 \phi_2^4 - 2 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_1} \right) a_2 \phi_1^3 \phi_2^2 - 6 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_2} \right) a_2 \phi_1^2 \phi_2^3 - \\
& 3 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_2} \right) a_2 \phi_1^4 \phi_2 - \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_1} \right) a_1 \phi_1 \phi_2^2 - 3 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_2} \right) a_1 \phi_1^2 \phi_2 - \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_1} \right) a_0 \phi_1 \\
& - \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_1} \right) a_2 \phi_1^5 - 3 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_2} \right) a_2 \phi_2^5 - 3 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_2} \right) a_0 \phi_2 - \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_1} \right) a_1 \phi_1^3 \\
& - 3 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_2} \right) a_1 \phi_2^3 - \theta_2 \frac{\partial \eta_1}{\partial \phi_2} - \theta_2 \frac{\partial \eta_2}{\partial \phi_1} - \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial \phi_1} \right) \eta_2 + 3 \left( \frac{\partial \eta_1}{\partial \phi_2} \right) = 0, \tag{A.33}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -4a_2 \phi_1 \phi_2^3 \eta_1 - 6a_2 \phi_1^2 \phi_2^2 \eta_2 - 4a_2 \phi_1^3 \phi_2 \eta_1 - 5a_2 \phi_2^4 \eta_2 - a_2 \phi_1^4 \eta_2 - a_0 \eta_2 + \frac{\partial^2 \eta_2}{\partial x^2} - 2a_1 \phi_1 \phi_2 \eta_1 \\
& - 3a_1 \phi_2^2 \eta_2 - a_1 \phi_1^2 \eta_2 + \left( \frac{\partial \eta_2}{\partial \phi_1} \right) a_2 \phi_1 \phi_2^4 + 2 \left( \frac{\partial \eta_2}{\partial \phi_1} \right) a_2 \phi_1^3 \phi_2^2 + 2 \left( \frac{\partial \eta_2}{\partial \phi_2} \right) a_2 \phi_1^2 \phi_2^3 + \\
& \left( \frac{\partial \eta_2}{\partial \phi_2} \right) a_2 \phi_1^4 \phi_2 + \left( \frac{\partial \eta_2}{\partial \phi_1} \right) a_1 \phi_1 \phi_2^2 + \left( \frac{\partial \eta_2}{\partial \phi_2} \right) a_1 \phi_1^2 \phi_2 - 4 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial x} \right) a_2 \phi_1^2 \phi_2^3 \\
& - 2 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial x} \right) a_2 \phi_1^4 \phi_2 - 2 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial x} \right) a_1 \phi_1^2 \phi_2 + \left( \frac{\partial \eta_2}{\partial \phi_1} \right) a_0 \phi_1 + \left( \frac{\partial \eta_2}{\partial \phi_1} \right) a_2 \phi_1^5 + \left( \frac{\partial \eta_2}{\partial \phi_2} \right) a_2 \phi_2^5 \\
& + \left( \frac{\partial \eta_2}{\partial \phi_2} \right) a_0 \phi_2 - 2 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial x} \right) a_2 \phi_2^5 - 2 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial x} \right) a_0 \phi_2 - 2 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial x} \right) a_1 \phi_2^3 + \left( \frac{\partial \eta_2}{\partial \phi_1} \right) a_1 \phi_1^3 + \\
& \left( \frac{\partial \eta_2}{\partial \phi_2} \right) a_1 \phi_2^3 + \left( \frac{\partial \eta_1}{\partial \phi_1} \right) + \left( \frac{\partial \eta_1}{\partial \phi_2} \right) \eta_2 - \left( \frac{\partial \eta_2}{\partial \phi_2} \right) \eta_1 + \\
& + 2 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial x} \right) \eta_1 + \left( \frac{\partial \eta_2}{\partial \phi_1} \right) \eta_2 + \frac{\partial \eta_1}{\partial t} = 0, \tag{A.34}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& 2 \left( \frac{\partial \eta_1}{\partial x} \theta_2 \right) - \left( \frac{\partial \eta_2}{\partial \phi_2} \right) \eta_1 + \left( \frac{\partial \eta_1}{\partial \phi_1} \right) + \left( \frac{\partial \eta_1}{\partial \phi_2} \right) \eta_2 - 4a_2 \phi_1 \phi_2^3 \eta_1 \\
& - 6a_2 \phi_1^2 \phi_2^2 \eta_2 - 4a_2 \phi_1^3 \phi_2 \eta_1 - a_2 \phi_1^4 \eta_2 - 5a_2 \phi_2^4 \eta_2 - a_0 \eta_2 \\
& + \left( \frac{\partial \eta_2}{\partial \phi_1} \right) \eta_2 + \frac{\partial^2 \eta_2}{\partial x^2} + \left( \frac{\partial \eta_2}{\partial \phi_1} \right) a_2 \phi_1 \phi_2^4 + 2 \left( \frac{\partial \eta_2}{\partial \phi_1} \right) a_2 \phi_1^3 \phi_2^2 \\
& + 2 \left( \frac{\partial \eta_2}{\partial \phi_2} \right) a_2 \phi_1^2 \phi_2^3 + \left( \frac{\partial \eta_2}{\partial \phi_2} \right) a_2 \phi_1^4 \phi_2 + \left( \frac{\partial \eta_2}{\partial \phi_1} \right) a_1 \phi_1 \phi_2^2 \\
& + \left( \frac{\partial \eta_2}{\partial \phi_2} \right) a_1 \phi_1^2 \phi_2 - 4 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial x} \right) a_2 \phi_1^2 \phi_2^3 - 2 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial x} \right) a_2 \phi_1^4 \phi_2 \\
& - 2 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial x} \right) a_1 \phi_1^2 \phi_2 + \left( \frac{\partial \eta_2}{\partial \phi_2} \right) a_0 \phi_2 + \left( \frac{\partial \eta_2}{\partial \phi_1} \right) a_1 \phi_1^3 \\
& + \left( \frac{\partial \eta_2}{\partial \phi_2} \right) a_1 \phi_2^3 - 2 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial x} \right) a_2 \phi_2^5 - 2 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial x} \right) a_0 \phi_2 \\
& - 2 \left( \frac{\partial \theta_2}{\partial x} \right) a_1 \phi_2^3 + \left( \frac{\partial \eta_2}{\partial \phi_1} \right) a_0 \phi_1 + \left( \frac{\partial \eta_2}{\partial \phi_1} \right) a_2 \phi_1^5 \\
& + \left( \frac{\partial \eta_2}{\partial \phi_2} \right) a_2 \phi_2^5 + \frac{\partial \eta_1}{\partial t} - 2a_1 \phi_1 \phi_2 \eta_1 - a_1 \phi_1^2 \eta_2 - 3a_1 \phi_2^2 \eta_2 = 0. \tag{A.35}
\end{aligned}$$

