

Universidade Federal do Paraná  
Programa de Pós-graduação em Física  
Dissertação de Mestrado

Alexandre Lira Foggiatto

Dinâmica Aproximada de Operadores na  
Representação de Estados Coerentes

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física do Setor de Ciências Exatas da Universidade Federal do Paraná, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Mestre em Física.

**Orientador:** *Prof. Dr. Alexandre Dias Ribeiro*

**Co-Orientador:** *Prof. Dr. Renato Moreira Angelo*

Curitiba - PR

2015

---

F655d

Foggiatto, Alexandre Lira

Dinâmica aproximada de operadores na representação de estados  
coerentes/ Alexandre Lira Foggiatto. – Curitiba, 2015.  
66 f. : il. color. ; 30 cm.

Dissertação - Universidade Federal do Paraná, Setor de Ciências Exatas,  
Programa de Pós-graduação em Física, 2015.

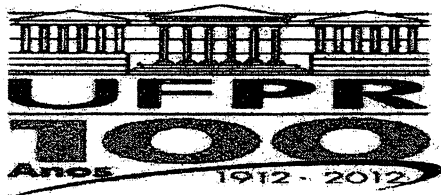
Orientador: Alexandre Dias Ribeiro – Co-orientador: Renato Moreira  
Angelo.

Bibliografia: p. 58-60.

1. Mecânica quântica. 2. Estatística quântica. 3. Osciladores harmônicos.  
I. Universidade Federal do Paraná. II. Ribeiro, Alexandre Dias. III. Angelo,  
Renato Moreira . IV. Título.

CDD: 530.133

---



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ  
SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS  
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA  
Fone: (41) 3361-3096 Fax: (41) 3361-3418  
E-mail: [posgrad@fisica.ufpr.br](mailto:posgrad@fisica.ufpr.br)

## PARECER

Os abaixo-assinados membros da banca examinadora de Defesa de Dissertação de Mestrado do aluno **ALEXANDRE LIRA FOGGIATTO**, consideram aprovada a redação final da dissertação, cujo título é: “*Dinâmica aproximada de operadores na representação de estados coerentes*”.

Curitiba, 26 de fevereiro de 2015.

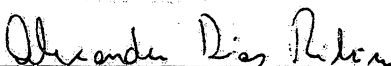
### Banca Examinadora

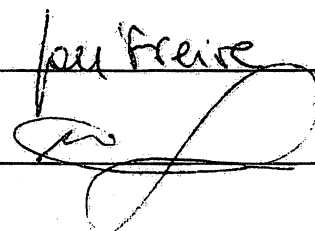
Prof. Dr. Alexandre Dias Ribeiro  
(UFPR)

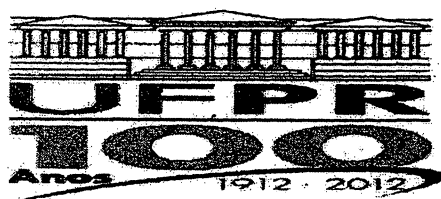
Prof. Dr. José Arruda de Oliveira Freire  
(UFPR)

Prof. Dr. Marcus Aloizio Martinez de Aguiar  
(Unicamp)

### Assinatura







MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ  
SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS  
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA  
Fone: (41) 3361-3096 Fax: (41) 3361-3418  
E-mail: [posgrad@fisica.ufpr.br](mailto:posgrad@fisica.ufpr.br)

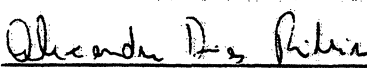
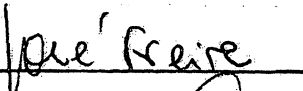

## DEFESA DE DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Dinâmica aproximada de operadores na representação de estados coerentes.

ALUNO

ALEXANDRE LIRA FOGGIATTO

Em sessão pública iniciada às quatorze horas do dia 26 de fevereiro de 2015, após um seminário sob o título acima e posterior arguição, esta banca examinadora decidiu aprovar o candidato com o conceito global A.

Banca Examinadora	Assinatura	Conceito
Prof. Dr. Alexandre Dias Ribeiro (UFPR)		<u>A</u>
Prof. Dr. José Arruda de Oliveira Freire (UFPR)		<u>A</u>
Prof. Dr. Marcus Aloizio Martinez de Aguiar (Unicamp)		<u>A</u>

# Agradecimentos

- Ao orientador, prof. Alexandre, por ter me guiado, desde a graduação, neste fantástico mundo da física, além da paciência e dedicação em me ajudar e, também pelas broncas nos momentos necessários (Realmente muito obrigado, eu aprendi e cresci muito com a sua orientação);
- Ao coorientador, prof. Renato, pelas conversas inspiradoras e pelas grandes contribuições no trabalho;
- Aos pais, Vilmar e Áurea, por todo o tempo e amor colocados em mim e, também por todo o suporte a mim dado;
- À Yukako, por estar ao meu lado em todos os momentos e por ser o raio de sol que ilumina a minha vida.
- Ao Bill, que deveras lutou essa batalha ao meu lado;
- Aos professores das bancas de pré-defesa, Márcio Bettega e Rodrigo Mossanek, e de defesa, José Freire e Marcus Aguiar, pelo tempo gasto em ler esse trabalho e pelas contribuições feitas;
- Aos familiares e amigos, que sempre estiveram presentes;
- Ao CNPq pelo suporte financeiro.

# Resumo

Neste trabalho estudamos a dinâmica do valor esperado de operadores  $\hat{A}(\hat{a}^\dagger, \hat{a})$ , considerando que o estado inicial do sistema é um estado coerente. Desenvolvemos duas fórmulas para  $\langle \hat{A} \rangle$ ; uma expressão semiclássica obtida via aproximação do ponto de sela e uma representação formal em série de potência, que ganha caráter aproximativo quando a truncamos. Para fins de comparação, também trabalhamos com uma aproximação clássico-estatística análoga a  $\langle \hat{A} \rangle$  já existente na literatura, obtida via formalismo Liouvillian. Aplicamos essas abordagens a três sistemas: oscilador harmônico simples, partícula livre e oscilador quártico. De modo geral, as três aproximações se mostraram satisfatórias para tempos curtos, entretanto, para tempos maiores, a qualidade do resultado está intimamente ligada à relevância de  $\hbar$ . As aproximações clássicas e semiclássicas apresentaram melhores resultados no regime semiclássico, formalmente equivalente ao limite  $\hbar \rightarrow 0$ . Por outro lado, a representação em série mostrou-se melhor no regime super-quântico, em que  $\hbar$  é mais relevante.

# Abstract

In this work we study the dynamics of the expectation value of operators  $\hat{A}(\hat{a}^\dagger, \hat{a})$ , considering that the initial state of the system is a coherent-state. We have developed two formulas for  $\langle \hat{A} \rangle$ ; a semiclassical expression obtained through the saddle point approximation and a formal power series representation, which becomes an approximation when it is truncated. For comparison purposes, we also work with a classical-statistics approximation analogous to  $\langle \hat{A} \rangle$ , already studied in the literature and obtained through the Liouvillian formalism. We apply these approximations to three systems: simple harmonic oscillator, free particle and quartic oscillator. In general, all these three approximations are accurate for sufficiently short times, however, for longer times, the quality of the results depends on the relevance of  $\hbar$ . The classical and semiclassical approximations show better results in the semiclassical regime, formally equivalent to the limit  $\hbar \rightarrow 0$ . On the other hand, the series representation is proved to be better in the super-quantum regime, in which  $\hbar$  is more relevant.

# Lista de Figuras

- 2.1 Espaço de fases arbitrário. Dado um sistema e a condição inicial  $(x_\mu, p_\mu, t = 0)$ , pelo determinismo da Mecânica Clássica, existe apenas uma única trajetória (curva contínua) que a conecta ao ponto  $(x_T, p_T, T)$ , passado um intervalo  $T$ . Considerando o mesmo sistema, podemos concluir que é impossível encontrar uma trajetória (curva pontilhada) que conecte o ponto  $(x_\mu, p_\mu, t = 0)$  ao ponto  $(x_\eta, p_\eta, T)$ . . . . . 14
- 2.2 Curvas para as quais  $\text{Re}[F] = 0$  (azul) e  $\text{Im}[F] = 0$  (vermelho) no plano complexo  $B_+$ , onde  $F = B_+ e^{+i\tilde{\omega}z_\mu B_+ T} - z_\eta^* e^{-i(\tilde{\omega})T}$ . As soluções que procuramos são as intersecções das curvas de nível. Utilizamos valores diferentes de tempo para demonstrar o aumento do número de soluções contribuintes com o aumento de  $T$ . Nas figuras (a)-(c) utilizamos  $T = 0,005$ ,  $T = 0,05$  e  $T = 0,5$ , respectivamente. Fizamos  $\hbar = 0,3$ . . . . . 23
- 2.3 À esquerda: propagador exato (curva preta) e semiclássico em função do tempo adimensional  $\theta$ , para  $\hbar = 0,07$ . O propagador semiclássico envolvendo somente uma família de trajetórias é representado pela curva azul. Para duas, três e quatro famílias, os propagadores semiclássicos são representados pelas curvas verde, laranja e vermelha, respectivamente. À direita: propagador exato (curva preta) e semiclássico incluindo 6 famílias de trajetórias (vermelha) em função do tempo adimensional  $\theta$ , para  $\hbar = 0,3$ . 25



2.4	Retro-propagador exato (curva preta) e semiclássico (vermelha) em função do tempo adimensional $\theta$ , para $\hbar = 0,07$ . Lado esquerdo: 4 famílias de trajetórias. Lado direito: 6 famílias de trajetórias. . . . .	25
4.1	Comparação entre médias de operadores segundo métodos de cálculo diferentes para a partícula livre. O resultado quântico exato é representado pela curva preta, o semiclássico pela curva azul e o via representação de série pela vermelha. Lembramos que a média clássica é idêntica à quântica exata. No gráfico (a), mostramos os cálculos relativos a $\hat{X}$ . Em seguida, nos gráficos (b)-(e), apresentamos as curvas para $\hat{P}$ , $\hat{X}^2$ , $\hat{P}^2$ e $\hat{\Sigma}$ , respectivamente. Para o cálculo via representação em série, truncamos a expansão em 65 termos. Utilizamos $\hbar = 0,03$ . . . . .	47
4.2	Comparação entre as diferentes aproximações para o valor esperado do operador $\hat{\Sigma}$ considerando diferentes valores de $\hbar$ para a partícula livre. O resultado quântico exato é representado pela curva preta, o semiclássico pela curva azul e o via representação de série pela vermelha. No gráfico (a) mostramos a evolução da média do observável para $\hbar = 0,7$ . No gráfico (b) escolhemos $\hbar = 0,3$ e, no gráfico (c), selecionamos $\hbar = 0,07$ . Em relação à representação em série, truncamos a expansão em 65 termos. . . . .	49
4.3	Comparação do método de série, utilizando diferentes ordens de truncamento, com o quântico exato para a dinâmica da média do operador $\hat{X}$ , em função do tempo $T$ , para a partícula livre. O quântico exato está representado pela curva preta e a representação em série truncada em 45, 55 e 65 termos é representada pela curva verde, roxa e vermelha, respectivamente. Fixamos $\hbar = 0,3$ . . . . .	50

- 4.4 Comparação entre módulo das médias de operadores segundo métodos de cálculo diferentes para o sistema quártico. O resultado quântico exato é representado pela curva preta (sobreposta à vermelha), o semiclássico pela curva azul, a representação em série pela vermelha e o clássico-estatístico pela curva verde. No gráfico (a), mostramos os cálculos relativos a  $\hat{X}$ . Em seguida, nos gráficos (b)-(e), apresentamos as curvas para  $\hat{P}$ ,  $\hat{X}^2$ ,  $\hat{P}^2$  e  $\hat{\Sigma}$ , respectivamente. Para a representação em série, truncamos a expansão em 65 termos. Utilizamos  $\hbar = 0,3$ . . . . . 51
- 4.5 Comparação entre os métodos no cálculo do módulo do valor esperado de  $\hat{\Sigma}$  utilizando valores diferentes de  $\hbar$  para o sistema quártico. O resultado quântico exato é representado pela curva preta, o método semiclássico pela curva azul e o clássico-estatístico pela curva verde. No gráfico (a) foi utilizado  $\hbar = 0,3$ , no (b) foi utilizado  $\hbar = 0.03$  e, em (c),  $\hbar = 0.003$ . . . . . 53
- 4.6 Comparação do método de série, utilizando diferentes ordens de truncamento, com o quântico exato para a dinâmica da média do operador  $\hat{X}$  em função do tempo  $T$  para o sistema quártico. O quântico exato está representado pela curva preta e a representação em série pela curva vermelha que foi truncada nos gráficos (a)-(c) em 30, 40 e 50 termos, respectivamente. Utilizando  $\hbar = 0,03$ . . . . . 54

# Sumário

<b>Agradecimentos</b>	<b>i</b>
<b>Resumo</b>	<b>ii</b>
<b>Abstract</b>	<b>iii</b>
<b>Lista de Figuras</b>	<b>iv</b>
<b>Sumário</b>	<b>vii</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
<b>2 Conceitos Preliminares</b>	<b>5</b>
2.1 Estados Coerentes . . . . .	5
2.2 O propagador . . . . .	10
2.2.1 Propagador quântico . . . . .	10
2.2.2 Propagador semiclássico em estados coerentes . . . . .	12
2.3 Propagador semiclássico – aplicações . . . . .	17
2.3.1 Partícula livre . . . . .	18

2.3.2	OHS . . . . .	19
2.3.3	Oscilador quártico . . . . .	20
<b>3</b>	<b>Aproximações para o valor médio</b>	<b>27</b>
3.1	Fórmula semiclássica . . . . .	28
3.2	Representação em série . . . . .	32
3.3	Clássico-estatístico . . . . .	33
3.4	Considerações sobre os métodos . . . . .	34
<b>4</b>	<b>Aplicações</b>	<b>36</b>
4.1	Cálculo quántico exato . . . . .	37
4.2	Fórmula semiclássica . . . . .	40
4.3	Representação em série . . . . .	43
4.4	Clássico-estatístico . . . . .	44
4.5	Comparação dos métodos . . . . .	46
<b>5</b>	<b>Conclusão</b>	<b>55</b>
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>58</b>
<b>A</b>	<b>Derivadas da ação</b>	<b>61</b>
<b>B</b>	<b>Método de integração</b>	<b>65</b>

## Introdução

Com o intuito de estudar um sistema físico, podemos utilizar, em princípio, dois formalismos distintos, o quântico ou o clássico. Para decidirmos sobre qual utilizar, devemos olhar para a ação clássica  $\mathcal{S}$  do sistema. Quando  $\mathcal{S} \gg \hbar$  podemos, em geral, utilizar o tratamento clássico e, para valores em que  $\mathcal{S} \sim \hbar$ , utilizamos o quântico. Na região entre os dois limites, surge a Teoria Semiclássica, que, por meio de aproximações apropriadas, decifra como elementos do formalismo quântico estão associados a ingredientes clássicos. Do ponto de vista conceitual, este tipo de estudo contribui para uma melhor compreensão da transição quântica-clássica. Pelo lado prático, sua contribuição se evidencia pela facilidade com que alguns cálculos quânticos podem ser efetuados quando escritos em função de elementos clássicos. O cenário semiclássico é amplamente estudado na literatura, com vários livros abordando o tema (veja, por exemplo, as referências [1–5]), sendo também nosso tema principal de investigação. Em particular, buscamos encontrar expressões para o valor esperado de operadores quânticos no referido regime, que é formalmente equivalente a considerar o limite  $\hbar \rightarrow 0$ .

Embora existam inúmeras contribuições que não fazem uso destes [1–5], para desenvolvermos nosso estudo semiclássico, consideramos conveniente utilizar a base de estados coerentes [6–9]. Esta afirmação se justifica pois, de certa forma, esses são os estados quânticos que mais se aproximam de estados clássicos; por terem a incerteza mínima, segundo o princípio de Heisenberg, eles são os estados mais próximos em Mecânica Quântica de um ponto no espaço de fases. Essa classicalidade naturalmente faz com sejam ideais para

estudar a conexão com o tratamento clássico.

Aproximações semiclássicas usando estados coerentes aplicadas à evolução temporal de pacotes de onda são muito bem estudadas na literatura [10–18]. De um modo geral, esses estudos são baseados na fórmula semiclássica [10] do propagador  $\langle z_1 | \hat{U}(T) | z_2 \rangle$ , em que  $|z_1\rangle$  e  $|z_2\rangle$  são estados coerentes e  $U(T)$  é o operador de evolução temporal, escrita em função de trajetórias clássicas complexas. Em contrapartida, o cálculo semiclássico da média de operadores nesta representação ainda não foi tratado com a mesma intensidade na literatura. Em parte, acreditamos que isso é devido à inexistência de uma fórmula semiclássica para o retro-propagador  $\langle z_1 | \hat{U}^\dagger(T) | z_2 \rangle$  (elemento fundamental para o cálculo do valor esperado) análoga ao propagador. Recentemente uma fórmula semiclássica para tal objeto foi desenvolvida [19], abrindo caminho para um cálculo direto da média de um operador genérico  $\hat{A}$ , definida como  $\langle \hat{A} \rangle$ .

Devemos mencionar que existem outras abordagens semiclássicas que tratam da média de operadores. Por exemplo, alguns trabalhos fazem uso do formalismo de Weyl-Wigner [20, 21], em que o valor esperado é escrito em termos da função de Wigner do estado e da transformada de Weyl do operador em questão. Como este último se escreve geralmente como uma expansão regular em  $\hbar$ , a aproximação consiste em estimar a contribuição dos primeiros termos ao cálculo da média [20, 22]. Em outro trabalho [23], médias de operadores são calculadas via propagador semiclássico de Herman-Kluk [24]. Nesse caso, como o tratamento é numérico, o retro-propagador envolvido na fórmula é tratado simplesmente como o complexo conjugado de um propagador usual. Além destas abordagens, podemos citar a referência [25], que, ao calcular semiclassicamente a dinâmica de valores médios, faz uso de trajetórias clássicas propagadas e retro-propagadas, assim como o presente trabalho, porém sem identificar propagadores e retro-propagadores. Por último, gostaríamos de comentar a referência [26], que associa apropriadamente o Teorema de Ehrenfest e a aproximação de Heller [27] para definir uma aceleração semiclássica, e, a partir desta, definir valores médios para posição e momento.

*A priori*, a vantagem do formalismo semiclássico aqui desenvolvido, com relação aos outros, reside no fato de toda informação dinâmica do cálculo estar contida apenas no propagador e retro-propagador semiclássicos. Sendo assim, toda a experiência adquirida a partir da evolução semiclássica de pacotes de onda neste formalismo [10–18] pode ser diretamente aplicada para o cálculo de valores esperados. No entanto, como veremos, a

---

expressão obtida para este objeto, deduzida via aproximação usual de Ponto de Sela [28], é muito simples, e se assemelha ao teorema de Ehrenfest, em que médias quânticas seguem as trajetórias clássicas. O fato é que essa simplicidade, como é de se esperar, só reproduz os resultados quânticos no limite de  $\hbar$  muito baixo. Isso nos motiva a buscar na teoria de evolução semiclássica supracitada técnicas que nos permitam, em um futuro próximo, estender esse intervalo de validade.

Ainda como parte dos resultados desta dissertação, na busca por melhores aproximações, voltamos à representação integral exata de  $\langle \hat{A} \rangle$  e, a partir dela, derivamos uma expressão que envolve uma série de potências de operações de derivada. A expressão é exata, mas aproximações podem ser implementadas no truncamento de seus termos. No entanto, a fórmula revelou ser mais apropriada para o limite super-quântico, i.e., regime em que  $\hbar$  é grande (comparado a uma ação típica do sistema). Para valores menores de  $\hbar$ , é necessário somar mais termos, o que aumenta indesejavelmente o custo computacional. Para contribuir no estudo das aproximações, utilizamos ainda um cálculo puramente clássico, análogo a  $\langle \hat{A} \rangle$ , desenvolvido a partir do formalismo Liouvilliano [29]. O uso dessa expressão acabou sendo importante porque, de certa forma, conseguimos separar comportamentos puramente quânticos dos clássicos.

Finalmente, com relação ao cálculo das médias, em um extremo temos o cálculo quântico, no outro, o clássico e, entre eles, duas fórmulas aproximadas. Essas expressões intermediárias ou se demonstraram de alto custo computacional (representação em série) ou indesejavelmente simples (fórmula semiclássica). Isto sugere que uma possível combinação das duas abordagens possa ser promissora, rota que também pretendemos continuar em trabalhos futuros.

Após esta breve visão geral sobre o trabalho e o contexto em que está inserido, apresentaremos a disposição dos assuntos tratados na dissertação. No Capítulo 2 faremos uma breve exposição dos estados coerentes, na qual apresentaremos os resultados que utilizaremos como base para este trabalho. No mesmo capítulo, exibiremos as aproximações semiclássicas para o propagador e o retro-propagador, que serão utilizadas, posteriormente, no desenvolvimento da fórmula semiclássica para calcular o valor médio. Mostraremos, ainda neste capítulo, um estudo comparativo do efeito da adição das trajetórias complexas no cálculo do propagador. No Capítulo 3, deduziremos, enfim, as aproximações para a dinâmica do valor esperado. No Capítulo 4, compararemos as aproximações desenvolvidas no

capítulo anterior com a média calculada via Mecânica Quântica. Para tal, selecionaremos cinco operadores e aplicaremos a teoria desenvolvida aos seguintes sistemas: harmônico, partícula livre e quártico. Posteriormente, analisaremos os resultados. E, no Capítulo 5 concluiremos o trabalho e discorreremos sobre as perspectivas futuras.



# Capítulo 2

## Conceitos Preliminares

Neste capítulo apresentaremos os principais conceitos necessários para o entendimento do cálculo de médias de operadores quânticos, que é o foco desta dissertação. Inicialmente, introduziremos os estados coerentes e, em seguida, discorreremos sobre o propagador nesta representação.

### 2.1 Estados Coerentes

Os *estados coerentes*  $|z\rangle$  são de suma importância para este trabalho, pois todas as aproximações aqui desenvolvidas fazem uso de uma base composta por estes estados. Sua utilização está bem disseminada em várias áreas da física; podem ser encontrados em teoria quântica de campos, física atômica e molecular, matéria condensada, informação quântica, etc. [6–8]. O primeiro que se interessou em estudar esses estados foi Schrödinger [30, 31], que estava procurando estados capazes de mimetizar o comportamento clássico, i.e., procurava estados cuja dinâmica do valor médio de um operador fosse semelhante ao seu análogo clássico.