Começamos resolvendo as treze primeiras equações. Tais equações podem ser reduzidas a forma involutiva(triangularizada) com o auxílio de computação algébrica. Como o sistema é não-linear, obtemos por essa decomposição três casos(ramos). No primeiro caso, após algumas manipulações obtemos que

$$\begin{aligned}
\eta_1(x, t, \phi_1, \phi_2) &= f_1(x, t) \phi_1 + f_2(x, t) \phi_1 + f_3(x, t), \\
\eta_2(x, t, \phi_1, \phi_2) &= f_4(x, t) \phi_1 + f_5(x, t) \phi_1 + f_6(x, t), \\
\theta_2(x, t, \phi_1, \phi_2) &= f_7(x, t). \tag{A.36}
\end{aligned}$$

com  $f_i$ ,  $i = 1, \dots, 7$  satisfazendo:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f_1}{\partial x} + \frac{1}{2} f_7 f_2 + \frac{1}{2} f_7 f_4 - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f_7}{\partial x^2} &= 0, \\
\frac{\partial f_5}{\partial x} - \frac{1}{2} f_7 f_2 - \frac{1}{2} f_7 f_4 - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f_7}{\partial x^2} &= 0, \\
\frac{\partial f_2}{\partial x} + \frac{1}{2} f_7 f_5 - \frac{1}{2} f_7 f_1 + \left( \frac{\partial f_7}{\partial x} \right) f_7 + \frac{1}{2} \frac{\partial f_7}{\partial t} &= 0, \\
\frac{\partial f_4}{\partial x} - \frac{1}{2} f_7 f_1 + \frac{1}{2} f_7 f_5 - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial t} f_7 - \left( \frac{\partial f_7}{\partial x} \right) f_7 &= 0. \tag{A.37}
\end{aligned}$$

Substituímos também  $\eta_1$ ,  $\eta_2$  e  $\theta_2$  nas duas equações restantes e e igualando a zero os coeficientes

de potências  $\phi_1$  e  $\phi_2$ . Obtemos 27 equações:

$$3a_1f_3 = 0, \quad (\text{A.38})$$

$$2a_1f_3 = 0, \quad (\text{A.39})$$

$$a_1f_3 = 0, \quad (\text{A.40})$$

$$3a_1f_6 = 0, \quad (\text{A.41})$$

$$2a_1f_6 = 0, \quad (\text{A.42})$$

$$a_1f_6 = 0, \quad (\text{A.43})$$

$$6a_2f_3 = 0, \quad (\text{A.44})$$

$$5a_2f_3 = 0, \quad (\text{A.45})$$

$$4a_2f_3 = 0, \quad (\text{A.46})$$

$$a_2f_3 = 0, \quad (\text{A.47})$$

$$6a_2f_6 = 0, \quad (\text{A.48})$$

$$5a_2f_6 = 0, \quad (\text{A.49})$$

$$4a_2f_6 = 0, \quad (\text{A.50})$$

$$a_2f_6 = 0, \quad (\text{A.51})$$

$$2a_1f_1 + 2 \left( \frac{\partial f_7}{\partial x} \right) a_1 = 0, \quad (\text{A.52})$$

$$2a_1f_2 + 2f_4a_1 = 0; \quad (\text{A.53})$$

$$4a_2f_1 + 2 \left( \frac{\partial f_7}{\partial x} \right) a_2 = 0, \quad (\text{A.54})$$

$$4f_4a_2 + 4a_2f_2 = 0, \quad (\text{A.55})$$

$$2f_5a_1 + 2 \left( \frac{\partial f_7}{\partial x} \right) a_1 = 0, \quad (\text{A.56})$$

$$4f_5a_2 + 2 \left( \frac{\partial f_7}{\partial x} \right) a_2 = 0, \quad (\text{A.57})$$

$$4f_5a_2 + 4 \left( \frac{\partial f_7}{\partial x} \right) a_2 + 4a_2f_1 = 0, \quad (\text{A.58})$$

$$-f_1f_2 - f_4f_5 - 2 \left( \frac{\partial f_7}{\partial x} \right) a_0 - \frac{\partial f_4}{\partial t} - 2 \left( \frac{\partial f_7}{\partial x} \right) f_4 + \frac{\partial^2 f_1}{\partial x^2} = 0, \quad (\text{A.59})$$

$$f_4f_5 + \frac{\partial f_2}{\partial t} - 2 \left( \frac{\partial f_7}{\partial x} \right) a_0 + 2 \left( \frac{\partial f_7}{\partial x} \right) f_2 + f_1f_2 + \frac{\partial^2 f_5}{\partial x^2} = 0, \quad (\text{A.60})$$

$$-\frac{\partial f_5}{\partial t} - f_2f_4 - (f_2)^2 + f_5f_1 - 2 \left( \frac{\partial f_7}{\partial x} \right) f_5 - (f_5)^2 + \frac{\partial^2 f_2}{\partial x^2} = 0, \quad (\text{A.61})$$

$$\frac{\partial^2 f_4}{\partial x^2} + (f_1)^2 + f_2f_4 + (f_4)^2 - f_5f_1 + \frac{\partial f_1}{\partial t} + 2 \left( \frac{\partial f_7}{\partial x} \right) f_1 = 0, \quad (\text{A.62})$$

$$-a_0f_3 - f_5f_6 - \frac{\partial f_6}{\partial t} + \frac{\partial^2 f_3}{\partial x^2} - 2 \left( \frac{\partial f_7}{\partial x} \right) f_6 - f_2f_3 - f_4f_3 + f_1f_6 = 0, \quad (\text{A.63})$$

$$f_4f_6 + f_1f_3 + f_2f_6 - f_5f_3 + \frac{\partial^2 f_6}{\partial x^2} f_6 + 2 \left( \frac{\partial f_7}{\partial x} \right) f_3 - a_0f_6 + \frac{\partial f_3}{\partial t} = 0. \quad (\text{A.64})$$

Algumas dessas equações são trivialmente solúveis e nos dão  $f_3 = 0$ ,  $f_6 = 0$  e  $f_4 = -f_2$ .

Normalmente reduzindo à forma involutiva obtemos 6 ramos possíveis. O primeiro é dado pelas equações  $a_1 = 0$ :

$$\frac{\partial^2 f_5}{\partial t^2} = 12f_5 \frac{\partial f_5}{\partial t} - 16f_5^3 \quad (\text{A.65})$$

$$\frac{\partial^2 f_2}{\partial t^2} = -4f_5^2 + \frac{\partial f_5}{\partial t} \quad (\text{A.66})$$

$$\frac{\partial f_7}{\partial t} = -2 \frac{\partial f_2}{\partial x} + 4f_7 f_5 \quad (\text{A.67})$$

$$\frac{\partial f_2}{\partial t} = 4f_5 f_2 - 4a_0 f_5 \quad (\text{A.68})$$

$$\frac{\partial f_7}{\partial x} = -2f_5 \quad (\text{A.69})$$

$$\frac{\partial f_5}{\partial x} = 0 \quad (\text{A.70})$$

$$f_5 = f_1 \quad (\text{A.71})$$

com solução:

$$f_1(x, t) = f_5(x, t) = \frac{(-c_1 t - c_2)}{(2c_1 t^2 + 4c_2 t + 4)}, \quad (\text{A.72})$$

$$f_2(x, t) = \frac{(4a_0 c_1 t^2 + 8a_0 c_2 t - c_1 x^2 + 4c_3 x + 4c_4)}{(4c_1 t^2 + 8c_2 t + 8)}, \quad (\text{A.73})$$

$$f_7(x, t) = ((c_1 x - 2c_3)t + xc_2 + c_5)(c_1 t^2 + 2c_2 t + 2), \quad (\text{A.74})$$

$$f_4(x, t) = -f_2(x, t), \quad (\text{A.75})$$

$$f_3(x, t) = f_6(x, t) = 0. \quad (\text{A.76})$$

$$(\text{A.77})$$

O gerador de simetria é então escrito na forma:

$$\begin{aligned} G = & \left( \frac{(-c_1 t - c_2) \phi_1}{2c_1 t^2 + 4c_2 t + 4} + \frac{(4a_0 c_1 t^2 + 8a_0 c_2 t - c_1 x^2 + 4c_3 x + 4c_4) \phi_2}{4c_1 t^2 + 8c_2 t + 8} \right) \frac{\partial}{\partial \phi_1} \\ & + \left( -\frac{(4a_0 c_1 t^2 + 8a_0 c_2 t - c_1 x^2 + 4c_3 x + 4c_4) \phi_1}{4c_1 t^2 + 8c_2 t + 8} + \frac{(-c_1 t - c_2) \phi_2}{2c_1 t^2 + 4c_2 t + 4} \right) \frac{\partial}{\partial \phi_2} + \frac{\partial}{\partial t} \\ & + \left( \frac{((c_1 x - 2c_3)t + xc_2 + c_5)}{c_1 t^2 + 2c_2 t + 2} \right) \frac{\partial}{\partial x} \end{aligned} \quad (\text{A.78})$$