Schrödinger investigava, em particular, estados  $|z\rangle$  do oscilador harmônico simples (OHS), cujo Hamiltoniano é dado por

$$\hat{H}_{\text{oh}} = \hbar\omega_0 \left( \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right), \quad (2.1)$$

que deveriam satisfazer

$$\langle z|\hat{X}(t)|z\rangle = x(t) \quad \text{e} \quad \langle z|\hat{P}(t)|z\rangle = p(t), \quad (2.2)$$

e, além disso, serem estados de mínima incerteza, i.e.,  $\Delta\hat{X}\Delta\hat{P} = \frac{\hbar}{2}$ . Nessa equação,  $x(t)$  e  $p(t)$  representam a trajetória no espaço de fases obtida através de um tratamento clássico, enquanto que  $\hat{X}$  e  $\hat{P}$  são os operadores de posição e momento, respectivamente. Os operadores de aniquilação  $\hat{a}$  e criação  $\hat{a}^\dagger$ , também chamados de operadores *escada* nesta dissertação, são escritos em função de  $\hat{X}$  e  $\hat{P}$  como

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\hat{X}}{b} + i\frac{\hat{P}}{c} \right) \quad \text{e} \quad \hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\hat{X}}{b} - i\frac{\hat{P}}{c} \right), \quad (2.3)$$

com  $b = \sqrt{\hbar/m\omega_0}$  e  $c = \sqrt{\hbar m\omega_0}$ . Aqui,  $\omega_0$  é a frequência angular do sistema,  $m$  a massa da partícula em questão e  $\hbar$  é a constante de Planck dividida por  $2\pi$ . A partir da relação de comutação  $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar$ , podemos mostrar que  $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ . A atuação desses operadores em um auto-estado de energia  $|n\rangle$  de  $\hat{H}_{\text{oh}}$  se dá da seguinte maneira:

$$\hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle \quad \text{e} \quad \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \quad (2.4)$$

dado que  $\hat{a}^\dagger\hat{a}|n\rangle = n|n\rangle$ , sendo  $n$  um número natural qualquer.

Embora historicamente os estados coerentes tenham sido introduzidos com este propósito de estudar a transição entre a Mecânica Quântica e a Clássica, nesta dissertação optamos por utilizar maneiras equivalentes para construí-los. Uma delas, por exemplo, define  $|z\rangle$  como um auto-estado do operador aniquilação, sendo que seu autovalor é o número complexo que o rotula,

$$\hat{a}|z\rangle = z|z\rangle. \quad (2.5)$$

Por esta definição, podemos decompor  $|z\rangle$  na base de auto-estados  $|n\rangle$  do OHS, i.e.,

$$|z\rangle = \sum_n C_n(z)|n\rangle. \quad (2.6)$$

Uma maneira de encontrar os coeficientes  $C_n(z)$  é aplicar  $m$  vezes o operador  $\hat{a}$  na equa-

ção (2.6), que implica em

$$z^m |z\rangle = \sum_n C_n(z) \sqrt{\frac{n!}{(n-m)!}} |n-m\rangle. \quad (2.7)$$

Então, calculando o produto interno com o estado de vácuo, temos

$$C_n(z) = \frac{z^n}{\sqrt{n!}} C_0(z). \quad (2.8)$$

$C_0(z)$  pode ser encontrado ao impormos que o estado  $|z\rangle$  deva ser normalizado, de forma que

$$\begin{aligned} \sum_n |C_n(z)|^2 &= \sum_n \frac{|z|^{2n}}{n!} |C_0(z)|^2 = e^{|z|^2} |C_0(z)|^2 = 1 \\ \implies |C_0(z)| &= e^{-\frac{|z|^2}{2}}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Finalmente, a menos de uma fase global advinda da fase de  $C_0(z)$ , podemos escrever  $|z\rangle$  como

$$|z\rangle = e^{-\frac{|z|^2}{2}} \sum_n \frac{z^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (2.10)$$

A partir da relação acima é simples mostrar que estados coerentes não são ortogonais entre si:

$$\langle z|z'\rangle = e^{-\frac{|z^*|^2}{2}} e^{-\frac{|z'|^2}{2}} \sum_{m,n} \frac{z^{*m} z'^n}{\sqrt{m!n!}} \langle m|n\rangle = e^{-\frac{|z|^2}{2} - \frac{|z'|^2}{2} + z^* z'}. \quad (2.11)$$

Relações de completeza para estados coerentes podem ser escritas como

$$\begin{aligned} \int \frac{d^2z}{\pi} |z\rangle \langle z| &= \frac{1}{\pi} \int d(\text{Re}[z]) d(\text{Im}[z]) |z\rangle \langle z| \\ &= \int \frac{dz dz^*}{2\pi i} |z\rangle \langle z| = \mathbb{1}, \end{aligned} \quad (2.12)$$

podendo ser facilmente comprovada ao escrevermos o estado coerente na base de  $|n\rangle$  e, em seguida, resolvermos a integral.

Retornando às ideias de Schrödinger, o estado mostrado na equação (2.10) satisfaz a

equação (2.2) desde que

$$z = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\langle z | \hat{X}(t) | z \rangle}{b} + i \frac{\langle z | \hat{P}(t) | z \rangle}{c} \right). \quad (2.13)$$

Além dessa propriedade, o estado coerente possui outra que o aproxima da Mecânica Clássica. São estados de mínima incerteza segundo o Princípio de Heisenberg,  $\Delta \hat{X} \Delta \hat{P} = \frac{\hbar}{2}$ , portanto são os estados que mais se aproximam de um ponto no espaço de fases.

Destacamos também que as funções de onda que descrevem esses estados na representação de coordenada ou momento são gaussianas de largura  $b$  e  $c$ , respectivamente. E, ao ser submetido ao potencial harmônico (2.1), o pacote de onda mantém a coerência e pode-se mostrar que o desvio padrão é constante, fundamentando a escolha do seu nome.

Devemos salientar que mesmo tendo sido os estados coerentes deduzidos a partir do OHS, eles podem representar o estado de uma partícula independentemente do sistema ao qual ela interage. Porém, algumas conclusões tomadas acima não serão mais válidas. Por exemplo, ao interagir um sistema com uma partícula, esta descrita inicialmente por um estado coerente, o estado resultante pode passar a não ser mais descrito pela equação (2.10), deixando portanto de ser coerente.

Antes de encerrarmos a seção, é conveniente apresentarmos uma terceira forma de construir  $|z\rangle$ , que tem a vantagem de facilitar a dedução de suas funções de onda. Trata-se de escrevê-lo como um deslocamento a partir do estado de vácuo. Definimos o operador deslocamento  $\hat{D}(z)$  como

$$\hat{D}(z) = e^{z\hat{a}^\dagger - z^*\hat{a}}. \quad (2.14)$$

Utilizando uma versão simplificada da fórmula de Baker–Campbell–Hausdorff

$$e^{\hat{A}} e^{\hat{B}} = e^{\hat{A} + \hat{B}} e^{\frac{1}{2}[\hat{A}, \hat{B}]}, \quad (2.15)$$

válida quando  $[[\hat{A}, \hat{B}], \hat{A}] = [[\hat{A}, \hat{B}], \hat{B}] = 0$ , podemos escrever o operador acima como

$$\hat{D}(z) = e^{-\frac{|z|^2}{2}} e^{z\hat{a}^\dagger} e^{-z^*\hat{a}}. \quad (2.16)$$

Para obter o estado  $|z\rangle$ , aplicamos  $\hat{D}(z)$  no estado de vácuo de forma que

$$\begin{aligned}\hat{D}(z)|0\rangle &= e^{-\frac{|z|^2}{2}} e^{z\hat{a}^\dagger}|0\rangle = e^{-\frac{|z|^2}{2}} \sum_n \frac{(z\hat{a}^\dagger)^n}{n!}|0\rangle \\ &= e^{-\frac{|z|^2}{2}} \sum_n \frac{z^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle = |z\rangle,\end{aligned}\quad (2.17)$$

que pode ser verificada através da equação (2.10). Com a igualdade acima, podemos facilmente escrever  $|z\rangle$  na representação de posição e momento. Para isso, utilizando a equação (2.3), escrevemos o expoente de  $\hat{D}(z)$  em função de  $\hat{X}$  e  $\hat{P}$ :

$$z\hat{a}^\dagger - z^*\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{z - z^*}{b} \hat{X} - i \frac{z + z^*}{c} \hat{P} \right). \quad (2.18)$$

Utilizando novamente a equação (2.15), podemos escrever o operador deslocamento como

$$\hat{D}(z) = e^{\frac{(z-z^*)}{b\sqrt{2}}\hat{X}} e^{-i\frac{(z+z^*)}{c\sqrt{2}}\hat{P}} e^{\frac{z^*2-z^2}{4}}. \quad (2.19)$$

Com o resultado acima, podemos obter

$$\begin{aligned}\langle x|z\rangle &= \langle x|\hat{D}(z)|0\rangle = \langle x|e^{\frac{(z-z^*)}{b\sqrt{2}}\hat{X}} e^{-i\frac{(z+z^*)}{c\sqrt{2}}\hat{P}} e^{\frac{z^*2-z^2}{4}}|0\rangle \\ &= e^{\frac{z^*2-z^2}{4}} e^{\frac{(z-z^*)}{b\sqrt{2}}x} \langle x - (z+z^*)/(b\sqrt{2})|0\rangle \\ &= (\pi b^2)^{-1/4} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{b} - \sqrt{2}z\right)^2 + \frac{z}{2}(z-z^*)},\end{aligned}\quad (2.20)$$

onde utilizamos o operador translação  $e^{-i\lambda\hat{P}/\hbar}$ , que aplicado no estado  $|x\rangle$  o translada para  $|x + \lambda\rangle$ , e a função de onda para o estado fundamental do OHS [30]

$$\langle x|0\rangle = (\pi b^2)^{-1/4} e^{-\left(\frac{x}{b\sqrt{2}}\right)^2}. \quad (2.21)$$

Com o resultado acima, podemos calcular o produto interno entre o estado coerente e um vetor da base de momento, obtendo

$$\begin{aligned}\langle p|z\rangle &= \int \langle p|x\rangle \langle x|z\rangle dx = \int \frac{e^{\frac{i}{\hbar}px}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \langle x|z\rangle dx \\ &= (\pi c^2)^{-1/4} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{p}{c} + i\sqrt{2}z\right)^2 - \frac{z}{2}(z+z^*)},\end{aligned}\quad (2.22)$$

em que simplesmente resolvemos a integral gaussiana complexa presente na primeira linha. Observe que, ao calcular o módulo ao quadrado da equação (2.20), obtemos

$$\begin{aligned} |\langle x|z\rangle|^2 &= (\pi b^2)^{-1/2} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{b}-\sqrt{2}z\right)^2+\frac{z}{2}(z-z^*)} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x}{b}-\sqrt{2}z^*\right)^2+\frac{z^*}{2}(z^*-z)} \\ &= (\pi b^2)^{-1/2} e^{-\left(\frac{x}{b}-\frac{(z+z^*)}{\sqrt{2}}\right)^2} = (\pi b^2)^{-1/2} e^{-\frac{(x-\langle\hat{X}\rangle)^2}{b^2}}, \end{aligned} \quad (2.23)$$

e, de modo similar, para a equação (2.22),

$$|\langle p|z\rangle|^2 = (\pi c^2)^{-1/2} e^{-\frac{(p-\langle\hat{P}\rangle)^2}{c^2}}, \quad (2.24)$$

onde foi utilizado a definição de  $z$  (2.13). Note que encontramos uma gaussiana em posição e uma em momento com larguras  $b$  e  $c$ , respectivamente, como mencionamos anteriormente.

## 2.2 O propagador

### 2.2.1 Propagador quântico

O propagador  $K_+(z_\eta, z_\mu, T)$  em estados coerentes é um objeto físico que nos dá a amplitude de probabilidade de um dado  $|z_\mu\rangle$  evoluir para  $|z_\eta\rangle$ , após um determinado tempo  $T$ , quando submetido a um Hamiltoniano geral  $\hat{H}$ . Nesta dissertação, é conveniente definir um propagador para valores negativos de tempo  $K_-(z_\eta, z_\mu, T)$ , que, para os casos tratados aqui, representa uma retro-evolução temporal do estado  $|z_\mu\rangle$  seguida por uma projeção em  $|z_\eta\rangle$ . Representaremos estes dois objetos através de

$$K_\xi(z_\eta, z_\mu, T) = \langle z_\eta|\hat{U}_\xi(T)|z_\mu\rangle, \quad (2.25)$$

em que  $\xi = +$  representa uma evolução temporal, enquanto que  $\xi = -$  uma retro-evolução.  $\hat{U}_+$  é o operador unitário de evolução temporal e  $\hat{U}_-$  pode ser interpretado como o operador unitário de retro-evolução temporal. Para um Hamiltoniano independente do tempo, temos:

$$\hat{U}_\xi(T) = e^{-\frac{i\xi\hat{H}T}{\hbar}}. \quad (2.26)$$

### O propagador de Feynman e o limite semiclássico

Como uma forma de preparar o leitor para o entendimento da fórmula semiclássica do propagador em estados coerentes (2.25), discutida logo a seguir, decidimos revisar brevemente o propagador de Feynman no limite semiclássico, tema que, sem dúvida, é muito conhecido.

Na formulação de Feynman [32], o propagador  $K(x', x'', T) = \langle x' | \hat{U}(T) | x'' \rangle$  na *representação de posição* é expresso como uma soma de todos os caminhos possíveis que levam  $x'$  a  $x''$ , no intervalo de tempo  $T$ . A contribuição de cada caminho na soma é dada pelo número complexo  $e^{iS/\hbar}$ , em que  $S$  é a sua ação clássica. Essas ideias são expressadas através da integral [32–34],

$$K(x', x'', T) = \int_{\text{caminhos}} e^{\frac{iS}{\hbar}} Dx(t), \quad (2.27)$$

onde  $Dx(t)$  é formalmente definido por

$$Dx(t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left( \frac{m}{2\pi i \hbar \epsilon} \right)^{N/2} \left[ \prod_{k=1}^{N-1} dx_k \right], \quad (2.28)$$

em que se admite a discretização do tempo  $T$  em  $N$  intervalos de tamanho  $\epsilon$  sendo que o índice  $k$  faz referência direta com esses intervalos intermediários de tempo. A relação (2.27) é bastante conhecida e pode ser demonstrada, em um contexto exclusivamente quântico, escrevendo-se o propagador como um produto de propagadores infinitesimais e inserindo-se identidades de maneira conveniente entre eles.

No limite semiclássico  $S/\hbar \rightarrow \infty$ , ao longo de caminhos vizinhos, o integrando da equação (2.27) oscila com frequência muito alta em torno de zero e conseqüentemente o resultado da integral é praticamente nulo. Os únicos caminhos importantes para o cálculo são aqueles em que se verifica pequenas variações na ação  $S$ , i.e., apenas caminhos para os quais  $\delta S = 0$  contribuem efetivamente. Pelo princípio da mínima ação de Hamilton, esses são, justamente, as trajetórias clássicas do problema. Expandindo a ação  $S$  em torno de uma trajetória clássica obtemos

$$K(x', x'', T) \approx e^{\frac{iS_0}{\hbar}} \int e^{\frac{i}{2\hbar} \delta S^2} Dx(t), \quad (2.29)$$

que nada mais é do que uma integral gaussiana multidimensional de resolução simples. Como vemos, no limite semiclássico, a integração sobre todos os caminhos recai sobre apenas um, que trata-se justamente da trajetória clássica.

### 2.2.2 Propagador semiclássico em estados coerentes

Uma fórmula semiclássica para o propagador em estados coerentes (2.25) pode ser encontrada utilizando, essencialmente, o mesmo tipo de aproximação utilizada acima. Como não é objetivo desta dissertação apresentar esta dedução em detalhes, a seguir, apresentaremos apenas sua ideia geral e, em seguida, mostraremos o resultado final. A dedução do propagador semiclássico em estados coerentes pode ser encontrada em diversos artigos [10, 35, 36]. Porém, nesta seção utilizamos como referência principal o artigo [10]. Para o caso do retro-propagador, detalhes podem ser encontrados na referência [19].

Iniciamos o estudo discretizando o tempo  $T$ , no propagador (2.25), em  $N$  intervalos infinitesimais de duração  $\epsilon$ , de tal forma que  $\hat{U}_\xi(T) = \prod_{n=1}^N \hat{U}_\xi(\epsilon)$ . Entre cada operador  $\hat{U}_\xi(\epsilon)$  introduzimos uma identidade (2.12), obtendo, ao final do processo,

$$\begin{aligned} K_\xi(z_\eta, z_\mu, T) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \dots \int \prod_{j=1}^{N-1} \left( \frac{d^2 z_j}{\pi} \right) \langle z_\eta | e^{-\frac{i\xi \hat{H} \epsilon}{\hbar}} | z_{N-1} \rangle \dots \langle z_1 | e^{-\frac{i\xi \hat{H} \epsilon}{\hbar}} | z_\mu \rangle \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \int \dots \int \prod_{j=1}^{N-1} \left( \frac{d^2 z_j}{\pi} \right) K_\xi(z_\eta, z_{N-1}, \epsilon) \dots K_\xi(z_1, z_\mu, \epsilon). \end{aligned}$$

Ao calcular cada um dos propagadores infinitesimais dessa equação, podemos escrevê-la como

$$K_\xi(z_\eta, z_\mu, T) = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \dots \int \prod_{j=1}^{N-1} \left( \frac{d^2 z_j}{\pi} \right) \exp \left[ \frac{i}{\hbar} S_\xi(\omega) \right], \quad (2.30)$$

onde  $\omega$  é o conjunto de pontos  $(z_\eta^*, z_{N-1}^*, \dots, z_\mu^*, z_\eta, z_{N-1}, \dots, z_\mu)$  e o objeto  $S_\xi(\omega)$  está relacionado à ação clássica.



### Trajetórias críticas complexas

De maneira similar à integral (2.27), a equação (2.30) pode ser interpretada como uma soma de contribuições de todos os caminhos que ligam  $z_\eta$  a  $z_\mu$ . Assim como na integral (2.27), no limite semiclássico apenas caminhos críticos contribuem efetivamente para o cálculo da integral. Novamente observamos que tais caminhos podem ser identificados como trajetórias clássicas a seguir especificadas. Em termos de variáveis complexas auxiliares  $u$  e  $v$ , elas são as soluções das equações de Hamilton:

$$\frac{\partial \tilde{H}}{\partial u} = -i\hbar\dot{v} \quad \text{e} \quad \frac{\partial \tilde{H}}{\partial v} = i\hbar\dot{u}, \quad (2.31)$$

em que a Hamiltoniana auxiliar clássica  $\tilde{H}$  é dada por  $\tilde{H}(u, v) = \tilde{H}(z, z^*) \equiv \langle z | \hat{H} | z \rangle$ , expressão que também *define implicitamente* a transformação para  $u$  e  $v$ . Além do mais, as trajetórias contribuintes devem obedecer as seguintes condições de contorno:

$$\begin{aligned} u' = u(0) = z_\mu \quad \text{e} \quad v'' = v(T) = z_\eta^*, \quad \text{para} \quad \xi = +, \\ u'' = u(T) = z_\mu \quad \text{e} \quad v' = v(0) = z_\eta^*, \quad \text{para} \quad \xi = -. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Note que utilizamos *linha única* sobrescrita para se referir ao tempo inicial, enquanto que *linha dupla* para o tempo final, notação que será mantida ao longo desta dissertação.

Nesse momento se faz necessário explicar o porquê de utilizar as variáveis auxiliares  $u$  e  $v$  ao invés de simplesmente manter  $z$  e  $z^*$ . Também precisamos esclarecer a relação entre as equações (2.31) e as equações de Hamilton usuais em um espaço de fases posição-momento.

Tendo em consideração a equação (2.13), escrevemos

$$z = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\bar{x}}{b} + i\frac{\bar{p}}{c} \right) \quad \text{e} \quad z^* = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\bar{x}}{b} - i\frac{\bar{p}}{c} \right). \quad (2.33)$$

Se simplesmente realizarmos esta mudança de variáveis  $(z, z^*) \rightarrow (\bar{x}, \bar{p})$ , as equações (2.31) se tornam

$$\frac{\partial H}{\partial \bar{p}} = \dot{\bar{x}} \quad \text{e} \quad \frac{\partial H}{\partial \bar{x}} = -\dot{\bar{p}}, \quad (2.34)$$

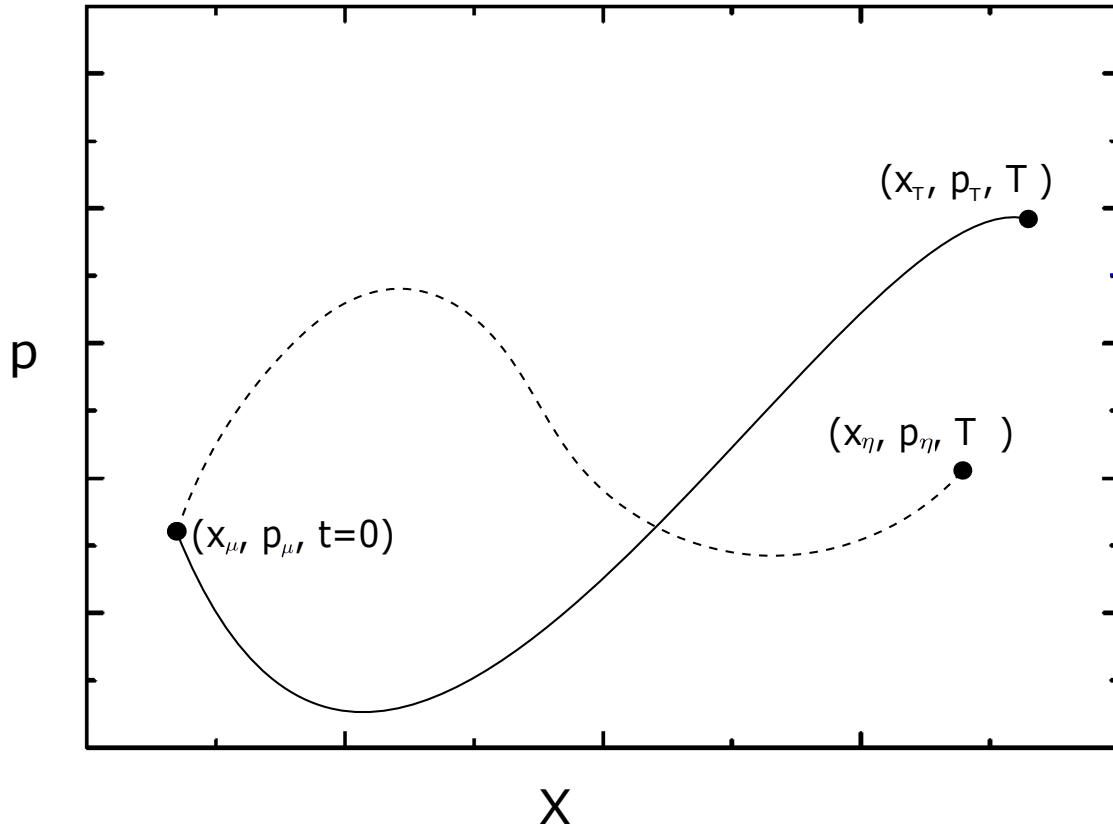


Figura 2.1: Espaço de fases arbitrário. Dado um sistema e a condição inicial  $(x_\mu, p_\mu, t = 0)$ , pelo determinismo da Mecânica Clássica, existe apenas uma única trajetória (curva contínua) que a conecta ao ponto  $(x_T, p_T, T)$ , passado um intervalo  $T$ . Considerando o mesmo sistema, podemos concluir que é impossível encontrar uma trajetória (curva pontilhada) que conecte o ponto  $(x_\mu, p_\mu, t = 0)$  ao ponto  $(x_\eta, p_\eta, T)$ .

onde  $H = \tilde{H}(z[\bar{x}, \bar{p}], z^*[\bar{x}, \bar{p}])$ , que evidenciam a relação pretendida. A partir da equação (2.33), fica evidente que as condições de contorno (2.32) são super-restritivas, como ilustramos na figura 2.1. Ou seja, dados  $z_\eta^*$  e  $z_\mu$ , posições e momentos *iniciais* e  *finais* são determinados, de modo que, em geral, encontrar uma trajetória clássica que os conecte é tarefa impossível. Porém, realizar uma extensão analítica do espaço de fases resolve este problema. Neste procedimento  $\bar{x}$  e  $\bar{p}$  passam a ser variáveis complexas, de modo que  $z$  e  $z^*$ , na equação (2.33), deixam de ser complexo conjugado um do outro. Por isso, redefinimos

$$u = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\bar{x}}{b} + i \frac{\bar{p}}{c} \right) \quad \text{e} \quad v = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\bar{x}}{b} - i \frac{\bar{p}}{c} \right), \quad (2.35)$$

em que é explícito que  $u^* = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\bar{x}^*}{b} - i \frac{\bar{p}^*}{c} \right) \neq v$ , exceto no caso muito particular em que exista uma trajetória clássica real.