onde os  $c_i$ 's são constantes arbitrárias. É possível mostrar que o gerador obtido é uma combinação de simetrias de Lie, o mesmo acontecendo com os demais cinco ramos. Como exemplo de como obter uma solução invariante, tomando  $c_1 = c_2 = c_3 = c_4 = 0$  no gerador acima obtemos o seguinte gerador

$$G = \frac{\partial}{\partial t} + \frac{c_5}{2} \frac{\partial}{\partial x}, \quad (\text{A.79})$$

que satisfaz  $G = G_1 + \frac{c_5}{2} G_2$ .

As equações características são,

$$\frac{dt}{1} = \frac{dx}{c_5/2} \quad (\text{A.80})$$

cuja solução é

$$\phi_1(x, t) = F_1 \left( \frac{-2x + tc_5}{c_5} \right) \quad \text{e} \quad \phi_2(x, t) = F_2 \left( \frac{-2x + tc_5}{c_5} \right). \quad (\text{A.81})$$

Substituindo (A.81) na parte real e imaginária de (A.7) obtemos:

$$\begin{aligned} A &= - \left( \frac{d}{d\xi_1} F_2(\xi_1) \right) c_5^2 + 4 \frac{d^2}{d\xi_1^2} F_1(\xi_1) - a_0 F_1(\xi_1) c_5^2 - a_2 (F_1(\xi_1))^5 c_5^2 \\ &\quad - 2a_2 (F_1(\xi_1))^3 (F_2(\xi_1))^2 c_5^2 - a_2 F_1(\xi_1) (F_2(\xi_1))^4 c_5^2 = 0, \\ B &= -2a_2 (F_1(\xi_1))^2 (F_2(\xi_1))^3 c_5^2 + \left( \frac{d}{d\xi_1} F_1(\xi_1) \right) c_5^2 - a_0 F_2(\xi_1) c_5^2 \\ &\quad - a_2 (F_1(\xi_1))^4 F_2(\xi_1) c_5^2 + 4 \frac{d^2}{d\xi_1^2} F_2(\xi_1) - a_2 (F_2(\xi_1))^5 c_5^2 = 0. \end{aligned} \quad (\text{A.82})$$

Para esse sistema não foi possível encontrar uma solução fechada. No entanto, uma solução particular permitiria obter uma solução da equação original (A.7). Essa equação admite o gerador de simetria( obtitido utilizando o pacote SADE [73]):

$$G = \left( \frac{-1}{2} F_1 + \frac{1}{8} F_2 c_5^2 \xi_1 \right) D_{F_1} + \left( \frac{-1}{8} c_5^2 F_1 \xi_1 - \frac{1}{2} F_2 \right) D_{F_2} + \xi_1 D_{\xi_1} \quad (\text{A.83})$$

que é um gerador de simetria de Lie de (A.82) se

$$a_0 = \frac{1}{16} c_5^2. \quad (\text{A.84})$$

A solução invariante de (A.82) correspondendo a (A.83) é:

$$\begin{aligned} F_1(\xi_1) &= \frac{c_1 \sin\left(\frac{1}{8} c_5^2 \xi_1\right) + c_2 \cos\left(\frac{1}{8} c_5^2 \xi_1\right)}{\sqrt{\xi_1}}, \\ F_2(\xi_1) &= -\frac{-c_1 \cos\left(\frac{1}{8} c_5^2 \xi_1\right) + c_2 \sin\left(\frac{1}{8} c_5^2 \xi_1\right)}{\sqrt{\xi_1}}. \end{aligned} \quad (\text{A.85})$$

Substituindo (A.85) na ESNL obtemos

$$\begin{aligned} \frac{(a_2 c_5^2 c_1^4 - 3 + a_2 c_5^2 c_2^4 + 2a_2 c_5^2 c_2^2 c_1^2)(-c_1 \cos(\frac{1}{8} c_5^2 \xi_1) + c_2 \sin(\frac{1}{8} c_5^2 \xi_1))}{\xi_1^{5/2}} &= 0, \\ \frac{(a_2 c_5^2 c_1^4 - 3 + a_2 c_5^2 c_2^4 + 2a_2 c_5^2 c_2^2 c_1^2)(c_1 \sin(\frac{1}{8} c_5^2 \xi_1) + c_2 \cos(\frac{1}{8} c_5^2 \xi_1))}{\xi_1^{5/2}} &= 0. \end{aligned} \quad (\text{A.86})$$

Igualando a zeros coeficientes de  $F_1$  e  $F_2$  em (A.86), obtemos

$$c_1 = \sqrt{\frac{-c_2^2 c_5 \sqrt{a_2} + \sqrt{3}}{c_5 \sqrt{a_2}}}. \quad (\text{A.87})$$

Substituindo (A.84) e (A.87) em (A.85) obtemos, a solução da ESNL,

$$\begin{aligned}
\phi_1(x, t) &= \frac{\sqrt{4}}{\sqrt{\frac{-2x + 4t\sqrt{a_0}}{\sqrt{a_0}}}} \left( \left( \frac{1}{4} \sqrt{4} \sqrt{\frac{-4c_2^2 \sqrt{a_0} \sqrt{a_2} + \sqrt{3}}{\sqrt{a_0} \sqrt{a_2}}} \right) \right. \\
&\times \sin \left( \frac{1}{2} \sqrt{a_0} (-2x + 4t\sqrt{a_0}) \right) + c_2 \cos \left( \frac{1}{2} \sqrt{a_0} (-2x + 4t\sqrt{a_0}) \right) \left. \right) \\
\phi_2(x, t) &= -\frac{\sqrt{4}}{\sqrt{\frac{-2x + 4t\sqrt{a_0}}{\sqrt{a_0}}}} \left( \frac{-1}{4} \sqrt{4} \sqrt{\frac{-4c_2^2 \sqrt{a_0} \sqrt{a_2} + \sqrt{3}}{\sqrt{a_0} \sqrt{a_2}}} \right. \\
&\times \cos \left( \frac{1}{2} \sqrt{a_0} (-2x + 4t\sqrt{a_0}) \right) + C_2 \sin \left( \frac{1}{2} \sqrt{a_0} (-2x + 4t\sqrt{a_0}) \right) \left. \right). \tag{A.88}
\end{aligned}$$

Assim a função de onda é dada por,

$$\begin{aligned}
\psi(x, t) &= \frac{\sqrt{4}}{\sqrt{\frac{-2x + 4t\sqrt{a_0}}{\sqrt{a_0}}}} \left( \left( \frac{1}{4} \sqrt{4} \sqrt{\frac{-4c_2^2 \sqrt{a_0} \sqrt{a_2} + \sqrt{3}}{\sqrt{a_0} \sqrt{a_2}}} \right) \right. \\
&\times \sin \left( \frac{1}{2} \sqrt{a_0} (-2x + 4t\sqrt{a_0}) \right) + c_2 \cos \left( \frac{1}{2} \sqrt{a_0} (-2x + 4t\sqrt{a_0}) \right) \left. \right) \\
&\quad -i \frac{\sqrt{4}}{\sqrt{\frac{-2x + 4t\sqrt{a_0}}{\sqrt{a_0}}}} \left( \frac{-1}{4} \sqrt{4} \sqrt{\frac{-4c_2^2 \sqrt{a_0} \sqrt{a_2} + \sqrt{3}}{\sqrt{a_0} \sqrt{a_2}}} \right. \\
&\times \cos \left( \frac{1}{2} \sqrt{a_0} (-2x + 4t\sqrt{a_0}) \right) + C_2 \sin \left( \frac{1}{2} \sqrt{a_0} (-2x + 4t\sqrt{a_0}) \right) \left. \right), \tag{A.89}
\end{aligned}$$

que é a solução da equação de Schrödinger não-linear.

## Apêndice B

# Programa Produto-Estrela

Este programa é útil para o cálculo da função de Wigner. Para calcular a função de wigner entramos com a amplitude obtida a partir de uma equação no espaço de fase e colocamos a ordem que desejamos obter a função de Wigner. Esse foi o procedimento que utilizamos para obter os resultados desta tese [122].

```

                                st := proc(f)
returnsimplify(diff(diff(f;q);p0) - diff(diff(f;p);q0));end :
                                stn := proc(f;n)local y; i;
                                    y := f;
                                    if n <> 0 then
                                        for i from 1 to n do
                                            y := st(y);
                                            enddo;
                                            enddo;
                                            return y;
                                        else
                                            return f;
                                        endif;
                                    end :
                                star := proc(f,g,N)local h; s; n;
                                    h := f(q,p) * g(q0,p0);
                                    s := 0;
                                    for n from 0 to N do
                                        s := simplify(s + 1 = n! * (I = 2) * *n * stn(h; n));
                                        enddo;
                                    returns;
                                    end :
```