### A forma final do propagador semiclássico

Expandindo a função  $S_\xi(\omega)$  da equação (2.30) em torno da trajetória clássica até segunda ordem, e resolvendo a integral gaussiana remanescente, encontra-se a fórmula semiclássica para (2.25),

$$K_\xi^{\text{sc}}(z_\eta^*, z_\mu, T) = \sum_{\text{traj.}} \mathcal{P}_\xi e^{\frac{i}{\hbar}(\mathcal{S}_\xi + \mathcal{G}_\xi) - \Lambda}, \quad (2.36)$$

onde a soma deve ser efetuada sobre todas as trajetórias complexas que sejam soluções das equações (2.31) e satisfazem as condições (2.32). A ação complexa  $\mathcal{S}_\xi = \mathcal{S}_\xi(z_\eta^*, z_\mu, T)$  é escrita como

$$\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}_\xi = \xi \int_0^T \left[ \frac{1}{2} (u\dot{v} - v\dot{u}) - \frac{i}{\hbar} \tilde{H} \right] dt + \frac{1}{2} (u'v' + u''v'') \quad (2.37)$$

e o funcional  $\mathcal{G}_\xi = \mathcal{G}_\xi(z_\eta^*, z_\mu, T)$  como

$$\frac{i}{\hbar} \mathcal{G}_\xi = \frac{\xi}{2} \int_0^T \left( \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \tilde{H}}{\partial u \partial v} \right) dt. \quad (2.38)$$

O termo de normalização  $\Lambda$  é dado por

$$\Lambda = \frac{1}{2} (|z_\eta|^2 + |z_\mu|^2). \quad (2.39)$$

Para finalizar, apresentamos o pré-fator

$$\mathcal{P}_\xi = \sqrt{\frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{S}_\xi}{\partial z_\mu \partial z_\eta^*}}. \quad (2.40)$$

Observe que a única dependência explícita do propagador (2.36) com  $z_\eta$  e  $z_\mu^*$  se encontra na normalização  $\Lambda$ . Isto significa que, excluindo-se  $e^{-\Lambda}$ , a Eq. (2.36) é uma função analítica de  $z_\eta^*$  e  $z_\mu$ , fato que permitirá diversas manipulações conforme veremos no decorrer do texto.

### Matriz instabilidade

A matriz instabilidade  $\mathbf{M}_\xi$  ou matriz tangente de uma trajetória é uma matriz que equaciona os desvios infinitesimais dos pontos finais gerados pela propagação de desvios iniciais arbitrários:

$$\begin{pmatrix} \delta u'' \\ \delta v'' \end{pmatrix} = \mathbf{M}_\xi \begin{pmatrix} \delta u' \\ \delta v' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{uu}^\xi & M_{uv}^\xi \\ M_{vu}^\xi & M_{vv}^\xi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta u' \\ \delta v' \end{pmatrix}. \quad (2.41)$$

Ela se mostrará útil pois é possível escrever o pré-fator  $\mathcal{P}_\xi$ , dado pela equação (2.40), em função de seus elementos, facilitando a implementação computacional do cálculo do propagador. Para relacionar  $\mathbf{M}_\xi$  com as derivadas da ação  $\mathcal{S}$ , utilizamos a equação (A.12), obtida no Apêndice A,

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{S}_\xi}{\partial z_\mu} = \begin{cases} v' & , \text{ para } \xi = +, \\ v'' & , \text{ para } \xi = -, \end{cases} \quad (2.42)$$

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{S}_\xi}{\partial z_\eta^*} = \begin{cases} u'' & , \text{ para } \xi = +, \\ u' & , \text{ para } \xi = -. \end{cases}$$

Para construir a matriz  $\mathbf{M}_\xi$ , primeiramente para  $\xi = +$ , devemos recordar que  $v' = v'(u', v'')$  e  $u'' = u''(u', v'')$ , onde  $u'$  e  $v''$  são, por definição,  $z_\mu$  e  $z_\eta^*$ , respectivamente. Diferenciando a equação (2.42) encontramos

$$\begin{aligned} \delta v' &= \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{S}_+}{\partial u' \partial u'} \delta u' + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{S}_+}{\partial v'' \partial u'} \delta v'', \\ \delta u'' &= \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{S}_+}{\partial u' \partial v''} \delta u' + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{S}_+}{\partial v'' \partial v''} \delta v''. \end{aligned} \quad (2.43)$$

Reescrevendo os termos de modo a deixar os deslocamentos finais em função dos iniciais, encontramos as expressões

$$\begin{aligned} \delta v'' &= - \left( \frac{\partial^2 \mathcal{S}_+}{\partial v'' \partial u'} \right)^{-1} \frac{\partial^2 \mathcal{S}_+}{\partial u'^2} \delta u' + \left( \frac{\partial^2 \mathcal{S}_+}{\partial v'' \partial u'} \right)^{-1} \delta v', \\ \delta u'' &= \frac{i}{\hbar} \left[ \frac{\partial^2 \mathcal{S}_+}{\partial u' \partial v''} - \frac{\partial^2 \mathcal{S}_+}{\partial v''^2} \left( \frac{\partial^2 \mathcal{S}_+}{\partial v'' \partial u'} \right)^{-1} \frac{\partial^2 \mathcal{S}_+}{\partial u'^2} \right] \delta u' + \frac{\partial^2 \mathcal{S}_+}{\partial v''^2} \left( \frac{\partial^2 \mathcal{S}_+}{\partial v'' \partial u'} \right)^{-1} \delta v'. \end{aligned} \quad (2.44)$$

Escrevendo este resultado na forma matricial e comparando com a equação (2.41), obtemos os elementos de  $\mathbf{M}_+$ :

$$\mathbf{M}_+ = \begin{pmatrix} \frac{i}{\hbar} \left[ \frac{\partial^2 \mathcal{S}_+}{\partial u' \partial v''} - \frac{\partial^2 \mathcal{S}_+}{\partial v''^2} \left( \frac{\partial^2 \mathcal{S}_+}{\partial v'' \partial u'} \right)^{-1} \frac{\partial^2 \mathcal{S}_+}{\partial u'^2} \right] & \frac{\partial^2 \mathcal{S}_+}{\partial v''^2} \left( \frac{\partial^2 \mathcal{S}_+}{\partial v'' \partial u'} \right)^{-1} \\ \frac{\partial^2 \mathcal{S}_+}{\partial v''^2} \left( \frac{\partial^2 \mathcal{S}_+}{\partial v'' \partial u'} \right)^{-1} & \left( \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{S}_+}{\partial u' \partial v''} \right)^{-1} \end{pmatrix}. \quad (2.45)$$

Para  $\xi = -$ , o processo é análogo, com  $z_\mu = u''$  e  $z_\eta^* = v'$ . Tendo em mente esse detalhe, encontramos

$$\mathbf{M}_- = \begin{pmatrix} \left( \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{S}_-}{\partial u'' \partial v'} \right)^{-1} & - \left( \frac{\partial^2 \mathcal{S}_-}{\partial u'' \partial v'} \right)^{-1} \frac{\partial^2 \mathcal{S}_-}{\partial v'^2} \\ \frac{\partial^2 \mathcal{S}_-}{\partial u''^2} \left( \frac{\partial^2 \mathcal{S}_-}{\partial u'' \partial v'} \right)^{-1} & \frac{i}{\hbar} \left[ \frac{\partial^2 \mathcal{S}_-}{\partial v' \partial u''} - \frac{\partial^2 \mathcal{S}_-}{\partial u''^2} \left( \frac{\partial^2 \mathcal{S}_-}{\partial u'' \partial v'} \right)^{-1} \frac{\partial^2 \mathcal{S}_-}{\partial v'^2} \right] \end{pmatrix}. \quad (2.46)$$

A partir das duas últimas equações, o pré-fator (2.40) pode ser identificado como

$$\sqrt{\frac{1}{M_{vv}^+}} = \mathcal{P}_+ \quad \text{e} \quad \sqrt{\frac{1}{M_{uu}^-}} = \mathcal{P}_-. \quad (2.47)$$

Escrever o pré-fator em termos da matriz tangente é de grande ajuda nos casos em que as trajetórias são obtidas numericamente, pois é mais fácil encontrar  $\mathbf{M}_\xi$  do que calcular derivadas da ação conforme a primeira prescrição para  $\mathcal{P}_\xi$  [equação (2.40)].

## 2.3 Propagador semiclássico – aplicações

Para ilustrar a fórmula (2.25) utilizamos como exemplo os casos do OHS, partícula livre e o oscilador quártico. Os dois primeiros apresentam resultados semiclássicos coincidentes com os exatos, pois a fórmula (2.36) foi desenvolvida a partir de uma expansão em ordem quadrática, então, para Hamiltonianos até essa ordem, o resultado é exato. Enquanto o último só pode ser resolvido numericamente e possui infinitas trajetórias contribuintes.

### 2.3.1 Partícula livre

O Hamiltoniano para a partícula livre é dado por

$$\hat{H}_{\text{pl}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar\omega_0}{4} (\hat{a}^\dagger \hat{a}^\dagger + \hat{a} \hat{a} - 2\hat{a}^\dagger \hat{a} - 1), \quad (2.48)$$

em que o parâmetro  $\omega_0$  é escolhido como sendo o mesmo da equação (2.3). A Hamiltoniana auxiliar, que é a média do Hamiltoniano no estado  $|z\rangle$ , pode ser facilmente calculada e tem a seguinte forma  $\tilde{H}_{\text{pl}} = -\frac{\hbar\omega_0}{4}(v^2 - 2uv + u^2 - 1)$ . Assim, as equações de movimento (2.31) se tornam

$$\frac{\omega_0}{2}(u - v) = i\dot{v} \quad \text{e} \quad \frac{\omega_0}{2}(u - v) = i\dot{u}. \quad (2.49)$$

Note que as trajetórias contribuintes para  $K_{\pm}^{\text{sc}}$  são governadas pelas mesmas equações de Hamilton, mas as condições de contorno são diferentes. Por isso escrevemos as duas soluções de (2.49),  $[u_+(t), v_+(t)]$  e  $[u_-(t), v_-(t)]$ , como

$$u_{\pm}(t) = -\frac{i\omega_0}{2}(A_{\pm} - B_{\pm})t + A_{\pm} \quad \text{e} \quad v_{\pm}(t) = -\frac{i\omega_0}{2}(A_{\pm} - B_{\pm})t + B_{\pm}. \quad (2.50)$$

Impondo as condições de contorno (2.32), encontramos as constantes arbitrárias

$$A_+ = z_{\mu}, \quad B_+ = \left( \frac{z_{\eta}^* + \frac{i\omega_0 T}{2} z_{\mu}}{1 + \frac{i\omega_0 T}{2}} \right), \quad A_- = \left( \frac{z_{\mu} - \frac{i\omega_0 T}{2} z_{\eta}^*}{1 - \frac{i\omega_0 T}{2}} \right) \quad \text{e} \quad B_- = z_{\eta}^*.$$

Verifica-se, portanto, que, para a partícula livre, as trajetórias envolvidas no cálculo de  $K_{\xi}^{\text{sc}}$  estão completamente determinadas. Além do mais, dados  $z_{\mu}$ ,  $z_{\eta}^*$  e  $T$ , existirá apenas uma única trajetória contribuinte para  $K_+^{\text{sc}}$ , e outra para  $K_-^{\text{sc}}$ , reduzindo o somatório da equação (2.36) a apenas um termo. Inserindo as trajetórias para o cálculo do propagador, obtemos

$$\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}_{\xi} = -\frac{i\xi\omega_0 T}{4} + \frac{z_{\mu}}{2} \left( \frac{z_{\eta}^* + \frac{i\xi\omega_0 T}{2} z_{\mu}}{1 + \frac{i\xi\omega_0 T}{2}} \right) + \frac{z_{\eta}^*}{2} \left( \frac{z_{\mu} + \frac{i\xi\omega_0 T}{2} z_{\eta}^*}{1 + \frac{i\xi\omega_0 T}{2}} \right) \quad \text{e} \quad \frac{i}{\hbar} \mathcal{G}_{\xi} = \frac{i\xi\omega_0 T}{4},$$

e o pré-fator  $\mathcal{P}_\xi = \left(1 + \frac{i\xi\omega_0 T}{2}\right)^{-1}$ . Concluindo, o resultado final para o propagador semiclássico é

$$K_\xi^{\text{sc}} = \frac{e^{-\Lambda}}{\sqrt{1 + \frac{i\xi\omega_0 T}{2}}} \exp \left\{ \frac{z_\mu}{2} \left( \frac{z_\eta^* + \frac{i\xi\omega_0 T}{2} z_\mu}{1 + \frac{i\xi\omega_0 T}{2}} \right) + \frac{z_\eta^*}{2} \left( \frac{z_\mu + \frac{i\xi\omega_0 T}{2} z_\eta^*}{1 + \frac{i\xi\omega_0 T}{2}} \right) \right\}. \quad (2.51)$$

O resultado exato, por outro lado, pode ser obtido ao inserirmos duas identidades na representação de momento na equação (2.25):

$$\begin{aligned} K_\xi &= \int dp_\eta dp_\mu \langle z_\eta | p_\eta \rangle \langle p_\eta | e^{-i\xi \hat{H}_{\text{pl}} T / \hbar} | p_\mu \rangle \langle p_\mu | z_\mu \rangle \\ &= \int \langle z_\eta | p \rangle \langle p | z_\mu \rangle e^{-i\xi p^2 T / 2m\hbar} dp \\ &= \frac{e^{-\frac{z_\mu}{2}(z_\mu + z_\mu^*) - \frac{z_\eta^*}{2}(z_\eta^* + z_\eta)}}{\sqrt{\pi c^2}} \int e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{p}{c} - i\sqrt{2}z_\eta^*\right)^2 - \frac{1}{2}\left(\frac{p}{c} + i\sqrt{2}z_\mu\right)^2 - i\xi p^2 T / 2m\hbar} dp \\ &= \frac{e^{-\frac{z_\mu}{2}(z_\mu + z_\mu^*) - \frac{z_\eta^*}{2}(z_\eta^* + z_\eta)}}{\sqrt{\pi c^2}} \sqrt{\frac{\pi c^2}{1 + \frac{i\omega_0 \xi T}{2}}} e^{z_\eta^{*2} + z_\mu^2 - \frac{1}{2} \frac{(z_\eta^* - z_\mu)^2}{1 + \frac{i\omega_0 \xi T}{2}}} \\ &= K_\xi^{\text{sc}}, \end{aligned} \quad (2.52)$$

onde usamos a equação (2.22) e resolvemos a integral gaussiana complexa completando quadrados. O resultado acima não apresenta nenhuma novidade, pois, conforme comentado na seção anterior, o propagador semiclássico foi desenvolvido a partir de uma expansão em segunda ordem. Então, é esperado que, para um Hamiltoniano até essa ordem, o resultado seja igual ao exato.

### 2.3.2 OHS

O Hamiltoniano do OHS é dado por

$$\hat{H}_{\text{oh}} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0 \hat{x}^2 = \hbar \omega_0 \left( \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right), \quad (2.53)$$

onde novamente escolhemos a frequência angular  $\omega_0$  igual a do estado coerente. A Hamiltoniana auxiliar é encontrada ao calcular a média do Hamiltoniano em um estado  $|z\rangle$ . Nesse caso, é simples ver que  $\tilde{H}_{\text{oh}} = \hbar \omega_0 \left( vu + \frac{1}{2} \right)$ . Aplicando-o às equações de movi-

mento (2.31), obtemos

$$-\omega_0 v = i\dot{v} \quad \text{e} \quad \omega_0 u = i\dot{u}. \quad (2.54)$$

Pelas condições de contorno dos propagadores, obtemos duas soluções distintas para as trajetórias referentes a  $K_+^{\text{sc}}$  e  $K_-^{\text{sc}}$ , que podem ser escritas respectivamente como

$$\begin{aligned} u_+(t) &= z_\mu e^{-i\omega_0 t} \quad \text{e} \quad v_+(t) = z_\eta^* e^{i\omega_0(t-T)}, \\ u_-(t) &= z_\mu e^{-i\omega_0(t-T)} \quad \text{e} \quad v_-(t) = z_\eta^* e^{i\omega_0 t}. \end{aligned} \quad (2.55)$$

Usando essas soluções diretamente na definição dos elementos do propagador, obtemos

$$\mathcal{G}_\xi = \frac{\hbar\omega_0\xi T}{2}, \quad \mathcal{S}_\xi = -\frac{\hbar\omega\xi T}{2} - i\hbar z_\mu z_\eta^* e^{-i\omega_0\xi T} \quad \text{e} \quad \mathcal{P}_\xi = e^{-i\omega_0\xi T}.$$

O que nos leva ao resultado:

$$K_\xi^{\text{sc}} = e^{-\frac{i\omega_0\xi T}{2}} e^{-\frac{1}{2}|z_\mu|^2 - \frac{1}{2}|z_\eta|^2} e^{z_\mu z_\eta^* e^{-i\omega_0\xi T}},$$

que é idêntico ao exato:

$$\begin{aligned} K_\xi &= \langle z_\eta | e^{-i\omega_0\xi T (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2})} | z_\mu \rangle = e^{-\frac{i\omega_0\xi T}{2}} \langle z_\eta | e^{-i\omega_0\xi T} | z_\mu \rangle \\ &= e^{-\frac{i\omega_0\xi T}{2}} e^{-\frac{1}{2}|z_\mu|^2 - \frac{1}{2}|z_\eta|^2} e^{z_\mu z_\eta^* e^{-i\omega_0\xi T}}. \end{aligned} \quad (2.56)$$

Como esperado, novamente para um potencial quadrático, o resultado semiclássico é idêntico ao exato.

### 2.3.3 Oscilador quártico

O último exemplo a ser estudado é o sistema quártico, que está relacionado com o Efeito Kerr Óptico [37]. Esse efeito é oriundo da mudança do índice de refração do material em resposta ao campo elétrico aplicado, induzindo, no material, efeitos ópticos não-lineares. Como essas correções são pequenas, esses efeitos se tornam significantes em feixes de luz muito intensos, como por exemplo, o laser. Por simplicidade, utilizaremos



apenas o Hamiltoniano da interação não-linear, que é definido como<sup>1</sup>

$$\begin{aligned}\hat{H}_q &= \zeta \left( \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2\hat{x}^2 \right)^2 \\ &= \zeta\hbar^2\omega_0^2 \left( \hat{a}^\dagger\hat{a}^\dagger\hat{a}\hat{a} + 2\hat{a}^\dagger\hat{a} + \frac{1}{4} \right),\end{aligned}\quad (2.57)$$

onde  $\zeta$  é um parâmetro cuja unidade é o inverso da energia e, novamente, escolhemos a frequência do OHS como  $\omega_0$ .

A Hamiltoniana auxiliar clássica é dada por  $\tilde{H}_q = \zeta\hbar^2\omega_0^2 [(1 + uv)^2 - \frac{3}{4}]$ , e as equações de movimento são

$$- [\tilde{\omega}(1 + uv)]v = i\dot{v} \quad \text{e} \quad [\tilde{\omega}(1 + uv)]u = i\dot{u}, \quad (2.58)$$

onde definimos  $\tilde{\omega} \equiv 2\zeta\hbar\omega_0^2$ . Essas relações implicam claramente que  $uv$  é constante. Usando isto, conclui-se facilmente que as trajetórias contribuintes para  $K_\pm^{\text{sc}}$  são dadas por

$$u_\pm(t) = A_\pm e^{-i\tilde{\omega}(1+uv)t} \quad \text{e} \quad v_\pm(t) = B_\pm e^{+i\tilde{\omega}(1+uv)t}. \quad (2.59)$$

Aplicando as condições de contorno (2.32), podemos concluir diretamente que  $A_+ = z_\mu$  e  $B_- = z_\eta^*$ . No entanto, é um pouco mais complicado encontrar as constantes  $B_+$  e  $A_-$ , pois elas devem satisfazer as seguintes condições:

$$A_- e^{-i\tilde{\omega}z_\eta^*A_-T} = z_\mu e^{+i\tilde{\omega}T} \quad \text{e} \quad B_+ e^{+i\tilde{\omega}z_\mu B_+T} = z_\eta^* e^{-i\tilde{\omega}T}, \quad (2.60)$$

que são equações transcendentais com infinitas soluções. Cada solução de  $A_-$  e  $B_+$ , obtidas numericamente a partir do último conjunto de equações, podem ser escritas como  $a_n$  e  $b_n^*$ , respectivamente, com índice  $n = 1, 2, \dots$ . Assim, as trajetórias são explicitamente dadas por

$$\begin{aligned}u_+^{(n)}(t) &= z_\mu e^{-i\tilde{\omega}z_\mu b_n^* t} e^{-i\tilde{\omega}t} \quad \text{e} \quad v_+^{(n)}(t) = b_n^* e^{+i\tilde{\omega}z_\mu b_n^* t} e^{+i\tilde{\omega}t}, \\ u_-^{(n)}(t) &= a_n e^{-i\tilde{\omega}a_n z_\eta^* t} e^{-i\tilde{\omega}t} \quad \text{e} \quad v_-^{(n)}(t) = z_\eta^* e^{+i\tilde{\omega}a_n z_\eta^* t} e^{+i\tilde{\omega}t}.\end{aligned}\quad (2.61)$$

<sup>1</sup>Note que, nesta dissertação, chamamos de Hamiltoniano quártico o Hamiltoniano do OHS ao quadrado, que não deve ser confundido com a definição comum de oscilador quártico  $\hat{p}^2/2m + \lambda\hat{q}^4$ .

Com as trajetórias em mãos podemos calcular cada elemento do propagador (2.25):

$$\mathcal{S}_\xi^{(n)} = \xi \hbar \tilde{\omega} T \left[ \frac{\gamma_n^\xi \gamma_n^\xi}{2} - \frac{1}{8} \right] - i \hbar \gamma_n^\xi \quad \text{e} \quad \mathcal{G}_\xi^{(n)} = \xi \hbar \tilde{\omega} T \left[ \gamma_n^\xi + \frac{1}{2} \right], \quad (2.62)$$

onde  $\gamma_n^+ \equiv z_\mu b_n^*$  e  $\gamma_n^- \equiv a_n z_\eta^*$ . O pré-fator  $\mathcal{P}_\xi^{(n)}$  pode ser calculado da seguinte maneira. Dado um conjunto  $(\bar{z}_\eta^*, \bar{z}_\mu, T)$ , encontramos as soluções  $\bar{b}_n^*$  e  $\bar{a}_n$  da equação (2.60). Se nós fizermos uma pequena variação da forma  $(\bar{z}_\eta^* + \delta z_\eta^*, \bar{z}_\mu + \delta z_\mu, T)$ , as novas soluções serão  $\bar{b}_n^* + \delta b_n^*$  e  $\bar{a}_n + \delta a_n$ . Agora, substituindo essas soluções na Eq. (2.60), encontramos, ao desprezar as variações em 2ª ordem,

$$\begin{aligned} \delta b_n^* &= \frac{\bar{b}_n^*}{\bar{z}_\eta^*} \left( \frac{1}{1 + i \tilde{\omega} \bar{z}_\mu \bar{b}_n^* T} \right) \delta z_\eta^* - \left( \frac{i \tilde{\omega} (\bar{b}_n^*)^2 T}{1 + i \tilde{\omega} \bar{z}_\mu \bar{b}_n^* T} \right) \delta z_\mu, \\ \delta a_n &= \frac{\bar{a}_n}{\bar{z}_\mu} \left( \frac{1}{1 - i \tilde{\omega} \bar{z}_\eta^* \bar{a}_n T} \right) \delta z_\mu + \left( \frac{i \tilde{\omega} \bar{a}_n^2 T}{1 - i \tilde{\omega} \bar{z}_\eta^* \bar{a}_n T} \right) \delta z_\eta^*. \end{aligned} \quad (2.63)$$

Destas equações podemos concluir que

$$\begin{aligned} \frac{\partial b_n^*}{\partial z_\eta^*} &= \frac{b_n^*}{z_\eta^*} \left( \frac{1}{1 + i \tilde{\omega} z_\mu b_n^* T} \right), & \frac{\partial b_n^*}{\partial z_\mu} &= - \left( \frac{i \tilde{\omega} (b_n^*)^2 T}{1 + i \tilde{\omega} z_\mu b_n^* T} \right), \\ \frac{\partial a_n}{\partial z_\mu} &= \frac{a_n}{z_\mu} \left( \frac{1}{1 - i \tilde{\omega} z_\eta^* a_n T} \right), & \frac{\partial a_n}{\partial z_\eta^*} &= \left( \frac{i \tilde{\omega} a_n^2 T}{1 - i \tilde{\omega} z_\eta^* a_n T} \right). \end{aligned} \quad (2.64)$$

Usando os resultados acima, de acordo com a equação (2.40), e a expressão de  $\mathcal{S}_\xi^{(n)}$  encontrada na equação (2.62), o pré-fator pode ser escrito como

$$\mathcal{P}_\xi^{(n)} = \left[ \frac{\gamma_n^\xi}{z_\mu z_\eta^*} \left( \frac{1}{1 + i \xi \tilde{\omega} \gamma_n^\xi T} \right) \right]^{1/2}. \quad (2.65)$$

Finalmente, escrevemos a equação (2.36) como

$$K_\xi^{\text{sc}} = e^{\frac{3i\xi\tilde{\omega}T}{8} - \Lambda} \sum_n \left[ \frac{\gamma_n^\xi}{z_\mu z_\eta^*} \left( \frac{1}{1 + i \xi \tilde{\omega} \gamma_n^\xi T} \right) \right]^{1/2} e^{[\frac{i\xi\tilde{\omega}T}{2} \gamma_n^\xi + (1+i\xi\tilde{\omega}T)] \gamma_n^\xi}. \quad (2.66)$$

O resultado exato, por outro lado, pode ser escrito através da série

$$K_\xi = \langle z_\eta | e^{-\frac{i\xi\tilde{\omega}T}{2} (\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2})} | z_\mu \rangle = e^{-\frac{i\xi\tilde{\omega}T}{8} - \Lambda} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(z_\eta^* z_\mu)^n}{n!} e^{-\frac{i\xi\tilde{\omega}T}{2} n(n+1)}, \quad (2.67)$$

que, em princípio, pode não ser expressa por uma fórmula fechada. Em particular, para  $T = k\tau \equiv 2\pi k/\tilde{\omega}$ , com  $k$  inteiro, a série pode ser calculada de modo que  $K_\xi(z_\eta, z_\mu, k\tau) = K_\xi(z_\eta, z_\mu, 0)$ . Note que o parâmetro  $\tau = 2\pi/\tilde{\omega}$  é, portanto, um período para  $K_\xi$ . Assim, o valor de  $T$  normalizado por  $\tau$ , quantidade definida por  $\theta = T/\tau$ , é uma importante referência para medidas de tempo e será usada no futuro em aplicações numéricas.

Para  $T \rightarrow 0$ , se mantivermos nos cálculos apenas a primeira ordem em  $T$ , é fácil mostrar que as duas últimas expressões são equivalentes. No entanto, para valores maiores de  $T$  precisamos fazer um cálculo numérico para compará-las, o que será nossa próxima tarefa. Para os parâmetros envolvidos em  $\hat{H}_q$ , escolhemos  $\zeta = \omega_0 = m = 1$  em unidades

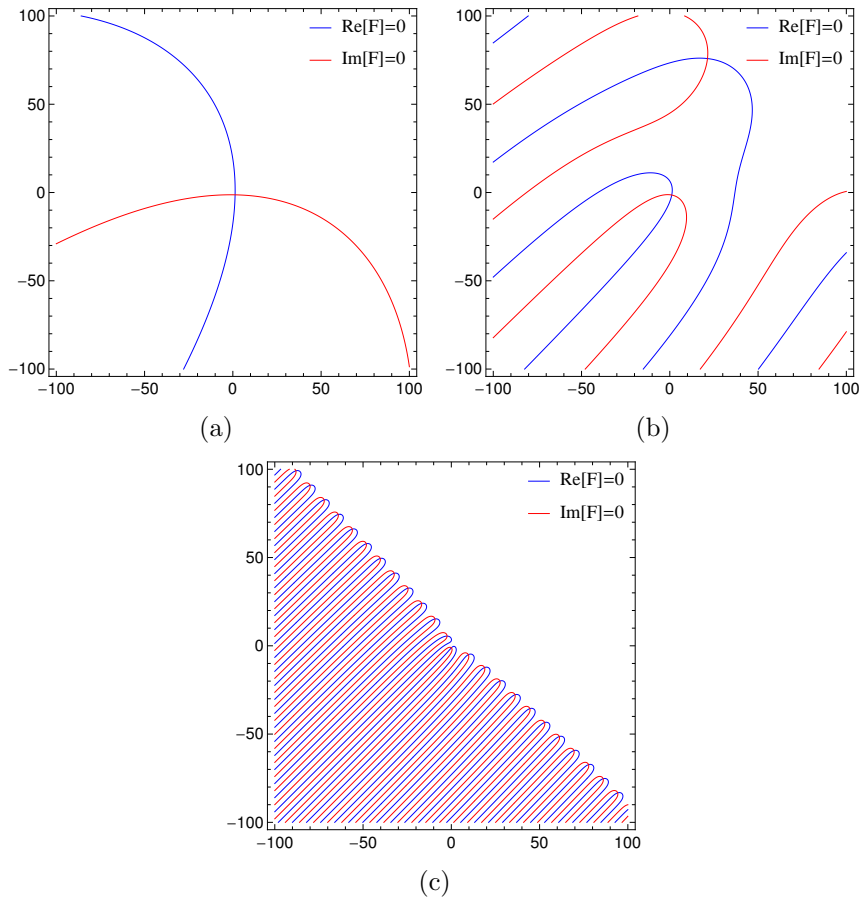


Figura 2.2: Curvas para as quais  $\text{Re}[F] = 0$  (azul) e  $\text{Im}[F] = 0$  (vermelho) no plano complexo  $B_+$ , onde  $F = B_+ e^{+i\tilde{\omega}z_\mu B_+ T} - z_\eta^* e^{-i(\tilde{\omega})T}$ . As soluções que procuramos são as intersecções das curvas de nível. Utilizamos valores diferentes de tempo para demonstrar o aumento do número de soluções contribuintes com o aumento de  $T$ . Nas figuras (a)-(c) utilizamos  $T = 0,005$ ,  $T = 0,05$  e  $T = 0,5$ , respectivamente. Fizamos  $\hbar = 0,3$ .

arbitrárias. Com relação aos estados  $|z_\mu\rangle$  e  $|z_\eta\rangle$ , fixamos seus rótulos

$$z_\mu = z_\eta = \frac{1+i}{\sqrt{2\hbar}}. \quad (2.68)$$

Os outros dois parâmetros livres  $T$  e  $\hbar$  são variados conforme discutido a seguir.

Para o cálculo do propagador semiclássico ( $\xi = +$ ), encontramos as soluções  $a_n$  e  $b_n^*$  da equação (2.60) de maneira gráfica e aproximada, e as aprimoramos utilizando um método numérico de busca de raízes. Como já discutimos, para um dado valor  $\hbar$  e  $T$ , é possível encontrar infinitas soluções. Porém selecionamos apenas aquelas que contribuíam significativamente ao cálculo, que são, justamente, as soluções que se encontram próximas à origem. Como pode ser observado na equação (2.66), para valores grandes de  $\gamma_n^\xi$  o propagador semiclássico pode divergir ou ir a zero, contudo, para valores de  $\gamma_n^\xi$  próximos de zero, o propagador (2.66) pode convergir em um valor com módulo menor do que 1. Por exemplo, para  $T = 0$ , é possível calcular (mesmo analiticamente) uma única solução da equação (2.60):  $A_- = z_\mu$  e  $B_+ = z_\eta^*$ . *Grosso modo*, todas as outras soluções se encontram no infinito para este parâmetro. Para valores de  $T$  suavemente maiores, verifica-se que a solução anterior também é alterada suavemente. Por exemplo, para  $T = 0,005$  e  $\hbar = 0,3$  podemos verificar que uma solução é dada por  $z_\eta^* + \delta$ , onde  $\delta = 0,017 + 0,016i$ . No entanto, outras soluções podem migrar do infinito e passar a contribuir, como visto na figura 2.2. Quanto maior o valor de  $T$ , maior é o número de soluções contribuintes. Define-se uma família de trajetórias como o conjunto daquelas originadas de soluções  $a_n$  e  $b_n^*$  continuamente obtidas a partir da variação de  $T$ .

Na figura 2.3, no lado esquerdo, comparamos o propagador calculado via Mecânica Quântica [equação (2.67), com a série convergida em  $n = 50$ ] com o semiclássico (2.66), para  $\hbar = 0,07$  em função de  $\theta$ . Para o lado direito consideramos  $\hbar = 0,3$ . Para ilustrar a dependência do número de trajetórias contribuintes em função de  $T$ , no lado esquerdo da figura 2.3, mostramos o propagador semiclássico quando apenas uma única família contribui (curva azul). Verifica-se que o resultado é satisfatório apenas para valores pequenos de  $T$ . Ao incluir uma segunda família (verde), a concordância se estende para valores maiores de  $T$ . Quando se inclui quatro famílias (vermelha), o resultado semiclássico concorda bem com o exato para praticamente todos os valores de  $T$  mostrados. Na figura 2.3, lado direito, utilizando um valor de  $\hbar$  um pouco maior, pudemos calcular o propagador

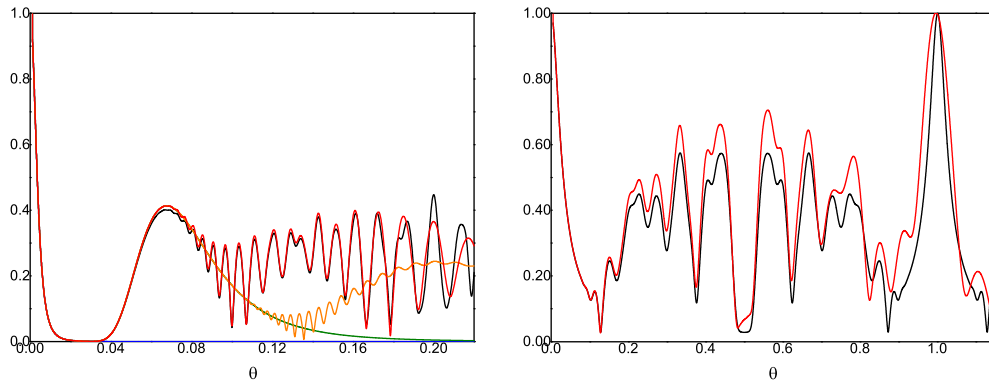


Figura 2.3: À esquerda: propagador exato (curva preta) e semiclássico em função do tempo adimensional  $\theta$ , para  $\hbar = 0,07$ . O propagador semiclássico envolvendo somente uma família de trajetórias é representado pela curva azul. Para duas, três e quatro famílias, os propagadores semiclássicos são representados pelas curvas verde, laranja e vermelha, respectivamente. À direita: propagador exato (curva preta) e semiclássico incluindo 6 famílias de trajetórias (vermelha) em função do tempo adimensional  $\theta$ , para  $\hbar = 0,3$ .

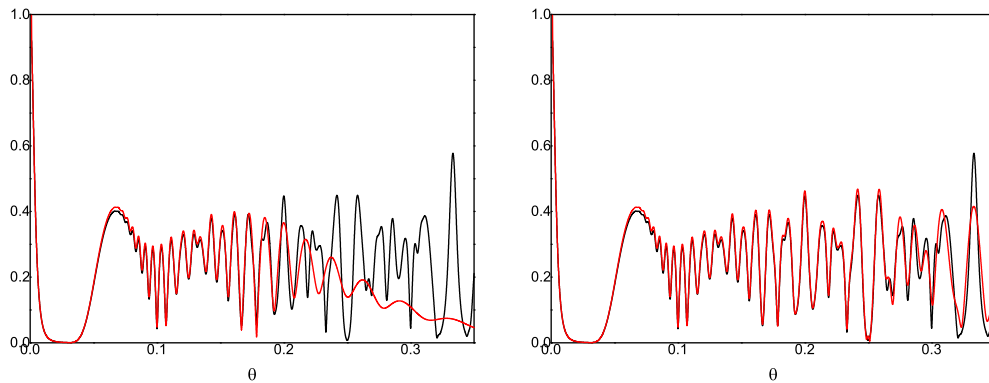


Figura 2.4: Retro-propagador exato (curva preta) e semiclássico (vermelha) em função do tempo adimensional  $\theta$ , para  $\hbar = 0,07$ . Lado esquerdo: 4 famílias de trajetórias. Lado direito: 6 famílias de trajetórias.

por um período completo  $\tau$ . Seis famílias de trajetórias foram necessárias para reproduzir aproximadamente o resultado quântico. De fato, como, para este gráfico, o valor de  $\hbar$  já é consideravelmente alto, consideramos o resultado bastante satisfatório.

Na figura 2.4, para  $\hbar = 0,07$ , mostramos que comportamento do retro-propagador

---

$K_-^{\text{sc}}$  é análogo ao  $K_+^{\text{sc}}$ . No lado esquerdo, incluímos apenas quatro famílias no cálculo semiclássico, enquanto que, no gráfico do lado direito, seis famílias são incluídas. Note, novamente, que a inclusão de trajetórias estende a concordância com o resultado exato para valores maiores de  $T$ .

## Aproximações para o valor médio

Neste capítulo, nos dedicaremos ao principal objetivo do trabalho que é desenvolver aproximações para a dinâmica do valor médio de um operador quântico. Para tal, consideramos um operador genérico na representação de Schrödinger escrito como  $\hat{A}_s = A(\hat{a}^\dagger, \hat{a})$ , onde  $A(\hat{a}^\dagger, \hat{a})$  é uma função ordenada dos operadores  $\hat{a}^\dagger$  e  $\hat{a}$ , i.e., cada termo da expansão em série de  $A$  pode ser escrito na forma  $(\hat{a}^\dagger)^m (\hat{a})^n$ . Na representação de Heisenberg temos  $\hat{A}_t = \hat{U}^\dagger \hat{A}_s \hat{U}$ . Assumindo que o estado inicial é dado pelo estado coerente  $|z_0\rangle$ , a quantidade de interesse é calculada como

$$\begin{aligned}
 A_t &\equiv \langle z_0 | \hat{U}^\dagger \hat{A}_s \hat{U} | z_0 \rangle \\
 &= \int \frac{d^2 z_1}{\pi} \frac{d^2 z_2}{\pi} \frac{\langle z_2 | \hat{A}_s | z_1 \rangle}{\langle z_2 | z_1 \rangle} \langle z_2 | z_1 \rangle K_-(z_0, z_2, t) K_+(z_1, z_0, t) \\
 &= \int \frac{dz_1 dz_1^* dz_2 dz_2^*}{(2\pi i)^2} A(z_2^*, z_1) e^{-\frac{1}{2}|z_2|^2 + z_2^* \cdot z_1 - \frac{1}{2}|z_1|^2} K_-(z_0, z_2, t) K_+(z_1, z_0, t), \quad (3.1)
 \end{aligned}$$

em que  $A(z_2^*, z_1) \equiv \frac{\langle z_2 | \hat{A}_s | z_1 \rangle}{\langle z_2 | z_1 \rangle}$ . Na equação acima foi utilizado a resolução de unidade (2.12) e a equação (2.11). No decorrer do capítulo focaremos em desenvolver aproximações para a equação (3.1).

### 3.1 Fórmula semiclássica

O primeiro método desenvolvido para calcular o valor esperado de um observável  $\hat{A}_t$  utiliza-se da mesma aproximação utilizada na derivação dos propagadores semiclássicos (2.25), a qual consiste em calcular as integrais da fórmula (3.1) pelo método do ponto de sela.

O método do ponto de sela (ou método do declive mais íngreme – *steepest descent method*) é utilizado para resolver, no plano complexo  $z$ , integrais de linha da forma

$$I_c = \int_c g(z) e^{\frac{1}{\hbar} f(z)} dz, \quad (3.2)$$

no limite em que  $\hbar \rightarrow 0$ . Uma discussão detalhada do método encontra-se na referência [28]. Sua ideia geral consiste em resolver aproximadamente a integral ao longo de um caminho conveniente  $C'$  e justificar, via Teorema de Cauchy, a equivalência do resultado entre os dois caminhos. De fato, esta justificativa só é factível para problemas simples (baixa dimensionalidade e funções não muito complicadas). Para o caso tratado aqui, simplesmente assumimos que existe equivalência entre  $C$  e  $C'$ , e eventuais resultados não-físicos são atribuídos à utilização indevida desta hipótese. O caminho conveniente é aquele que atravessa um ponto de sela  $\bar{z}$ , possui parte imaginária de  $f(z)$  constante, e  $\bar{z}$  deve ser um máximo da parte real de  $f(z)$  ao longo do caminho. Pode-se demonstrar que, dentre os caminhos que emanam de  $\bar{z}$ , aqueles que satisfazem estes critérios são os de descida mais íngreme [para a parte real de  $f(z)$ ], o que justifica um dos nomes do método. O ponto de sela é definido por  $\frac{df(\bar{z})}{d\bar{z}} = 0$ , e a facilidade para calcular a integral neste novo caminho se justifica por dois motivos: o integrando não oscila abruptamente e  $e^{\frac{1}{\hbar} \text{Re}(f(z))}$  pode ser aproximada no limite assintótico  $\hbar \rightarrow 0$  por uma gaussiana. Em termos práticos, simplesmente expandimos  $f(z)$  em torno de  $\bar{z}$  até segunda ordem e resolvemos a integral gaussiana remanescente. O resultado é

$$I_c \approx g(\bar{z}) \sqrt{\frac{2\hbar\pi}{|f''(\bar{z})|}} \exp \left[ \frac{f(\bar{z})}{\hbar} + i\bar{\sigma} \right], \quad (3.3)$$

onde  $\bar{\sigma}/2$  é a fase de  $f''(\bar{z})$ .