# Referências Bibliográficas

- [1] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics* (Addison-Wesley Publishing Company, 1994).
- [2] F. L. C. Cohen-Tannodji, B. Diu, F. Laloe *Quantum Mechanics* . (Wiley, New York, 1997).
- [3] A.L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particles Systems*, (McGraw-Hill, N. York, 1971).
- [4] J. Rogel-Salazar, *Eur. J. Phys.*, **34**, 247, (2013).
- [5] Dalfovo F, Giorgini S, Pitaevskii L P and Stringari S, *Rev. Mod. Phys.*, **71**, 463, (1999).
- [6] B. M. Caradoc-Davies, *Vortex Dynamics in Bose-Einstein Condensates*, Phd thesis, University of Otago (July 2000).
- [7] C. J. Pethick, H. Smith, *Bose-Einstein Condensation in Dilute Gases*. 2. ed. (Cambridge/New York: Cambridge University Press, 2008).
- [8] J. T. Medonça, H. Terças *Physics of Ultra-Cold Matter: Atomic Clouds, Bose Einstein Condensates and Rydberg Plasmas* (New York: Springer, 2013).
- [9] L. D. Carr, C. W. Clark, and W.P. Reinhardt, *Phys. Rev. A*, **62**, 063610, (2000).
- [10] L.D. Carr, C.W. Clark, and W.P. Reinhardt, *Phys. Rev. A* **62**, 063611 (2000)
- [11] R. Vidimar, *Formulação Hidrodinâmica para a Equação de Schrödinger Não-Linear e Não-Local em Condensados de Bose-Einstein* (Dissertação de Mestrado, IF-UFRGS, Porto Alegre, 2017).
- [12] J. Kasprzak, M. Richard, S. Kundermann, A. Baas, P. Jeambrun, J. Keeling, F. Marchetti, M. Szymanska, R. Andre, J. L. Staehli, V. Savona, P. B. Littlewood, B. Deveaud, L. S. Dang, *Nature*, **443**, 409-414 (2006).
- [13] M. Andrews, C. Townsend, H. Miesner, D. Durfee, D. Kurn, and W. Ketterle, *Science*, **275**, 637 (1997).
- [14] S.N. Bose, *Z. Phys.* **26**, 178 (1924)
- [15] A. Einstein, *Sitzunsber. Preuss. Akad. Wiss. Phys. Math. K1* 22, 261 (1924); *ibid.* **23**, 3 (1925).
- [16] M.H. Anderson, J.R. Ensher, M.R. Matthewa, C. E. Wieman, E.A. Cornell, *Science* **269**, 198 (1995)

- [17] K. B. Davis, M. O. Mewes, M.R. Andrews, N.J. van Druten, D. S. Durfee, D. M. Kurn, W. Ketterle, Phys. Rev. Lett. **75**, 3969 (1995)
- [18] D. J. Frantzeskakis, J. Phys. A **43**, 213001 (2010)
- [19] E. A. Cornell and C.E. Wieman, Rev. Mod. Phys. **74**, 875, (2002)
- [20] W. Ketterle, Rev. Mod. Phys. **74** 1131, (2002).
- [21] E. P. Gross, . il Nuovo Cimento, **20**, 454 (1961).
- [22] L. P. Pitaevskii, Sov. Phys. JETP, **13**, 451 (1961).
- [23] A.F.R. de Toledo Piza *Mecânica Quântica* (Editora da Universidade de São Paulo, São Paulo, 2003).
- [24] D. Possa , F. Pereira, J. A. Nogueira, Rev. Bras. Ens. Fís **27**, 407-413 (2005).
- [25] A. E. Bernardini, Rev. Bras. Ens. Fís **25**, 407-413 (2003).
- [26] J. F. Gunion, L. F. Lee, Phys. Rev. D **12**, 3583-3588 (1975).
- [27] I. S. Aronson, L. Kramer Rev. Mod. Phys. **74**, 99-143 (2002).
- [28] C. Bender and T. T. Wu, Phys. Rev. Lett., **21**, 406, (1968).
- [29] C. Bender and T. T. Wu, Phys. Rev , **184**, 1231, (1969).
- [30] S. N. Biswas, K. Datta, R. P. Saxena, P. K. Srivastava, and V. S. Varma, J, Math. Phys, **14**, 1190, (1973).
- [31] A. O. Adelakun and A. D. Dele, Adv. Phys. Theor. Appl. **38**, 27 (2014).
- [32] J.Q. Liang and H. J.W. Müller-Kirsten, Anharmonic Oscillator Equations: Treatment Parallel to Mathieu Equation, quant-ph/0407235.
- [33] A. Voros, Ann. Inst. H. Poincaré, **29**, 211, (1983).
- [34] A. Voros, J. Phys. A, **27**, 4653, (1994).
- [35] W. Lay, J. Math. Phys , **38**, 639, (1997).
- [36] Q. Dong, G. Sun, M. A. Aoki, C. Chen and S. Dong, Modern Physics Letters A, **34**, 1950208, (2019).
- [37] A. Duval *Heun's Differential Equations*, edited by A. Ronveaux (Oxford University Press, London, 1995).
- [38] W. G. Penney, R. Schalapp, Phys. Rev. D , **41**, 194, (1932).
- [39] N A. Lemos, G. A. Monerat, E. V. Corrêa Silva, G. A. Oliveira Neto, L. G. Ferreira Filho , Phys. Rev. D , **75**, 161, (2007).
- [40] F. A. Bajay, *Órbitas Periódicas em Sistemas Caóticos* (PhD Thesis, Instituto de Física Gleb Wataghin, Universidade Estadual de Campinas, São Paulo, Brazil, 1996).