Voltando a  $A_t$ , substituiremos, na equação (3.1), os propagadores exatos pelos análo-



gos semiclássicos (2.25), obtendo

$$A_t^{\text{sc}} = e^{-|z_0|^2} \int \frac{dz_2^* du_-''}{2\pi i} \frac{dv_+'' dz_1}{2\pi i} A(z_2^*, z_1) \mathcal{P}_-(z_0^*, u_-'', T) \mathcal{P}_+(v_+'', z_0, T) e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{F}(z_2^*, u_-'', v_+'', z_1, T)}, \quad (3.4)$$

onde reescrevemos  $z_1^*$  e  $z_2$  como  $v_+''$  e  $u_-''$  e definimos

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \mathcal{F} &\equiv -z_2^* \cdot u_-'' + z_2^* \cdot z_1 - v_+'' \cdot z_1 + \mathcal{S}_-(z_0^*, u_-'', T) + \mathcal{S}_+(v_+'', z_0, T) \\ &+ \mathcal{G}_-(z_0^*, u_-'', T) + \mathcal{G}_+(v_+'', z_0, T). \end{aligned}$$

Por simplicidade, assumimos que  $K_-^{\text{sc}}$  e  $K_+^{\text{sc}}$  possuem, cada um, apenas uma trajetória contribuinte. Note que a última equação consiste em uma integral de linha nas seguintes variáveis:  $z_2^*$ ,  $u_-''$ ,  $v_+''$  e  $z_1$ . Resolver a integral significa, para cada ponto ao longo do caminho, encontrar as trajetórias contribuintes para  $K_\xi^{\text{sc}}$  e calcular as funções presentes no integrando. Em seguida, soma-se a contribuição de cada ponto do caminho.

Segundo o método ponto de sela, no limite semiclássico, não precisamos levar em consideração todos os pontos do caminho, mas apenas a vizinhança do ponto crítico  $\bar{\mathbf{r}} = (\bar{z}_2^*, \bar{u}_-'', \bar{z}_1, \bar{v}_+'')$ , dado por

$$\left( \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial z_2^*} \right) \Big|_{\bar{\mathbf{r}}} \delta z_2^* + \left( \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial u_-''} \right) \Big|_{\bar{\mathbf{r}}} \delta u_-'' + \left( \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial z_1} \right) \Big|_{\bar{\mathbf{r}}} \delta z_1 + \left( \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial v_+''} \right) \Big|_{\bar{\mathbf{r}}} \delta v_+'' = 0. \quad (3.5)$$

Como cada uma das variações é independente entre si, podemos separar a equação (3.5) de modo a obter o seguinte conjunto de equações:

$$\bar{z}_2^* - \bar{v}_+'' = 0, \quad -\bar{z}_1 + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{S}_+}{\partial \bar{v}_+''} = 0, \quad -\bar{z}_2^* + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{S}_-}{\partial \bar{u}_-''} = 0, \quad \text{e} \quad -\bar{u}_-'' + \bar{z}_1 = 0, \quad (3.6)$$

em que desconsideramos as derivadas sobre  $\mathcal{G}_\pm$ , já que, segundo a referência [10], a melhoria causada pela eventual adição deste termo é menor que o erro da aproximação em si. Utilizando a equação (2.42) na (3.6), obtemos

$$\bar{v}_+'' = \bar{z}_2^*, \quad \bar{u}_+'' = \bar{z}_1, \quad \bar{v}_-'' = \bar{z}_2^*, \quad \bar{u}_-'' = \bar{z}_1. \quad (3.7)$$

Essas quatro equações implicam em novas condições de contorno para as trajetórias definidas pelo ponto crítico:  $\bar{u}_+'' = \bar{u}_-'' = \bar{z}_1$  e  $\bar{v}_-'' = \bar{v}_+'' = \bar{z}_2^*$ , i.e., os pontos finais das duas

trajetórias críticas ( $\xi = \pm$ ) coincidem. Partindo do pressuposto que elas são governadas pela mesma Hamiltoniana e pelas mesmas equações de movimento (2.31), concluímos que as duas trajetórias são iguais. Dadas as condições iniciais  $\bar{u}'_+ = \bar{z}_0$  e  $\bar{v}'_- = \bar{z}_0^*$  e as condições finais, a única maneira de obedecê-las completamente é considerando a trajetória crítica como sendo a trajetória real,  $\bar{u} = \bar{v}^*$ . Utilizando a conclusão acima a respeito das trajetórias, eliminamos o índice  $\xi$  relacionado à trajetória e começamos a trabalhar com apenas  $\bar{u}$  e  $\bar{v}$ .

Após finalizar a discussão sobre o significado do ponto crítico, voltamos para resolver a integral (3.4). Expandindo o integrando até segunda ordem ao redor de  $\bar{\mathbf{r}}$ , temos

$$A_t^{\text{sc}} = A(\bar{v}'', \bar{u}'') \mathcal{P}_-(z_0^*, \bar{u}'', t) \mathcal{P}_+(\bar{v}'', z_0, t) \int \frac{d[\delta z_2^*]}{2\pi i} \frac{d[\delta u''_-]}{2\pi i} \frac{d[\delta v''_+]}{2\pi i} \frac{d[\delta z_1]}{2\pi i} e^{\frac{1}{2}\delta^2 \mathcal{F}}, \quad (3.8)$$

em que foi definido  $\delta z_1 = z_1 - \bar{z}_1$  (analogamente para as outras variáveis) e

$$\delta^2 \mathcal{F} = \begin{pmatrix} \delta z_1 & \delta v''_+ & \delta u''_- & \delta z_2^* \end{pmatrix} \mathbf{Q} \begin{pmatrix} \delta z_1 \\ \delta v''_+ \\ \delta u''_- \\ \delta z_2^* \end{pmatrix},$$

onde

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \partial_{z_1, z_1}^2 \mathcal{F} & \partial_{z_1, v''_+}^2 \mathcal{F} & \partial_{z_1, u''_-}^2 \mathcal{F} & \partial_{z_1, z_2^*}^2 \mathcal{F} \\ \partial_{v''_+, z_1}^2 \mathcal{F} & \partial_{v''_+, v''_+}^2 \mathcal{F} & \partial_{v''_+, u''_-}^2 \mathcal{F} & \partial_{v''_+, z_2^*}^2 \mathcal{F} \\ \partial_{u''_-, z_1}^2 \mathcal{F} & \partial_{u''_-, v''_+}^2 \mathcal{F} & \partial_{u''_-, u''_-}^2 \mathcal{F} & \partial_{u''_-, z_2^*}^2 \mathcal{F} \\ \partial_{v_2, z_1}^2 \mathcal{F} & \partial_{v_2, v''_+}^2 \mathcal{F} & \partial_{v_2, u''_-}^2 \mathcal{F} & \partial_{z_2^*, z_2^*}^2 \mathcal{F} \end{pmatrix} \Big|_{\bar{\mathbf{r}}}.$$

Assumindo que exista uma transformação de variáveis unitária  $\Omega$  que leve  $\Omega^T \mathbf{Q} \Omega$  a ter uma forma diagonal, com autovalores  $\lambda_j$ , para  $j = 1, 2, 3, 4$ , é possível escrever a última integral como um produto de integrais gaussianas, cuja solução é vista abaixo,

$$\begin{aligned} \int \frac{d[\delta z_2^*]}{2\pi i} \frac{d[\delta u''_-]}{2\pi i} \frac{d[\delta v''_+]}{2\pi i} \frac{d[\delta z_1]}{2\pi i} e^{\frac{1}{2}\delta^2 \mathcal{F}} &= -\frac{1}{4\pi^2} \prod_{j=1}^4 \left\{ \int e^{\frac{1}{2}\lambda_j \zeta^2} d\zeta \right\} \\ &= -\frac{1}{4\pi^2} \prod_{j=1}^4 \sqrt{\frac{-2\pi}{\lambda_j}} = \frac{e^{i\sigma}}{\sqrt{|\det \mathbf{Q}|}}, \end{aligned} \quad (3.9)$$

em que  $\sigma$  é a fase total da integração. De um modo geral, pouca atenção é dada para a forma desta fase por causa de uma série de imprecisões do método. Em aplicações, entretanto, seu cálculo pode ser muito importante, mas, neste caso, argumentos físicos contribuem para a sua avaliação.

O valor de  $\det \mathbf{Q}$  pode ser calculado da seguinte maneira. A matriz  $\mathbf{Q}$ , escrita de forma explícita, é dada por

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 1 \\ -1 & \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{S}_+}{\partial(\bar{v}_+'' )^2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{S}_-}{\partial(\bar{u}_-'' )^2} & -1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.10)$$

cujo determinante é

$$\begin{aligned} \det \mathbf{Q} &= 1 - \left( \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{S}_+}{\partial(\bar{v}_+'' )^2} \right) \left( \frac{i}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathcal{S}_-}{\partial(\bar{u}_-'' )^2} \right) \\ &= 1 - \left[ \bar{M}_{uv} (\bar{M}_{vv})^{-1} \right] \left[ \bar{M}_{vu} (\bar{M}_{uu})^{-1} \right] \\ &= \frac{\bar{M}_{uu} \bar{M}_{vv} - \bar{M}_{uv} \bar{M}_{vu}}{\bar{M}_{vv} \bar{M}_{uu}} = \frac{1}{\bar{M}_{vv} \bar{M}_{uu}}. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Para chegarmos a este resultado foi utilizado a equivalência das trajetórias  $\bar{\mathbf{M}}^+ = \bar{\mathbf{M}}^-$  e a identidade  $\bar{M}_{uu} \bar{M}_{vv} - \bar{M}_{uv} \bar{M}_{vu} = 1$ . Esta última identidade se origina no teorema de Liouville, que expressa a conservação de volume do fluxo Hamiltoniano no espaço de fases [33]. Substituindo este resultado e utilizando a equação (2.47), a forma final para o valor esperado é

$$\langle z_0 | \hat{U}^\dagger \hat{A}_s \hat{U} | z_0 \rangle \approx A_t^{\text{sc}} = A(\bar{v}'', \bar{u}''). \quad (3.12)$$

Para calcular a média semiclássica para um operador  $\hat{A}$  precisamos obter as trajetórias, dada as condições iniciais  $u' = z_0$  e  $v' = z_0^*$ , evoluí-las até o tempo final  $T$ , e substituí-las na função  $A$ . Para facilitar futuras comparações, notamos que

$$\langle z_0 | \hat{U}^\dagger (\hat{a}^\dagger)^m (\hat{a})^n \hat{U} | z_0 \rangle \approx A_{\text{sc}}^{(mn)} = (\bar{v}'')^m (\bar{u}'')^n. \quad (3.13)$$

A fórmula acima aparenta ser muito simples, o que nos leva a crer que ela não será capaz

de mimetizar efeitos quânticos mais complexos.

## 3.2 Representação em série

Nesta seção, de fato, não realizaremos uma aproximação semiclássica. Na realidade, resolveremos formalmente a integral da equação (3.1) de modo que  $A_t$  seja representado por uma série infinita. Começaremos escrevendo a equação (3.1) como

$$A_t = e^{-|z_0|^2} \int \frac{d^2 z_1 d^2 z_2}{\pi^2} e^{-|z_1|^2 - |z_2^*|^2 + z_2^* z_1} A(z_2^*, z_1) k_-(z_0^*, z_2, T) k_+(z_1^*, z_0, T), \quad (3.14)$$

onde  $k_{\pm} \equiv e^{\Lambda} K_{\pm}$  é o propagador quântico não-normalizado. Para dar continuidade, realizaremos a seguinte mudança de variáveis:

$$z_j(x_j, p_j) = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (x_j + ip_j), \quad (3.15)$$

onde  $j = 1, 2$ . Assim, podemos definir

$$\Phi \equiv A(z_2^*[x_2, p_2], z_1[x_1, p_1]) k_-(z_0^*, z_2[x_2, p_2], T) k_+(z_1^*[x_1, p_1], z_0, T) e^{z_2^*[x_2, p_2] \cdot z_1[x_1, p_1]}. \quad (3.16)$$

Nessas variáveis, a equação (3.14) é dada por

$$A_t = e^{-|z_0|^2} \int \frac{dx_1 dx_2 dp_1 dp_2}{2\pi\hbar} e^{-\frac{1}{\hbar}(x_1^2 + p_1^2 + x_2^2 + p_2^2)} \Phi(p_1, x_1, p_2, x_2, T). \quad (3.17)$$

Utilizando o resultado (B.4), desenvolvido no Apêndice B, a equação (3.17) fica escrita como

$$A_t = e^{-|z_0|^2} \left[ e^{\hbar(\partial_{x_1}^2 + \partial_{p_1}^2)} e^{\hbar(\partial_{x_2}^2 + \partial_{p_2}^2)} \Phi(p_1, x_1, p_2, x_2, T) \right]_{(p_1, x_1, p_2, x_2)=0}. \quad (3.18)$$

Ao retornar às variáveis antigas, obtemos

$$A_t = e^{-|z_0|^2} \left[ e^{z_1, z_1^* \partial_{z_1, z_1^*}} e^{z_2, z_2^* \partial_{z_2, z_2^*}} \left( e^{z_2^* z_1} A(z_2^*, z_1) k_-(z_0^*, z_2, T) k_+(z_1^*, z_0, T) \right) \right]_{(z_2^*, z_2, z_1^*, z_1)=0}. \quad (3.19)$$

Para utilizar a fórmula acima, precisamos calcular os propagadores quânticos exatos e a função  $A$ , em seguida, efetuar as derivadas e, por fim, fazer todos os centros arbitrários

$(z_2^*, z_2, z_1^*, z_1)$  iguais a 0. Podemos avançar um pouco mais ao notar que as derivadas em  $z_2^*$  e  $z_1$  atuam apenas no termo  $e^{z_2^* z_1} A(z_2^*, z_1)$ . Para o caso particular  $A(\hat{a}^\dagger, \hat{a}) = (\hat{a}^\dagger)^m (\hat{a})^n$ , então  $A(z_2^*, z_1) = (z_2^*)^m (z_1)^n$  e podemos concluir que

$$\left[ \frac{\partial^{l+k}}{\partial z_2^{*l} \partial z_1^k} (e^{z_2^* z_1} A(z_2^*, z_1)) \right]_{(z_2^*, z_1)=0} = \frac{l! k! \Theta(l-m) \Theta(k-n) \delta[(l-m) - (k-n)]}{(l-m)!}, \quad (3.20)$$

em que  $\delta$  é a função delta de Kronecker e  $\Theta$  a função degrau de Heaviside. Utilizando o resultado acima, o valor esperado nesta representação em séries é dado por

$$\begin{aligned} \langle z_0 | \hat{U}^\dagger (\hat{a}^\dagger)^m (\hat{a})^n \hat{U} | z_0 \rangle &= A_{\text{rs}}^{(mn)} \\ &\equiv e^{-|z_0|^2} \left[ e^{\partial_{z_1^*, z_2}} \left[ k_-^{(m)}(z_0^*, z_2, T) k_+^{(n)}(z_1^*, z_0, T) \right] \right]_{(z_2, z_1^*)=0}, \end{aligned} \quad (3.21)$$

em que  $k_-^{(m)} = \partial_{z_2}^m k_-(z_0^*, z_2, T)$  e  $k_+^{(n)} = \partial_{z_1^*}^n k_+(z_1^*, z_0, T)$ . Esse resultado facilita a utilização do método, pois diminui o número de derivadas que precisam ser calculadas. No entanto, essa aproximação pode ser extremamente difícil de implementar caso o propagador não possa ser expresso analiticamente. Observe que as fórmulas (3.19) e (3.21) são exatas, dessa forma, não precisamos analisar o tamanho dos termos e a convergência da série, no entanto, quando aplicarmos as fórmulas acima, discutiremos com mais cuidado esses elementos.

### 3.3 Clássico-estatístico

Nessa seção faremos um contraponto às expressões desenvolvidas anteriormente, uma vez que calcularemos as médias exclusivamente através da Mecânica Clássica, conforme desenvolvidas na referência [29]. Definiremos a função clássica  $\mathcal{A}(x, p) = A(v[x, p], u[x, p])$ , em que

$$u = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{x}{b} + i \frac{p}{c} \right) \quad \text{e} \quad v = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{x}{b} - i \frac{p}{c} \right). \quad (3.22)$$

A média clássica desta função, no formalismo Liouvilliano, é dada por

$$\langle \mathcal{A}(x, p) \rangle_{\text{cl}} = \int dx_i dp_i \rho(x_i, p_i) \mathcal{A}[x(x_i, p_i, t), p(x_i, p_i, t)], \quad (3.23)$$

em que  $\rho(x_i, p_i)$  é a densidade clássica de probabilidade inicial, que deve ser escolhida convenientemente para representar o análogo clássico de um estado coerente. Escolhemos uma distribuição gaussiana de larguras  $b$ , ao longo do eixo de posição, e  $c$ , ao longo do momento, centrada no ponto  $(x_0, p_0)$  (que deve ser equivalente ao centro do estado coerente  $|z_0\rangle$ ). Explicitamente, escrevemos

$$\rho(x_i, p_i) = \frac{e^{-\frac{(x_i-x_0)^2}{b^2}} e^{-\frac{(p_i-p_0)^2}{c^2}}}{\pi\hbar}. \quad (3.24)$$

Substituindo na integral (3.23) e utilizando a equação (B.4) do apêndice B, obtemos

$$\langle \mathcal{A}(x, p) \rangle_{\text{cl}} = e^{\frac{b^2}{4}\partial_{x_0}^2 + \frac{c^2}{4}\partial_{p_0}^2} \mathcal{A}[x(x_0, p_0, t), p(x_0, p_0, t)] \quad (3.25)$$

ou, equivalentemente,

$$\langle A(v, u) \rangle_{\text{cl}} = e^{\partial_{z_0^*, z_0}^2} A[v(z_0^*, z_0, t), u(z_0^*, z_0, t)]. \quad (3.26)$$

A média clássico-estatística para uma função  $A$  pode ser obtida substituindo as trajetórias  $u(t)$  e  $v(t)$ , dada as condições iniciais  $u(0) = z_0$  e  $v(0) = z_0^*$ , na função clássica e aplicando as derivadas nos pontos iniciais. Para o caso particular  $A(v, u) = v^m u^n$ , temos

$$\langle v^m u^n \rangle_{\text{cl}} = A_{\text{cl}}^{(mn)} \equiv e^{\partial_{z_0^*, z_0}^2} [v(z_0^*, z_0, t)]^m [u(z_0^*, z_0, t)]^n. \quad (3.27)$$

Uma outra maneira de interpretar o cálculo realizado nessa seção é através do formalismo de Weyl-Wigner [21]. Nesse caso, na expressão (3.23),  $\rho(x_i, p_i)$  pode ser interpretado como a função de Wigner de um estado coerente  $|z_0\rangle$ , enquanto que  $\mathcal{A}(x, p)$  é a transformada de Weyl de um operador  $\hat{A}$ , mantendo somente o termo de ordem zero, sem correções em  $\hbar$ .

### 3.4 Considerações sobre os métodos

Esse capítulo é o mais importante para a dissertação, pois nele está contido todo o desenvolvimento das aproximações aqui utilizadas. As três fórmulas apresentadas foram desenvolvidas utilizando conceitos completamente diferentes. Acreditamos que as

duas primeiras expressões trabalhadas, equações (3.12) e (3.19), sejam originais. A fórmula (3.26) já havia sido desenvolvida em [29].

A aproximação semiclássica (3.12) foi elaborada utilizando o método do ponto de sela, em que partimos do pressuposto que estamos no limite em que  $\hbar \rightarrow 0$ . O modo de utilizá-la é muito simples: para calcular médias quânticas, basta aplicar o tratamento clássico prescrito ao sistema físico, e encontrar a trajetória com condições iniciais  $u(0) = z_0$  e  $v(0) = z_0^*$ . Os valores calculados  $u(T)$  e  $v(T)$  devem ser diretamente utilizados na fórmula (3.12) para obter o valor aproximado da média quântica. Note que este resultado está estreitamente ligado ao Teorema de Ehrenfest [30]; médias quânticas de posição e momento, por exemplo, seguem, aproximadamente, trajetórias clássicas.

Para a aproximação (3.19), utilizamos algumas manipulações matemáticas que possibilitou transformar a integral (3.1) em uma série de derivadas. A fórmula (3.19) é uma representação em série da média (3.1), em que aproximações podem ser implementadas ao se efetuar o truncamento da expansão do termo exponencial. Essa aproximação se mostra interessante, pois o resultado pode ser melhorado ao se adicionar mais termos à série, porém uma das maiores inconveniências é a necessidade de utilizar o propagador quântico exato, que, na maioria das vezes, não é fácil de se obter. Mesmo assim, em geral, a equação (3.19) pode ser mais simples que a expressão exata, pois não envolve nenhuma equação diferencial.

Em relação à expressão clássico-estatística (3.27), fizemos simplesmente uma analogia ao cálculo da média quântica utilizando apenas a teoria clássica.

No próximo capítulo utilizaremos todas estas aproximações para calcular a dinâmica do valor esperado em alguns sistemas de interesse e compararemos com o resultado quântico exato. Assim, poderemos estudar quais são as vantagens e limitações de cada uma delas. Por termos utilizado aproximações tão distintas, será interessante observar em qual regime de  $\hbar$  as fórmulas melhor se adequam.

# Capítulo 4

## Aplicações

Neste capítulo, utilizaremos as aproximações desenvolvidas no Capítulo 3 para calcular o valor médio dos observáveis  $\hat{X}$ ,  $\hat{P}$ ,  $\hat{X}^2$ ,  $\hat{P}^2$  e  $\mathcal{S}_{\hat{X},\hat{P}}[\hat{X}^2\hat{P}]$ , para os seguintes sistemas: partícula livre, OHS e oscilador quártico. O elemento  $\mathcal{S}_{\hat{X},\hat{P}}$  é um superoperador que simetriza qualquer operador escrito na forma  $\hat{X}^m\hat{P}^n$ , formalmente definido como

$$\mathcal{S}_{\hat{X},\hat{P}} = e^{-\frac{1}{2}[\hat{X},\hat{P}]} \partial_{\hat{X}} \partial_{\hat{P}}. \quad (4.1)$$

Para utilizá-lo, devemos expandir a equação acima e aplicá-la no operador que desejamos simetrizar. No nosso caso, para  $\hat{X}^2\hat{P}$ , temos

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{\hat{X},\hat{P}}[\hat{X}^2\hat{P}] &= \sum_k \frac{\left(\frac{-i\hbar}{2}\right)^k}{k!} \partial_{\hat{X}}^k \partial_{\hat{P}}^k \hat{X}^2\hat{P} \\ &= \left[ 1 - \frac{i\hbar}{2} \partial_{\hat{X}} \partial_{\hat{P}} + \dots \right] \hat{X}^2\hat{P} = \hat{X}^2\hat{P} - i\hbar \hat{X} \\ &= \frac{\hat{X}^2\hat{P} + \hat{X}\hat{P}\hat{X} + \hat{P}\hat{X}^2}{3}. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Os cinco operadores acima foram escolhidos para sistematizar o cálculo e a análise de resultados. Os dois primeiros são os operadores usuais que definem uma trajetória média. Os dois seguintes podem ser utilizados para calcular a variância, e o último, que convenientemente definimos como  $\hat{\Sigma} \equiv \mathcal{S}_{\hat{X},\hat{P}}[\hat{X}^2\hat{P}]$ , foi selecionado por apresentar uma combinação assimétrica simples de posição e momento.



Escrevendo esses operadores, de forma ordenada, em função dos operadores escadas (2.3), obtemos, ao definir  $\hat{A}^{(mn)} \equiv (\hat{a}^\dagger)^m (\hat{a})^n$ ,

$$\begin{aligned}
\hat{X} &= \frac{b}{\sqrt{2}} \left( \hat{A}^{(01)} + \hat{A}^{(10)} \right), \\
\hat{P} &= -i \frac{c}{\sqrt{2}} \left( \hat{A}^{(01)} - \hat{A}^{(10)} \right), \\
\hat{X}^2 &= \frac{b^2}{2} \left( \hat{A}^{(02)} + \hat{A}^{(20)} + 2\hat{A}^{(11)} + 1 \right), \\
\hat{P}^2 &= \frac{-c^2}{2} \left( \hat{A}^{(02)} + \hat{A}^{(20)} - 2\hat{A}^{(11)} - 1 \right), \\
\hat{\Sigma} &= -i \frac{b\hbar}{\sqrt{8}} \left( \hat{A}^{(03)} - \hat{A}^{(30)} + \hat{A}^{(12)} - \hat{A}^{(21)} + \hat{A}^{(01)} - \hat{A}^{(10)} \right).
\end{aligned} \tag{4.3}$$

Para todos os cálculos numéricos efetuados neste capítulo, escolhemos  $m = \omega_0 = \zeta = 1$  e para o rótulo do estado coerente  $z_0 = \frac{1+i}{\sqrt{2\hbar}}$ . O tempo de evolução  $T$  e  $\hbar$  são parâmetros livres.

## 4.1 Cálculo quântico exato

Nesta seção, calculamos o valor esperado exato utilizando as diretrizes da Mecânica Quântica. Para tal, encontramos as equações de movimento para os operadores  $\hat{a}(t)$  e  $\hat{a}^\dagger(t)$  via equação de Heisenberg, substituímos no operador em questão e efetuamos o cálculo do valor esperado. A equação de Heisenberg para os operadores escada, que não dependem explicitamente do tempo, é definida como

$$\frac{d}{dt} \hat{a}(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{a}] \quad \text{e} \quad \frac{d}{dt} \hat{a}^\dagger(t) = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{a}^\dagger]. \tag{4.4}$$

As condições iniciais, para todos os potenciais, são dadas por  $\hat{a}(0) = \hat{a}_s$  e  $\hat{a}^\dagger(0) = \hat{a}_s^\dagger$ , cujas médias avaliadas no estado  $|z_0\rangle$  se reduzem a

$$\langle \hat{a}_s \rangle = z_0 \quad \text{e} \quad \langle \hat{a}_s^\dagger \rangle = z_0^*. \tag{4.5}$$

## OHS

O Hamiltoniano para o OHS, escrito em função de  $\hat{a}$  e  $\hat{a}^\dagger$ , é dado pela equação (2.1). Utilizando a equação (4.4) e as condições iniciais (4.5), encontramos

$$\hat{a}(t) = \hat{a}_s e^{-i\omega_0 t} \quad \text{e} \quad \hat{a}^\dagger(t) = \hat{a}_s^\dagger e^{i\omega_0 t}. \quad (4.6)$$

O OHS é um dos poucos casos que apresenta uma expressão fechada para o valor esperado do operador  $\hat{A}_t^{(mn)} \equiv \hat{U}^\dagger(\hat{a}^\dagger)^m(\hat{a})^n\hat{U}$ , cuja fórmula é dada por

$$A_{\text{mq}}^{(mn)} \equiv \langle \hat{A}_t^{(mn)} \rangle = (z_0^*)^m (z_0)^n e^{i(m-n)\omega_0 T}. \quad (4.7)$$

A partir deste resultado, todos os operadores da equação (4.3) podem ser diretamente obtidos.

## Partícula livre

O Hamiltoniano da partícula livre é dado pela equação (2.48). Utilizando novamente a equação de Heisenberg (4.4) e as condições iniciais (4.5), obtemos

$$\hat{a}(t) = -\frac{i\omega_0}{2}(\hat{a}_s - \hat{a}_s^\dagger)t + \hat{a}_s \quad \text{e} \quad \hat{a}^\dagger(t) = -\frac{i\omega_0}{2}(\hat{a}_s - \hat{a}_s^\dagger)t + \hat{a}_s^\dagger. \quad (4.8)$$

Diferentemente do potencial harmônico, esse Hamiltoniano não apresenta uma fórmula *ordenada* fechada para o valor esperado de  $\hat{A}_t^{(mn)}$  em função de  $\hat{a}_s$  e  $\hat{a}_s^\dagger$ . Então, para calcular a média dos operadores selecionados substituiremos a equação acima no conjunto

de equações (4.3) e calculamos a média no estado coerente  $|z_0\rangle$ , obtendo

$$x_t^{\text{mq}} \equiv \langle \hat{X}(T) \rangle = \frac{b}{\sqrt{2}} [-i\omega_0(z_0 - z_0^*)T + z_0 + z_0^*],$$

$$p_t^{\text{mq}} \equiv \langle \hat{P}(T) \rangle = -i\frac{c}{\sqrt{2}}(z_0 - z_0^*),$$

$$\tilde{x}_t^{\text{mq}} \equiv \langle \hat{X}(T)^2 \rangle = (x_t^{\text{mq}})^2 + \frac{b^2\omega_0^2 T^2}{2},$$

$$\tilde{p}_t^{\text{mq}} \equiv \langle \hat{P}(T)^2 \rangle = (p_t^{\text{mq}})^2 + \frac{c^2}{2},$$

$$\sigma_t^{\text{mq}} \equiv \langle \hat{\Sigma}(T) \rangle = (x_t^{\text{mq}})^2 p_t^{\text{mq}} - i\frac{b\hbar}{\sqrt{8}} [2i\omega_0 T(z_0 + z_0^*) + (2\omega_0^2 T^2 - 1)(z_0 - z_0^*)].$$

## Oscilador quártico

O Hamiltoniano do modelo quártico é dado pela equação (2.57). Ao aplicar a equação de Heisenberg (4.4) para  $\hat{a}$  e  $\hat{a}^\dagger$  obtemos, respectivamente,

$$\dot{\hat{a}} = -i\tilde{\omega} (\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1) \hat{a} \quad \text{e} \quad \dot{\hat{a}^\dagger} = i\tilde{\omega} \hat{a}^\dagger (\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1). \quad (4.9)$$

A equação diferencial acima pode ser resolvida ao observar que o operador  $\hat{a}^\dagger \hat{a}$  é independente do tempo. Então, aplicando as condições de contorno (4.5), obtemos

$$\hat{a}(t) = e^{-i\tilde{\omega}(\hat{a}_s^\dagger \hat{a}_s + 1)t} \hat{a}_s \quad \text{e} \quad \hat{a}^\dagger(t) = \hat{a}_s^\dagger e^{i\tilde{\omega}(\hat{a}_s^\dagger \hat{a}_s + 1)t}. \quad (4.10)$$

Analogamente aos outros potenciais, as médias são dadas pelas seguintes equações:

$$\begin{aligned}
x_t^{\text{mq}} &= \frac{b}{\sqrt{2}} \left[ z_0 e^{-i\tilde{\omega}T - |z_0|^2(1-e^{-i\tilde{\omega}T})} + z_0^* e^{i\tilde{\omega}T - |z_0|^2(1-e^{i\tilde{\omega}T})} \right], \\
p_t^{\text{mq}} &= -i \frac{c}{\sqrt{2}} \left[ z_0 e^{-i\tilde{\omega}T - |z_0|^2(1-e^{-i\tilde{\omega}T})} - z_0^* e^{i\tilde{\omega}T - |z_0|^2(1-e^{i\tilde{\omega}T})} \right], \\
\tilde{x}_t^{\text{mq}} &= \frac{b^2}{2} \left[ (z_0)^2 e^{-3i\tilde{\omega}T - |z_0|^2(1-e^{-2i\tilde{\omega}T})} + (z_0^*)^2 e^{3i\tilde{\omega}T - |z_0|^2(1-e^{2i\tilde{\omega}T})} \right. \\
&\quad \left. + 2z_0 z_0^* + 1 \right], \\
\tilde{p}_t^{\text{mq}} &= -\frac{c^2}{2} \left[ (z_0)^2 e^{-3i\tilde{\omega}T - |z_0|^2(1-e^{-2i\tilde{\omega}T})} + (z_0^*)^2 e^{3i\tilde{\omega}T - |z_0|^2(1-e^{2i\tilde{\omega}T})} \right. \\
&\quad \left. - 2z_0 z_0^* - 1 \right], \\
\sigma_t^{\text{mq}} &= -i \frac{b\hbar}{\sqrt{8}} \left[ (z_0)^3 e^{-6i\tilde{\omega}T - |z_0|^2(1-e^{-3i\tilde{\omega}T})} + (z_0^*)^3 e^{6i\tilde{\omega}T - |z_0|^2(1-e^{3i\tilde{\omega}T})} \right. \\
&\quad + (z_0)^2 z_0^* e^{-2i\tilde{\omega}T - |z_0|^2(1-e^{-i\tilde{\omega}T})} - (z_0^*)^2 z_0 e^{2i\tilde{\omega}T - |z_0|^2(1-e^{i\tilde{\omega}T})} \\
&\quad \left. + z_0 e^{-i\tilde{\omega}T - |z_0|^2(1-e^{-i\tilde{\omega}T})} - z_0^* e^{i\tilde{\omega}T - |z_0|^2(1-e^{i\tilde{\omega}T})} \right].
\end{aligned}$$

Com estas últimas expressões, completamos o cálculo exato da média dos cinco operadores (4.3), para os três sistemas físicos considerados.

## 4.2 Fórmula semiclássica

A primeira aproximação utilizada para calcular a dinâmica do valor médio é aquela obtida via método do ponto de sela (3.12) ou (3.13). Dado um Hamiltoniano quântico, podemos obter as trajetórias clássicas utilizando as equações de Hamilton (2.31) e as condições de contorno da trajetória real  $u' = z_0$  e  $v' = z_0^*$ . A aproximação é obtida ao substituirmos o valor calculado de  $u''$  e  $v''$  na equação (3.12). Todas as equações de movimento para os sistemas estudados já foram tratadas na Seção 2.3, portanto aqui apresentaremos diretamente as trajetórias contribuintes.

### OHS

Utilizando as equações de movimento (2.54) e impondo as condições iniciais obtemos

$$\bar{u}(t) = z_0 e^{-i\omega_0 t} \quad \text{e} \quad \bar{v}(t) = z_0^* e^{i\omega_0 t}. \quad (4.11)$$

Para esse sistema é possível encontrar uma solução fechada para um operador escrito na forma  $\hat{A}^{(mn)}$ . Substituindo a equação (4.11) na fórmula (3.13), obtemos

$$\langle z_0 | \hat{U}^\dagger \hat{A}^{(mn)} \hat{U} | z_0 \rangle \approx A_{\text{sc}}^{(mn)} = (z_0)^m (z_0^*)^n e^{i(m-n)\omega_0 T}, \quad (4.12)$$

cujo resultado é idêntico ao quântico exato  $A_{\text{sc}}^{(mn)} = A_{\text{mq}}^{(mn)}$ . Logo, todos os operadores (4.3) calculados com esta aproximação concordam com o resultado exato, pelo menos para o OHS, como esperado.

## Partícula livre

Para a partícula livre, a trajetória real é obtida aplicando as condições de contorno na equação (2.49) e é dada por

$$\bar{u}(t) = -\frac{i\omega_0}{2}(z_0 - z_0^*)t + z_0 \quad e \quad \bar{v}(t) = -\frac{i\omega_0}{2}(z_0 - z_0^*)t + z_0^*. \quad (4.13)$$

Substituindo a equação acima na fórmula (3.12) e aplicando no conjunto de equações (4.3), obtemos

$$\begin{aligned} \langle \hat{X}(T) \rangle &\approx x_t^{\text{sc}} = x_t^{\text{mq}}, \\ \langle \hat{P}(T) \rangle &\approx p_t^{\text{sc}} = p_t^{\text{mq}}, \\ \langle \hat{X}^2(T) \rangle &\approx \tilde{x}_t^{\text{sc}} = \tilde{x}_t^{\text{mq}} + \frac{b^2}{2}\omega_0^2 T^2, \\ \langle \hat{P}^2(T) \rangle &\approx \tilde{p}_t^{\text{sc}} = \tilde{p}_t^{\text{mq}}, \\ \langle \hat{\Sigma}(T) \rangle &\approx \sigma_t^{\text{sc}} = \sigma_t^{\text{mq}} + i\frac{b\hbar\omega_0 T}{\sqrt{2}} [i(z_0 + z_0^*) + \omega_0 T(z_0 - z_0^*)], \end{aligned} \quad (4.14)$$

em que enfatizamos que o símbolo  $\approx$  foi inserido para indicar que média foi calculada via aproximação (3.12). Para a partícula livre notamos que os resultados semiclássicos não concordam completamente com o quântico, como vemos para as médias dos operadores  $\hat{X}^2$  e  $\hat{\Sigma}$ . Porém, no limite em questão, esta discrepância torna-se desprezível, já que  $b \rightarrow 0$  quando  $\hbar \rightarrow 0$ .

A média semiclássica é igual à exata para os operadores  $\hat{X}$ ,  $\hat{P}$  e  $\hat{P}^2$ . O resultado

referente aos dois primeiros observáveis pode ser explicado ao observarmos que

$$\begin{aligned} A_{\text{mq}}^{(mn)} &= \langle z_0 | \left[ -\frac{i\omega_0}{2}(\hat{a}_s - \hat{a}_s^\dagger)t + \hat{a}_s^\dagger \right]^m \left[ -\frac{i\omega_0}{2}(\hat{a}_s - \hat{a}_s^\dagger)t + \hat{a}_s \right]^n | z_0 \rangle \\ &\neq A_{\text{sc}}^{mn} = \left[ -\frac{i\omega_0}{2}(z_0 - z_0^*)t + z_0^* \right]^m \left[ -\frac{i\omega_0}{2}(z_0 - z_0^*)t + z_0 \right]^n, \end{aligned}$$

exceto quando  $m = 1$  e  $n = 0$  ou  $m = 0$  e  $n = 1$ . Para o operador  $\hat{P}^2$  o valor esperado calculado semiclassicamente foi exato, pois esse observável está relacionado com a energia do sistema, que é uma quantidade conservada,

$$\langle \hat{P}^2(T) \rangle = \langle \hat{P}^2(0) \rangle = \frac{c^2}{2} (\langle \hat{a}_s^2 \rangle + \langle (\hat{a}_s^\dagger)^2 \rangle - 2\langle \hat{a}_s^\dagger \hat{a}_s \rangle).$$

Para os outros observáveis, em que notamos que os resultados não coincidem, verificamos que esse fato é consequência da fórmula semiclássica não ser capaz de reproduzir efeitos oriundos da não-comutação de operadores, conforme vemos na penúltima equação. Lembramos, entretanto, que poderíamos esperar que o cálculo fosse equivalente ao exato, já que, conforme comentamos no final da Seção 3.2.1, as aproximações são baseadas em expansões até segunda ordem, mesma ordem do Hamiltoniano em questão. A imprecisão decorre do fato de termos tratado a função  $A(z_2^*, z_1, T)$  na equação (3.4) como uma constante. Se a tratarmos exatamente, expandindo-a também, o resultado deve se tornar idêntico ao exato.

## Oscilador quártico

Integrando a equação (2.58) e aplicando as condições iniciais, obtemos

$$u(t) = z_0 e^{-i\tilde{\omega}(1+|z_0|^2)t} \quad \text{e} \quad v(t) = z_0^* e^{i\tilde{\omega}(1+|z_0|^2)t}. \quad (4.15)$$

A aproximação semiclássica é dada ao substituir a equação acima na fórmula (3.13), cujo resultado é

$$A_{\text{sc}}^{(mn)} = (z_0)^m (z_0^*)^n e^{i(m-n)\tilde{\omega}(1+|z_0|^2)T}. \quad (4.16)$$

A partir desta equação, todas as médias sobre os operadores (4.3) são obtidas:

$$\begin{aligned}
x_t^{\text{sc}} &= \frac{b}{\sqrt{2}} \left( z_0^* e^{-i\tilde{\omega}(1+|z_0|^2)T} + z_0 e^{i\tilde{\omega}(1+|z_0|^2)T} \right), \\
p_t^{\text{sc}} &= -i \frac{c}{\sqrt{2}} \left[ z_0^* e^{-i\tilde{\omega}(1+|z_0|^2)T} - z_0 e^{i\tilde{\omega}(1+|z_0|^2)T} \right], \\
\tilde{x}_t^{\text{sc}} &= \frac{b^2}{2} \left[ (z_0^*)^2 e^{-2i\tilde{\omega}(1+|z_0|^2)T} + (z_0)^2 e^{2i\tilde{\omega}(1+|z_0|^2)T} + 2z_0^* z_0 + 1 \right], \\
\tilde{p}_t^{\text{sc}} &= \frac{-c^2}{2} \left[ (z_0^*)^2 e^{-2i\tilde{\omega}(1+|z_0|^2)T} + (z_0)^2 e^{2i\tilde{\omega}(1+|z_0|^2)T} - 2z_0^* z_0 - 1 \right], \\
\sigma_t^{\text{sc}} &= -i \frac{b\hbar}{\sqrt{8}} \left[ (z_0^*)^3 e^{-3i\tilde{\omega}(1+|z_0|^2)T} - (z_0)^3 e^{3i\tilde{\omega}(1+|z_0|^2)T} + (z_0)(z_0^*)^2 e^{-i\tilde{\omega}(1+|z_0|^2)T} \right. \\
&\quad \left. - (z_0)^2 (z_0^*) e^{i\tilde{\omega}(1+|z_0|^2)T} + z_0^* e^{-i\tilde{\omega}(1+|z_0|^2)T} - z_0 e^{i\tilde{\omega}(1+|z_0|^2)T} \right].
\end{aligned}$$

O resultado acima é claramente diferente da média exata. Para  $\hat{A} = \hat{A}^{mn}$ , observamos que

$$\begin{aligned}
A_{\text{mq}}^{(mn)} &= \langle z_0 | \left[ \hat{a}_s^\dagger e^{-i\tilde{\omega}(\hat{a}_s^\dagger \hat{a}_s + 1)t} \right]^m \left[ e^{i\tilde{\omega}(\hat{a}_s^\dagger \hat{a}_s + 1)t} \hat{a}_s \right]^n | z_0 \rangle \\
&\neq A_{\text{sc}}^{(mn)} = \left[ z_0 e^{i\tilde{\omega}(1+|z_0|^2)T} \right]^m \left[ z_0^* e^{-i\tilde{\omega}(1+|z_0|^2)T} \right]^n,
\end{aligned}$$

em que fica evidente a falha da aproximação ao tentar imitar as propriedades do formalismo quântico. Adiante, mostraremos alguns resultados obtidos numericamente para as expressões acima, em que a comparação dos métodos fica mais clara.

### 4.3 Representação em série

Para a representação em série, não foi possível avançar analiticamente (de forma simples) nos modelos da **partícula livre** e **quártico**. Os resultados para estes sistemas foram resolvidos numericamente e os gráficos comparativos se encontram na Seção 4.5. Aqui, mostraremos apenas o exemplo do OHS, no qual foi possível obter uma fórmula analítica igual à exata.

## OHS

Para encontrar o valor das médias, simplesmente substituímos o propagador (2.56) na equação (3.21). Ao calcular as derivadas conforme a fórmula prescreve, encontramos uma série que pode ser reagrupada. O cálculo é efetuado da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}\hat{A}_{\text{rs}}^{(mn)} &= e^{-|z_0|^2} (z_0^*)^m z_0^n e^{i\omega_0(m-n)T} \left[ \sum_k \frac{\partial^k_{z_1^*, z_2}}{k!} \left( e^{z_2 z_0^* e^{i\omega_0 T}} e^{z_1^* z_0 e^{-i\omega_0 T}} \right) \right]_{(z_2, z_1^*)=0} \\ &= e^{-|z_0|^2} (z_0^*)^m z_0^n e^{i\omega_0(m-n)T} \sum_k \frac{(z_0^* z_0)^k}{k!} = (z_0^*)^m z_0^n e^{i\omega_0(m-n)T}.\end{aligned}\quad (4.17)$$

Como esperado, este concorda com o resultado exato, pois pudemos somar todos os termos da série.

## 4.4 Clássico-estatístico

Para esta seção, por simplicidade calculamos o valor esperado clássico-estatístico diretamente nas variáveis  $x$  e  $p$ , dado pela equação (3.25), ao invés da fórmula (3.26), escrita em função das variáveis  $u$  e  $v$ . Obviamente, uma expressão pode ser convertida para a outra através de (3.22). Para fazer analogia ao rótulo do estado coerente  $|z_0\rangle$ , definimos as condições iniciais como  $x_0 = x(z_0^*, z_0)$  e  $p_0 = p(z_0^*, z_0)$  na equação (3.24).

## OHS

A Hamiltoniana do oscilador harmônico, escrita em função de  $x$  e  $p$ , é dada por

$$H_{\text{oh}} = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2. \quad (4.18)$$

As equações de movimento, dadas as condições iniciais, são as seguintes:

$$x(t) = x_0 \cos(\omega_0 t) + \frac{p_0}{m\omega_0} \sin(\omega_0 t) \quad \text{e} \quad p(t) = p_0 \cos(\omega_0 t) - m\omega_0 x_0 \sin(\omega_0 t). \quad (4.19)$$



Aplicando à equação (3.25) o resultado acima e convertendo para  $z_0^*$  e  $z_0$ , obtemos

$$\begin{aligned}\langle x(T) \rangle_{\text{cl}} &= x_t^{\text{mq}}, \\ \langle p(T) \rangle_{\text{cl}} &= p_t^{\text{mq}}, \\ \langle x^2(T) \rangle_{\text{cl}} &= \tilde{x}_t^{\text{mq}}, \\ \langle p^2(T) \rangle_{\text{cl}} &= \tilde{p}_t^{\text{mq}}, \\ \langle x^2(T)p(T) \rangle_{\text{cl}} &= \sigma_t^{\text{mq}}.\end{aligned}$$

Como os estados coerentes são descritos como uma combinação de auto-estados do OHS, de tal forma que o valor médio segue a dinâmica clássica, é esperado que uma aproximação clássico-estatística seja capaz de reproduzir o resultado quântico para esse modelo.