- [41] H. Higuchi, K. Takatsuka, Phys. Rev. E , **66**, 035203, (2002).
- [42] S .I. Chan, D. Stelman, and L. E. Thompson, The Journal of Chemical Physics, **41**, 2828, (1964).
- [43] M. Peskin, D. V. Schroeder *An Introduction to Quantum Field Theory* (Addison-Wesley Publishing Company, 1995).
- [44] F.C. Khanna, A.P.C. Malbouisson, J.M.C. Malbouisson, A.E.Santana, *Thermal quantum field theory: algebraic aspects and applications* (World Scientific, Singapore, 2009).
- [45] E. P. Wigner, Z. Phys. Chem. B19 **40**, 749 (1932).
- [46] M. Hillary, R. F. O’Connell, M. O. Scully, E. P. Wigner, Phys. Rep. **106**, 121 (1984).
- [47] E. P. Wigner, Ann. Math. **40**, 149 (1939).
- [48] Y. S. Kim, M. S. Noz, *Phase Space Picture on Quantum Mechanics-Group* (World Scientific, Londres, 1991).
- [49] T. Curtright, D. Fairlie, C. Zacos, Phys. Rev. D **58**, 25002 (1998).
- [50] V. V. Dodonov, Physica A **137**, 306 (1986).
- [51] V. V. Dodonov, V. I. Manko, O. V. Shakhmistova Phys. A **102**, 295 (1984).
- [52] V. V. Dodonov, L. A. de Souza, J. Phys. A: Math. Theor. **40**, 13955 (2007).
- [53] M. G. Raymer, Contemporary **38**, 343 (1997).
- [54] L. G. Lutterbach, L. Davidovich Phys. Rev. Lett. **78**, 2547 (1997).
- [55] R. Amorim, F. A. Farias, Phys. Rev. D **69**, 045013 (2004).
- [56] M. C. B. Fernandes, F. C. Khanna, M. G. R. Martins, A. E. Santana, J. D. M. Vianna, Physica A **389**, 3409-3419 (2010).
- [57] M. D. Oliveira, M. C. B. Fernandes, F. C. Khanna, A. E. Santana, J. M. D. Vianna, Ann. Phys. **361**, 492-510 (2004).
- [58] M. D. Oliveira, *Mecânica Quântica no Espaço de Fase* , (Dissertação de Mestrado, IF-UFBA, Salvador, 2002).
- [59] R. G. G. Amorim, *Geometria Não-Comutativa e Teoria de Campos Simplética*, (Tese de Doutorado, IF-UnB, Brasília, 2009)
- [60] R. G. G. Amorim, M. D. Oliveira, M. C. B. Fernandes, F. C. Khanna, A. E. Santana, Physics Letters A **361**, 464-471 (2007).
- [61] R.G.G. Amorim, F.C. Khanna, A. E. Santana, J.D.M. Vianna Physica A, **388** (2009) 3771
- [62] R. G. G. Amorim, F. C. Khanna, A. P. C. Malbouisson, J. M. C. Malbouisson, and A. E. Santana, “Quantum field theory in phase space,” Int. J. Mod. Phys. A **34**, 1950037 (2019).

- [63] R. G. G. Amorim, M. C. B. Fernandes, F. C. Khanna, A. E. Santana and J. D. M. Vianna, “Symplectic Schrödinger equation for many-body systems,” *Int. J. Mod. Phys. A* **35**, 2050033 (2020).
- [64] N.H.Ibragimov, *Lie group analysis: classical heritage*, ALGA Publications, (2004).
- [65] F. Schwarz, *SIAM Review* **30** (1988) 450
- [66] Bluman. G. W, Cole. J. D, *J. Math. Mech* **18**, 1025-1042, (1969).
- [67] R. Lhandle. Anderson and N. H. Ibagimov, *Lie-Backlund Transformations in Applications* SIAM (Philadelphia, 1979).
- [68] G. W. Bluman and S. Kumei, *Symmetries and Differential Equations* Springer (New York, 1989).
- [69] E. Noether, *Nachr. Akad. Wiss. Göttingen, Math.-Phys. K1.* (1918), 235.
- [70] M. C. Nucci and P. A. Clarkson, *Phys. Lett.* **A164**, 49-56 (1992).
- [71] W. Sinkala, *Mathematical Problems in Engineering*, 2020 (2020).
- [72] P. M. M. Rocha, F. C. Khanna , T. M. Rocha Filho, A. E. Santana, *Communications in Nonlinear Science e Numerical Simulation*, v. 26, p. 201-210, (2015).
- [73] T. M. Rocha Filho, Annibal Figueiredo, *Computer Physics Communications* **182**, 467-476 (2011).
- [74] E. S. Cheb-Terrab and K. von Bulow, *Comp. Phys. Comm.* **90**, 116 (1995).
- [75] K. T. Vu, J. Butcher and J. Carminati, *Comp. Phys. Comm.* **176**, 682 (2007).
- [76] J. Carminati and K. Vu, *J. Symbolic Comput.* **29**, 95 (2000).
- [77] A. F. Cheviakov, *Comp. Phys. Comm.* **176**, 48 (2007).
- [78] F. Schwarz, *SIAM Review* **30** (1988) 450.
- [79] T. Wolf and A. Brand, *The Computer Algebra Package CRACK, Users Manual* (2001).
- [80] T. Wolf, *Manual LIEPDE* (2001).
- [81] J. Sherring, A. K. Head and G. E. Prince, *Mathl. Comput. Modelling* 25 (1997) 153.
- [82] A. K. Head, *Program LIE for Lie Analysis of Differential Equations on IBM Type PCs, User's Manual* (2000).
- [83] A. K. Head, *Program BIGLIE for Lie Analysis of Differential Equations on IBM Type PCs, User's Manual* (2000).
- [84] G. Baumann, *Symmetry Analysis of Differential Equations with Mathematica*, Springer-Verlag (New York, 2000).
- [85] S. M. El-Sayed, D. Kaya, *Applied Mathematics and Computation* **62**, 1315-1322 (2006).