## Partícula livre

A hamiltoniana da partícula livre pode ser escrita como

$$H_{\text{pl}} = \frac{p^2}{2m}, \quad (4.20)$$

cujas equações de movimento são as seguintes:

$$x(t) = x_0 + \frac{p_0 t}{m} \quad \text{e} \quad p(t) = p_0. \quad (4.21)$$

Utilizando a equação (3.25), também encontramos resultados *idênticos* aos exatos. Como a função de onda se propaga acompanhando a trajetória clássica, sem se auto-interferir, é de se esperar que a média clássico-estatística fosse igual à exata.

## Oscilador quártico

No caso quártico, temos

$$H_{\text{q}} = \left( \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x \right)^2, \quad (4.22)$$

que resulta nas seguintes equações de movimento:

$$x(t) = x_0 \cos \left[ \omega_0 t \left( \frac{p_0^2 + m^2 \omega_0^2 x_0^2}{m} \right) \right] + \frac{p_0}{m \omega_0} \sin \left[ \omega_0 t \left( \frac{p_0^2 + m^2 \omega_0^2 x_0^2}{m} \right) \right], \quad (4.23)$$

$$p(t) = p_0 \cos \left[ \omega_0 t \left( \frac{p_0^2 + m^2 \omega_0^2 x_0^2}{m} \right) \right] - m \omega_0 x_0 \sin \left[ \omega_0 t \left( \frac{p_0^2 + m^2 \omega_0^2 x_0^2}{m} \right) \right]. \quad (4.24)$$

Para esse potencial foi mais conveniente calcularmos a integral da equação (3.23) a utilizar a equação (3.25). As integrais puderam ser resolvidas analiticamente, no entanto, como as expressões eram complicadas de analisar, preferimos nos restringir a uma comparação gráfica mostrada na seção seguinte.

## 4.5 Comparação dos métodos

### OHS

Todas as aproximações aqui utilizadas para calcular a dinâmica do valor esperado, para o potencial harmônico, apresentaram resultados idênticos ao quântico. Devemos nos lembrar que a motivação inicial para desenvolver a base de estados coerentes foi, justamente, encontrar uma base em que a média de posição e de momento mimetizasse o análogo clássico. Além do mais, esses estados são autofunções do operador  $\hat{a}$  que, para o OHS, possui dependência temporal extremamente simples. Esta simplicidade da solução das equações de movimento implica na ausência da necessidade de considerar comutações entre os operadores escada ao calcular a média de  $\hat{U}^\dagger \hat{A}^{(mn)} \hat{U}$ .

### Partícula livre

Em relação à partícula livre, apenas a aproximação clássico-estatística apresentou resultados equivalentes aos exatos para todos os operadores. Esse método calcula a média de uma função da posição e momento, dada uma distribuição inicial de probabilidade. Uma das explicações para o resultado positivo é que, para esse potencial, a função de onda média se propaga acompanhando a trajetória clássica sem auto-interferir. Neste cenário, ao adicionar esse elemento probabilístico à Mecânica Clássica, ela não apresenta

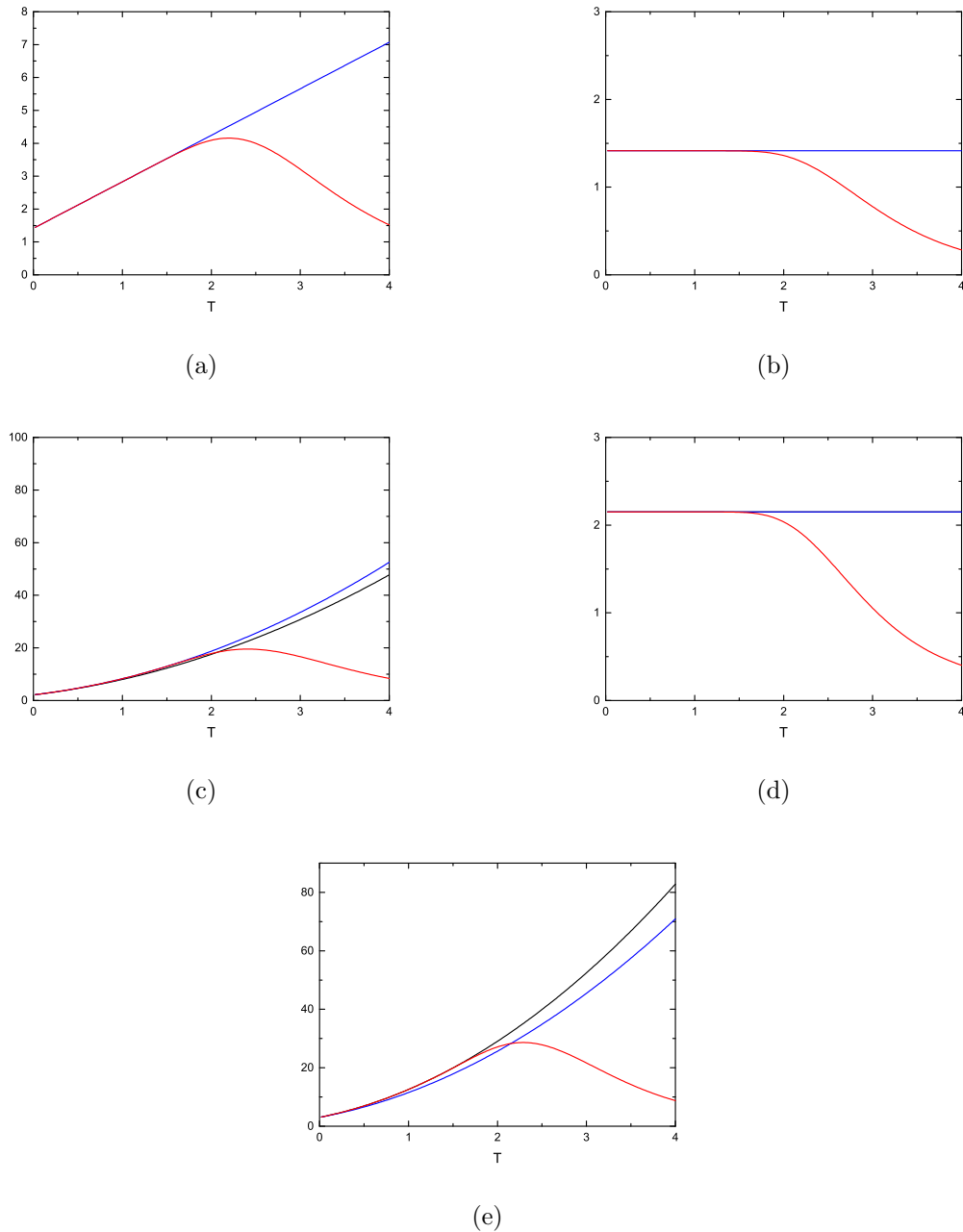


Figura 4.1: Comparação entre médias de operadores segundo métodos de cálculo diferentes para a partícula livre. O resultado quântico exato é representado pela curva preta, o semiclássico pela curva azul e o via representação de série pela vermelha. Lembramos que a média clássica é idêntica à quântica exata. No gráfico (a), mostramos os cálculos relativos a  $\hat{X}$ . Em seguida, nos gráficos (b)-(e), apresentamos as curvas para  $\hat{P}$ ,  $\hat{X}^2$ ,  $\hat{P}^2$  e  $\hat{\Sigma}$ , respectivamente. Para o cálculo via representação em série, truncamos a expansão em 65 termos. Utilizamos  $\hbar = 0,03$ .

dificuldades para mimetizar a Mecânica Quântica.

O método semiclássico não apresentou resultados exatos para todos os operadores estudados. Conforme já comentamos, podemos observar que esta abordagem não leva em consideração a comutação entre  $\hat{a}$  e  $\hat{a}^\dagger$ . Para ilustrar esta afirmação, note, por exemplo que  $\langle z_0 | \hat{U}^\dagger \hat{a}^2 \hat{U} | z_0 \rangle = \langle z_0 | \hat{a}(t)^2 | z_0 \rangle$ . Por outro lado, segundo a fórmula semiclássica, este termo é aproximado por

$$u^2 = \langle z_0 | \hat{a} | z_0 \rangle \langle z_0 | \hat{a} | z_0 \rangle = \langle z_0 | \hat{A}^{01} | z_0 \rangle \langle z_0 | \hat{A}^{01} | z_0 \rangle, \quad (4.25)$$

que ignora claramente a comutação entre  $\hat{a}_s$  e  $\hat{a}_s^\dagger$  [veja a equação (4.8)]. Para os operadores em que a aproximação foi fiel ao cálculo exato, observamos alguns elementos simplificatórios que cancelam os termos referentes à não-comutação. Para  $\hat{X}$  e  $\hat{P}$  não é necessário a comutação entre os operadores escada, como visto através das equações (4.3) e (4.8), e  $P^2$  é um operador constante, representando justamente, a energia do sistema. Para os outros dois observáveis, como pode ser observado pela figura 4.1, quanto maior o expoente, pior é a aproximação. Ao aumentar a ordem dos operadores, estamos adicionando mais operações de comutação que, ao serem ignoradas, resultam em um erro maior. No limite de  $\hbar$  baixo, as discrepâncias observadas na equação (4.14), tendem a zero, o que causa uma melhora progressiva ao diminuir  $\hbar$ , conforme mostramos na figura 4.2.

A média calculada via representação em série é um caso um pouco mais complexo. Observamos, pela figura 4.1, que a série não converge para valores grandes de  $T$ , mesmo utilizando os propagadores exatos. Uma das suposições é que, para potenciais não-confinantes (caso da partícula livre), só há convergência quando o número de termos acompanha o aumento de  $T$ . No entanto, para tempos curtos, o método apresenta bons resultados. Pela figura 4.2 notamos que a representação em série é mais eficiente no regime de  $\hbar$  grande, se opondo ao limite de validade da fórmula semiclássica. Ao diminuir  $\hbar$  observamos que o método em série, para o truncamento em mesma ordem, tende a piorar. Porém, ao aumentar a ordem da expansão com  $\hbar$  fixo, o resultado melhora (figura 4.3).

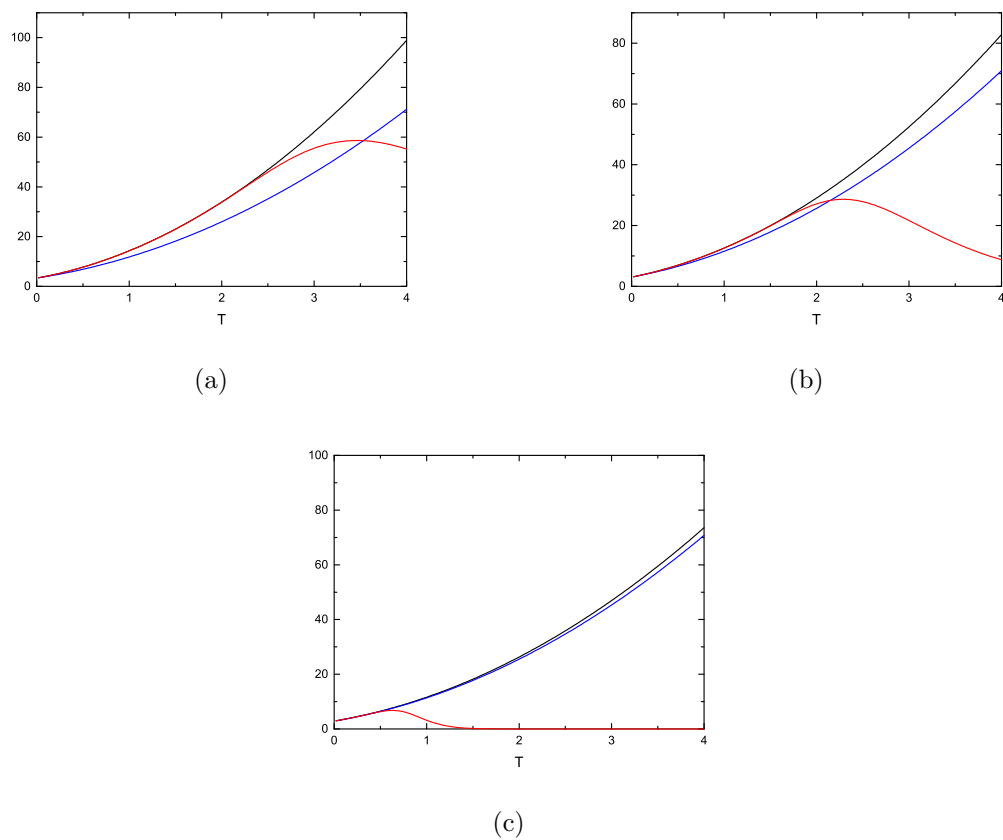


Figura 4.2: Comparação entre as diferentes aproximações para o valor esperado do operador  $\hat{\Sigma}$  considerando diferentes valores de  $\hbar$  para a partícula livre. O resultado quântico exato é representado pela curva preta, o semiclassical pela curva azul e o via representação de série pela vermelha. No gráfico (a) mostramos a evolução da média do observável para  $\hbar = 0,7$ . No gráfico (b) escolhemos  $\hbar = 0,3$  e, no gráfico (c), selecionamos  $\hbar = 0,07$ . Em relação à representação em série, truncamos a expansão em 65 termos.

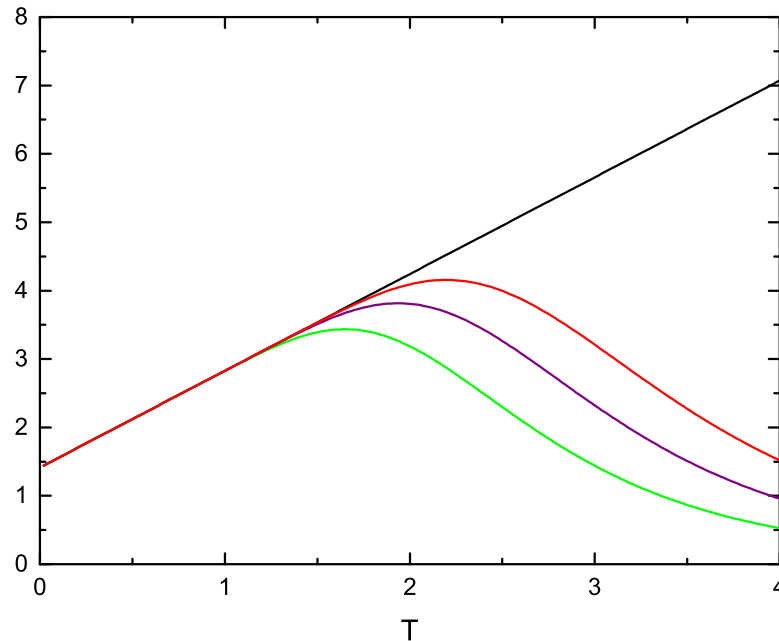


Figura 4.3: Comparação do método de série, utilizando diferentes ordens de truncamento, com o quântico exato para a dinâmica da média do operador  $\hat{X}$ , em função do tempo  $T$ , para a partícula livre. O quântico exato está representado pela curva preta e a representação em série truncada em 45, 55 e 65 termos é representada pela curva verde, roxa e vermelha, respectivamente. Fixamos  $\hbar = 0,3$ .

## Oscilador quártico

O oscilador quártico apresenta uma dinâmica muito rica, pois ocorre o fenômeno de auto-interferência do pacote [29], o que não acontece para os outros sistemas aqui estudados. Dessa maneira, ele é de vital importância para a nossa discussão e conclusão sobre os métodos aqui desenvolvidos.

Primeiramente, baseados na figura 4.4, observamos que apenas os resultados da representação em série concordaram com os equivalentes exatos, porém devemos enfatizar que isto não acontece em todos os cenários, como será visto adiante. O método clássico-estatístico, como visto na figura 4.4, reproduziu aproximadamente o resultado quântico nos instantes iniciais. Após um certo tempo, a dinâmica quântica apresenta uma periodicidade em contrapartida à clássica, que vai a zero. Essa diferenciação é causada pela

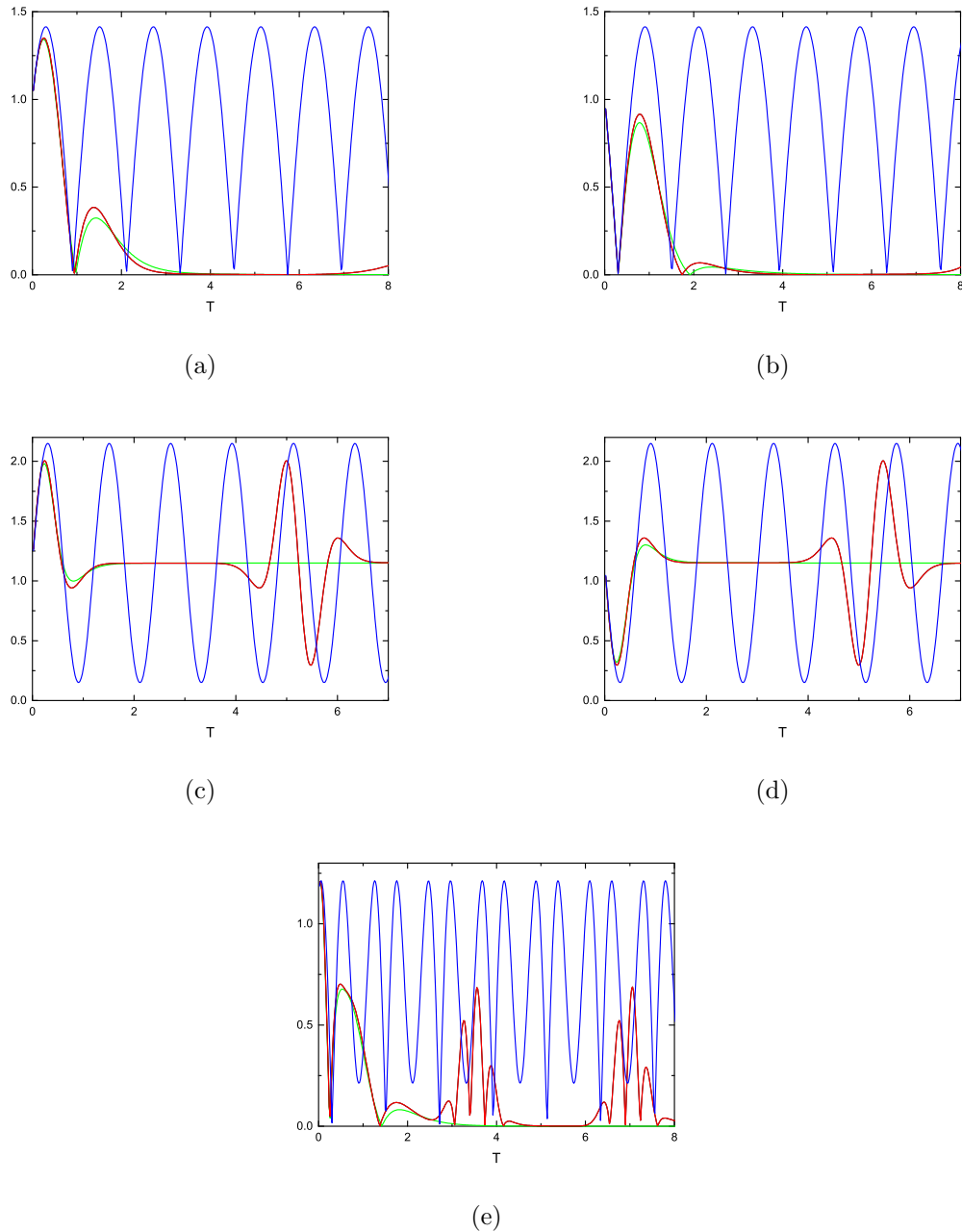


Figura 4.4: Comparação entre módulo das médias de operadores segundo métodos de cálculo diferentes para o sistema quártico. O resultado quântico exato é representado pela curva preta (sobrepsta à vermelha), o semiclassico pela curva azul, a representação em série pela vermelha e o clássico-estatístico pela curva verde. No gráfico (a), mostramos os cálculos relativos a  $\hat{X}$ . Em seguida, nos gráficos (b)-(e), apresentamos as curvas para  $\hat{P}$ ,  $\hat{X}^2$ ,  $\hat{P}^2$  e  $\hat{S}$ , respectivamente. Para a representação em série, truncamos a expansão em 65 termos. Utilizamos  $\hbar = 0,3$ .

não-existência de auto-interferência no cenário clássico. A esse fenômeno periódico nós chamaremos ressurgência. Visto que o método clássico não foi capaz de mimetizar esse comportamento, podemos concluir que, nesse caso, a ressurgência é um efeito puramente quântico e sem analogia clássica.

A aproximação semiclássica apresentou o pior resultado dentre as aproximações estudadas. Novamente observamos que o problema se encontra em não levar em conta as comutações ao substituir a trajetória clássica na equação (3.12). Podemos, indutivamente, acreditar que quanto maior a não-linearidade do potencial, pior será a qualidade do método. No entanto, analisando o comportamento de  $\hat{\Sigma}$ , na figura 4.5, notamos que, com a diminuição de  $\hbar$ , o resultado semiclássico tende a melhorar. O clássico-estatístico, para esse regime, também apresenta uma melhora significativa, porém ainda não é capaz de mimetizar a ressurgência.

Voltando à figura 4.4 observamos que a representação em série apresenta os melhores resultados, o que, por um lado, não nos surpreende pois trata-se de uma fórmula exata, mas, por outro, surpreende quando recordamos dos resultados obtidos com a partícula livre. Explicamos isso pela forma do potencial, que confina a dinâmica, e converge independentemente do valor de  $T$ . Podemos observar, pela figura 4.6, que, ao diminuir  $\hbar$ , mantendo os mesmos números de termos na da série, a aproximação piora mas não diverge ou vai a zero, diferentemente da partícula livre. Como observado anteriormente, a representação em série e a aproximação pelo método do ponto de sela trabalham em regimes diferentes. Enquanto a primeira vale no limite super-quântico, i.e.,  $\hbar$  grande, o segunda é melhor no limite semiclássico.