- [86] E. M. E Zayed, H. A. Zedan, Chaos Soliton and Fractals **16**, 133-145 (2003).
- [87] W. Bao, D. Jaksch, P. A. Markowich, J. Comput. Phys. **187**, 318-342 (2003).
- [88] M. E. Khalifa, M. Elgamal, Applied Mathematics and Computation **160**, 451-475 (2005).
- [89] L. Gagnon, P. Winternitz, J. Phys. A: Math. Gen. **22**, 469 (1989).
- [90] W. I. Fushchich, S. S. Moskaliuk, Lettere Al Nuovo Cimento **31**, 571-576 (1981).
- [91] L. Gagnon, P. Winternitz, J. Phys. A: Math. Gen **21**, 1493 (1988).
- [92] L. Gagnon, P. Winternitz, Phys. Rev. A **39**, 296-306 (1989).
- [93] L. Gagnon, P. Winternitz, J. Phys. A: Math. Gen **26**, 7061 (1993).
- [94] R. Diaz-Sierra, A. Figueiredo and T. M. Rocha Filho Physica D **219** (2006) 80.
- [95] T. M. Rocha Filho, A. Figueiredo and L. Brenig, Comp. Phys. Comm. **117** (1999) 263.
- [96] P. M. M. da Rocha, *Simetrias e Soluções clássicas do modelo de Gross-Neveu* .(Dissertação de Mestrado, IF-UnB, Brasília, 2011).
- [97] T. M. Rocha Filho, I. M. Gléria and A. Figueiredo, Comp. Phys. Comm. **155**, 21 (2003).
- [98] E. M. Silva, T. M. Rocha Filho, A. E. Santana, J. Physics.: Conf. Ser **40**, 150 (2006).
- [99] J. A. Cardeal, M de Montigny, F. C. Khanna, T. M. Rocha Filho, A. E. Santana, J. Phys. A: Math. Theor. **40**, 13467, (2007).
- [100] J. A. Cardeal, A. E. Santana, T. M. Rocha Filho, Physica A: Statistical Mechanics and its Applications, **308**, 292-300, (2002).
- [101] A. E. Santana, A. Ribeiro Filho, J. D. M. Vianna, Rev. Bras. Ens. Fís **22**, 199, (2000).
- [102] T. M. Rocha Filho, *Mecânica Clássica* (Universidade de Brasília, Brasília, 2009).
- [103] P. E. Hydon, *Symmetry Methods for Differential Equations: A Beginner's Guide*, (Cambridge University Press, New York, 2000).
- [104] A. X. Martins, *Solução Analítica da Equação de Schrödinger Não-Linear* (Dissertação de Mestrado, IF-UnB, Brasília, 2011).
- [105] J. M. F. Bassalo, Teoria de Grupos, Person, (2008).
- [106] W. Galleas, L. H. Ymai, P. L. Natti, E. R. T. Natti Rev. Bras. Ens. Fís **25**, 407-413, (2003).
- [107] A. Kenfak, K. Zyczkowsky J. Opt B **6**, 396 (2004).
- [108] R. W. Spekkens Phys. Rev. Lett. **101**, 020401 (2008).
- [109] A. Mari, J. Eisert Phys. Rev. Lett. **109**, 230503 (2012).
- [110] N. Delfose et al. New J. Phys. **19**, 123024 (2017).
- [111] Amorim, R. G. G; Silva, W. B, Physicae, **10**, 20-25, (2014).

- [112] A. Ceausu-Velcesc; P. Blaise and Y. P. Kalmykov, *Int. J Mod. Phys. B* **28**, 1450164 (2014).
- [113] D. Babyuk, *Physicae* , Reno Nevada 89557.
- [114] A. X. Martins, R. A. S. Paiva, G. Petronilo, R. R. Luz, R. G. G. Amorim , S. C. Ulhoa , and T. M. R. Filho, *Adv. High Energy Phys.* 2020, (2020).
- [115] A. X. Martins, T. M. R. Filho, R. G. G. Amorim, R. A. S. Paiva, G. Petronilo and S. C. Ulhoa, *Int. J. Mod. Phys. A* **35**, 2050100 (2020).
- [116] G. B. Arfken, H. J. Weber, *Mathematical Method for Physicists* (6th edition, Elsevier, New York, 2005).
- [117] Yu. M. Bunkov, *Phys. Usp.* **53**, 848 (2010).
- [118] Yu. M. Bunkov, G.E. Volovik, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 265302 (2007).
- [119] V. Veitch, C. Ferrie, D. Gross, and J. Emerson, Negative Quasi-probability as a Resource for Quantum Computation, *New J. Phys.* 14, 113011 (2012).
- [120] E. F. Galvão, Discrete Wigner Functions and Quantum Computational Speedup, *Phys. Rev. A* 71, 042302 (2005).
- [121] A. Mari and J. Eisert, Positive Wigner Functions Render Classical Simulation of Quantum Computation Efficient, *Phys. Rev. Lett.* 109, 230503 (2012).
- [122] R. A. S. Paiva, *Mecânica Quântica Simplética e Não-classicalidade*, (Tese de Doutorado, IF-UnB, Brasília, 2019)