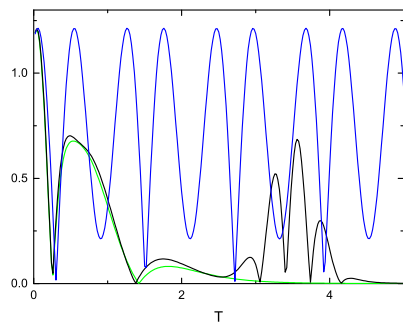
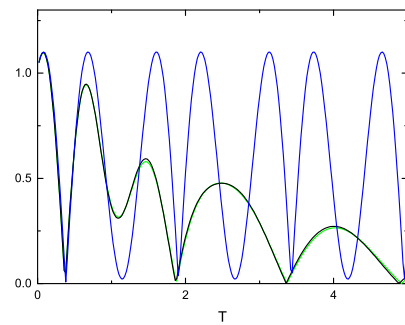
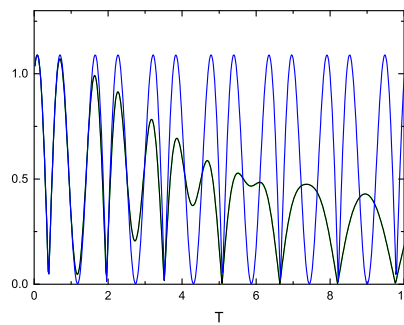
(a)  $\hbar = 0,3$ (b)  $\hbar = 0,03$ (c)  $\hbar = 0,003$ 

Figura 4.5: Comparação entre os métodos no cálculo do módulo do valor esperado de  $\hat{\Sigma}$  utilizando valores diferentes de  $\hbar$  para o sistema quártico. O resultado quântico exato é representado pela curva preta, o método semiclássico pela curva azul e o clássico-estatístico pela curva verde. No gráfico (a) foi utilizado  $\hbar = 0,3$ , no (b) foi utilizado  $\hbar = 0,03$  e, em (c),  $\hbar = 0,003$ .

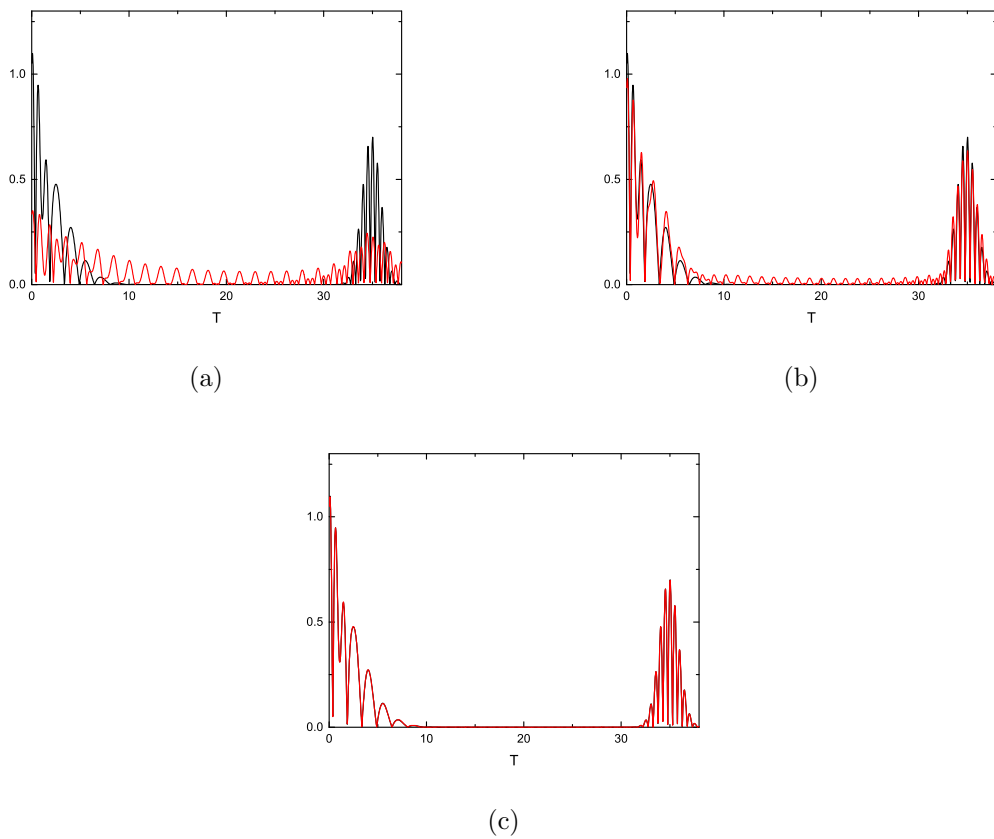


Figura 4.6: Comparação do método de série, utilizando diferentes ordens de truncamento, com o quântico exato para a dinâmica da média do operador  $\hat{X}$  em função do tempo  $T$  para o sistema quártico. O quântico exato está representado pela curva preta e a representação em série pela curva vermelha que foi truncada nos gráficos (a)-(c) em 30, 40 e 50 termos, respectivamente. Utilizando  $\hbar = 0,03$ .

## Conclusão

O valor esperado em Mecânica Quântica é um elemento essencial, pois está relacionado à medida e à obtenção de informação de um observável. Mesmo tendo um papel tão importante na teoria, não existem muitos trabalhos que analisam a dinâmica da média de operadores no limite semiclássico, utilizando estados coerentes. A teoria do propagador semiclássico  $K_+^{\text{sc}}$  nesta representação já existe a bastante tempo [10, 35, 36], porém somente após a dedução do retro-propagador  $K_-^{\text{sc}}$  [19], foi possível construir diretamente uma aproximação semiclássica para a dinâmica do valor esperado, envolvendo os mesmos elementos da teoria bem estabelecida de evolução semiclássica de pacotes de onda [6–8].

Como forma de compreender melhor o modo de operação da teoria semiclássica em estados coerentes, iniciamos o trabalho aplicando a fórmula dos propagadores semiclássicos para  $\xi = \pm$ , para alguns Hamiltonianos. Em particular, acreditamos que a aplicação ao sistema quártico é original, e, apesar de apresentar algumas dificuldades técnicas, ilustra muito bem o papel da inclusão de muitas trajetórias complexas ao cálculo do propagador. Mostramos numericamente que, para ambos os propagadores, a adição de trajetórias contribuintes melhora o resultado significativamente. Uma outra constatação foi a forte influência de  $\hbar$ . Para valores baixos de  $\hbar$  obtivemos resultados mais próximos ao exato, para ambos os propagadores. Considerando que os propagadores foram deduzidos para atuar no limite semiclássico  $\hbar \rightarrow 0$ , conclui-se que os resultados que obtivemos são bastante positivos.

Em relação ao valor esperado, nesse trabalho utilizamos três aproximações para cal-

---

cular essa quantidade. A primeira é uma aproximação semiclássica que foi desenvolvida ao resolver a média de operadores, escrita em uma forma integral, via método do ponto de sela. Nela, substituímos os propagadores exatos pelos análogos semiclássicos e aplicamos o método em questão. O resultado obtido foi uma fórmula excessivamente simples, fácil de calcular, que, por tal motivo, demonstrou incapacidade em reproduzir comportamentos quânticos mais complexos. A segunda aproximação é uma representação em série do valor esperado. Na realidade, ela é uma expressão formal exata escrita como uma série infinita de derivadas, onde a aproximação se dá ao efetuarmos o truncamento da série. Finalmente, utilizamos também uma média clássico-estatística construída em analogia ao valor esperado quântico. De fato, a selecionamos por sinalizar comportamentos que podem ser mimetizados por um formalismo exclusivamente clássico.

As aproximações acima foram aplicadas ao potencial harmônico, à partícula livre e ao oscilador quártico. Para o potencial harmônico, todos os métodos apresentaram resultados idênticos ao quântico exato. Em relação à partícula livre, o método clássico-estatístico reproduziu os resultados exatos. Entretanto, o método semiclássico e a representação em série apresentaram algumas limitações. A aproximação obtida via método do ponto de sela apresentou problemas porque é incapaz de reproduzir efeitos relacionados à comutação entre os operadores. Porém, no limite em que  $\hbar$  se torna irrelevante, esse problema não gera grande discrepância. A representação em série apresentou um bom resultado para tempos curtos e, com a adição de mais termos, é possível melhorá-la também para tempos maiores, porém o custo deste procedimento pode torná-lo inviável. Quanto ao potencial quártico, a representação em série obteve resultados excelentes para  $\hbar$  grande, no entanto, ao diminuirmos  $\hbar$ , mais termos da expansão devem ser somados para polir o resultado. A aproximação via ponto de sela não obteve um desempenho satisfatório em comparação com os outros métodos. O método clássico-estatístico, para  $\hbar$  pequeno, se mostrou muito bom, porém foi observado que essa aproximação não foi eficaz para mimetizar a ressurgência. Esse fato nos faz concluir que essa propriedade do oscilador quártico é estritamente quântica e que não pode ser explicada utilizando uma teoria clássico-estatística.

De modo geral, para tempos curtos, as aproximações desenvolvidas são boas. No limite semiclássico, a aproximação pelo método do ponto de sela e a clássico-estatística produzem resultados muito bons. No outro extremo, no limite super-quântico, a representação em

série truncada apresenta melhores resultados. No entanto, obtivemos esses resultados para sistemas simples. Se os potenciais fossem mais complexos, sem solução analítica, seria muito complicado utilizar os métodos de série e clássico-estatístico, pois, para esses casos, seus procedimentos estariam relacionados com derivadas de funções numéricas. Então, se estivermos interessados em estudar sistemas complexos, para tempos curtos e para  $\hbar$  pequeno, é mais viável utilizar a fórmula semiclássica, pois, além de ser mais simples de implementar, nesse regime apresentou bons resultados.

Para trabalhos futuros pensaremos em maneiras de melhorar a aproximação via ponto de sela e a representação em série. Como a inclusão de mais trajetórias contribuintes foi bastante bem sucedida no cálculo do propagador, uma das tentativas de melhorar o valor esperado semiclássico será utilizar uma extensão do método do ponto de sela que se adeque à inclusão de mais trajetórias contribuintes. E, com relação à representação em série, gostaríamos de investigar como ela se comporta ao utilizarmos o propagador semiclássico ao invés do quântico exato, transformando-a em uma aproximação semiclássica.

## Referências Bibliográficas

- [1] V. P. Maslov e M. V. Fedoriuk. *Semi-Classical Approximation in Quantum Mechanics* (D. Reidel, Dordrecht, 1981).
- [2] M. C. Gutzwiller. *Chaos in Classical and Quantum Mechanics* (Springer-Verlag, New York, 1990).
- [3] M. Brack e R. Bhaduri. *Semiclassical Physics* (Westview, New York, 2008).
- [4] K. Richter. *Semiclassical Theory of Mesoscopic Quantum Systems* (Springer-Verlag, Berlin, 2000).
- [5] G. Grynberg, A. Aspect e C. Fabre. *Introduction to Quantum Optics: From the Semiclassical Approach to Quantized Light* (Cambridge University, New York, 2010).
- [6] J. R. Klauder e B. S. Skagerstan. *Coherent States. Applications in Physics and Mathematical Physics* (World Scientific, Singapore, 1985).
- [7] W. M. Zhang, D. H. Feng e R. Gilmore. *Reviews of Modern Physics* **62**, 4, 867 (1990).
- [8] J.-P. Gazeau. *Coherent States in Quantum Physics* (Wiley-VCH, Weinheim, 2009).
- [9] M. Novaes. *Revista Brasileira de Ensino de Física* **24**, 4, 437 (2002).
- [10] M. Baranger e et.al. *Journal of Physics A* **34**, 7227 (2001).
- [11] D. V. Shalashilin e M. S. Child. *Journal of Chemical Physics* **113**, 10028 (2000).

- 
- [12] D. V. Shalashilin. *Journal of Chemical Physics* **115**, 12, 5367 (2001).
- [13] W. H. Miller. *Molecular Physics* **100**, 4, 397 (2002).
- [14] A. L. Xavier e M. A. M. de Aguiar. *Physical Review Letters* **79**, 18, 3323 (1997).
- [15] A. D. Ribeiro, M. A. M. de Aguiar e M. Baranger. *Physical Review E: Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Physics* **69**, 066204 (2004).
- [16] M. A. M. de Aguiar e et.al. *Journal of Physics A* **38**, 4645 (2005).
- [17] M. Novaes e M. A. M. Aguiar. *Physical Review A: Atomic, Molecular, and Optical Physics* **72**, 032105 (2005).
- [18] M. A. M. de Aguiar, S. S. Vitiello e A. Grigolo. *Chemical Physics* **370**, 42 (2010).
- [19] A. D. Ribeiro e R. M. Angelo. *Physical Review A: Atomic, Molecular, and Optical Physics* **82**, 052335 (2010).
- [20] T. A. Osborn e F. H. Molzahn. *Annals of Physics* **241**, 79 (1995).
- [21] M. A. Marchioli. *Revista Brasileira de Ensino de Física* **24**, 4, 421 (2002).
- [22] N. C. Dias, A. Mikovic e J. N. Prata. *Journal of Mathematical Physics* **47**, 082101 (2006).
- [23] S. M. Gruenbaum e R. F. Loring. *The Journal of Chemical Physics* **129**, 12510 (2008).
- [24] F. M. Herman e E. Kluk. *Chemical Physics* **91**, 27 (1984).
- [25] C.-Y. Hsieh e R. Kapral. *The Journal of Chemical Physics* **137**, 22A507 (2012).
- [26] R. Liberalquino e F. Parisio. *Physics Letters A* **377**, 1333 (2013).
- [27] E. J. Heller. *Journal of Chemical Physics* **62**, 1544 (1975).
- [28] N. Bleistein e R. A. Handelsman. *Asymptotic Expansions of Integrals* (Holt, Rinehart and Winston, 2010).

- 
- [29] R. M. Angelo. *Apectos Quânticos e Clássicos da Dinâmica de Emaranhamento em Sistemas Hamiltonianos*. Tese de Doutorado, Universidade Estadual de Campinas (2003).
- [30] C. Cohen-Tannoudji, B. Die e F. Lalöe. *Quantum Mechanics*, volume 1 (Jonh Wiley & Sons, New York, 1977).
- [31] E. Merzbacher. *Quantum Mechanics* (Jonh Wiley & Sons, New York, 1998), 3 edição.
- [32] R. P. Feynman e A. R. Hibbs. *Quantum Mechanics and Path Integrals* (McGraw-Hill, New York, 1965).
- [33] M. A. M. de Aguiar. *Tópicos de Mecânica Clássica* (Livraria da Física, São Paulo, 2011).
- [34] R. Shankar. *Principles of Quantum Mechanics* (Plenum, New York, 1994), 2 edição.
- [35] J. R. Klauder. *Physical Review D: Particles and Fields* **19**, 2349 (1979).
- [36] E. A. Kochetov. *Journal of Mathematical Physics* **36**, 4667 (1995).
- [37] G. J. Milburn. *Physical Review A: Atomic, Molecular, and Optical Physics* **33**, 674 (1986).



# Apêndice A

## Derivadas da ação

Considere a ação

$$\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}_\xi(u_1, t_1; v_2, t_2) = \xi \int_{t_i}^{t_f} \left[ \frac{1}{2} (u\dot{v} - v\dot{u}) - \frac{i}{\hbar} \tilde{H} \right] dt + \tilde{\Lambda}, \quad (\text{A.1})$$

onde definimos

$$\tilde{\Lambda} = \frac{1}{2} (u_1 v_1 + u_2 v_2). \quad (\text{A.2})$$

Para  $\xi = +$ , os sub-índices 1 e 2 representam os instantes iniciais e finais, respectivamente e, para  $\xi = -$ , os sub-índices 1 e 2 representam os instantes finais e iniciais, respectivamente. Chamaremos de  $(\bar{u}(t), \bar{v}(t))$  a trajetória vizinha a  $(u(t), v(t))$ . Matematicamente,

$$\bar{u}(t) = u(t) + \delta u(t) \quad \text{e} \quad \bar{v}(t) = v(t) + \delta v(t). \quad (\text{A.3})$$

Definimos a variação  $\Delta u$  como

$$\begin{aligned} \Delta u &= \bar{u}(t + \Delta t) - u(t) \\ &= \bar{u}(t) + \dot{\bar{u}}(t) \Delta t - u(t) \\ &= \bar{u}(t) + \dot{u}(t) \Delta t - u(t). \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

em que  $\Delta t$  é um intervalo arbitrário de tempo e consideramos  $\dot{\bar{u}}(t) \Delta t = \dot{u}(t) \Delta t$ , pois a diferença é de segunda ordem. Repetindo de forma análoga para  $\Delta v$  e utilizando a

equação (A.3), encontramos

$$\Delta u = \delta u(t) + \dot{u}(t)\Delta t \quad \text{e} \quad \Delta v = \delta v(t) + \dot{v}(t)\Delta t. \quad (\text{A.5})$$

Após calcular a variação nas variáveis  $u$  e  $v$ , observaremos o que ocorre com a ação. A variação na ação é dada por

$$\Delta \mathcal{S} = \mathcal{S}(u_1 + \Delta u_1, t_1 + \Delta t_1; v_2 + \Delta v_2, t_2 + \Delta t_2) - \mathcal{S}(u_1, t_1; v_2, t_2). \quad (\text{A.6})$$

Nesse instante, definimos a função  $L_\xi(u, \dot{u}, v, \dot{v}, t)$  como

$$L_\xi(u, \dot{u}, v, \dot{v}, t) \equiv \xi \frac{1}{2} (u\dot{v} - v\dot{u}) - \frac{i}{\hbar} \tilde{H}. \quad (\text{A.7})$$

Assim, a variação da ação pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \Delta \mathcal{S} &= \int_{t_i + \Delta t_i}^{t_f + \Delta t_f} L_\xi(\bar{u}, \dot{\bar{u}}, \bar{v}, \dot{\bar{v}}, t) dt - \int_{t_i}^{t_f} L_\xi(u, \dot{u}, v, \dot{v}, t) dt + \Delta \tilde{\Lambda} \\ &= \int_{t_i + \Delta t_i}^{t_i} \bar{L}_\xi dt + \int_{t_i}^{t_f} \bar{L}_\xi dt + \int_{t_f}^{t_f + \Delta t_f} \bar{L}_\xi dt - \int_{t_i}^{t_f} L_\xi dt + \Delta \tilde{\Lambda} \\ &= -\bar{L}_\xi(t_i) \Delta t_i + \bar{L}_\xi(t_f) \Delta t_f + \int_{t_i}^{t_f} (\bar{L}_\xi - L_\xi) dt + \Delta \tilde{\Lambda} \\ &= -\bar{L}_\xi(t_i) \Delta t_i + \bar{L}_\xi(t_f) \Delta t_f + \int_{t_i}^{t_f} \delta L_\xi dt + \Delta \tilde{\Lambda}. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Resolveremos separadamente o terceiro e o quarto termo da equação (A.8). Começando pelo terceiro:

$$\begin{aligned} \int_{t_i}^{t_f} \delta L_\xi dt &= \xi \int_{t_i}^{t_f} \left[ \frac{1}{2} (u\delta\dot{v} + \dot{v}\delta u - v\delta\dot{u} - \dot{u}\delta v) - \frac{i}{\hbar} \left( \frac{\partial \tilde{H}}{\partial u} \delta u + \frac{\partial \tilde{H}}{\partial v} \delta v \right) \right] dt \\ &= \xi \int_{t_i}^{t_f} \left[ \frac{1}{2} \left( (u\delta\dot{v}) - 2\dot{u}\delta v - (v\delta\dot{u}) + 2\dot{v}\delta u \right) - \frac{i}{\hbar} \left( \frac{\partial \tilde{H}}{\partial u} \delta u + \frac{\partial \tilde{H}}{\partial v} \delta v \right) \right] dt. \end{aligned}$$

Reorganizando os termos,

$$\int_{t_i}^{t_f} \delta L_\xi dt = \xi \int_{t_i}^{t_f} \left[ \frac{1}{2} \left( (u\dot{v}) - (v\dot{u}) \right) + \underbrace{\left( \dot{v} - \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial u} \right)}_{=0} \delta u - \underbrace{\left( \dot{u} + \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial v} \right)}_{=0} \delta v \right] dt. \quad (\text{A.9})$$

Identificamos os termos nulos da equação acima como as equações de Hamilton (2.31).

Então, finalmente, obtemos

$$\begin{aligned} \int_{t_i}^{t_f} \delta L_\xi dt &= \frac{\xi}{2} \int_{t_i}^{t_f} \left[ (u\dot{v}) - (v\dot{u}) \right] dt = \frac{\xi}{2} [u\delta v - v\delta u] \Big|_{t_i}^{t_f} \\ &= \frac{\xi}{2} [u(t)(\Delta v - \dot{v}(t)\Delta t) - v(t)(\Delta u - \dot{u}(t)\Delta t)] \Big|_{t_i}^{t_f}, \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

em que foi utilizado a equação (A.3). A variação  $\tilde{\Lambda}$  é dada por

$$\begin{aligned} \Delta \tilde{\Lambda} &= \frac{1}{2} [\bar{u}(t_i + \Delta t_i) \bar{v}(t_i + \Delta t_i) - u(t_i)v(t_i) + \bar{u}(t_f + \Delta t_f) \bar{v}(t_f + \Delta t_f) - u(t_f)v(t_f)] \\ &= \frac{1}{2} [v(t_i)\Delta u_i + u(t_i)\Delta v_i + v(t_f)\Delta u_f + u(t_f)\Delta v_f], \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

em que novamente utilizamos a equação (A.3) e desconsideramos os termos em segunda ordem. Com todos os termos já calculados, podemos substituir na equação (A.8) as equações (A.10) e (A.11). Com isso, obtemos

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} \Delta \mathcal{S} &= L_\xi(t) \Delta t \Big|_{t_i}^{t_f} + \frac{\xi}{2} [u(t)(\Delta v - \dot{v}(t)\Delta t) - v(t)(\Delta u - \dot{u}(t)\Delta t)] \Big|_{t_i}^{t_f} \\ &+ \frac{1}{2} [v(t_i)\Delta u_i + u(t_i)\Delta v_i + v(t_f)\Delta u_f + u(t_f)\Delta v_f] \\ &= \left[ \frac{1}{2} (v(t)\dot{u}(t) - u(t)\dot{v}(t)) + L_\xi(t) \right] \Delta t \Big|_{t_i}^{t_f} + \frac{1+\xi}{2} [v(t_i)\Delta u_i + u(t_f)\Delta v_f] \\ &+ \frac{1-\xi}{2} [v(t_f)\Delta u_f + u(t_i)\Delta v_i] \\ &= -\xi \tilde{H}(t) \Delta t \Big|_{t_i}^{t_f} + \frac{1+\xi}{2} [v(t_i)\Delta u_i + u(t_f)\Delta v_f] + \frac{1-\xi}{2} [v(t_f)\Delta u_f + u(t_i)\Delta v_i]. \end{aligned}$$

Como os deslocamentos  $\Delta t$ ,  $\Delta u$  e  $\Delta v$  são arbitrários e arbitrariamente pequenos, identificamos as seguintes relações:

$$\begin{aligned}
\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{S}_+}{\partial u(t_i)} &= +v(t_i); \\
\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{S}_+}{\partial v(t_f)} &= +u(t_f); \\
\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{S}_+}{\partial t_i} &= +H(t_i); \\
\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{S}_+}{\partial t_f} &= -H(t_f); \\
\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{S}_-}{\partial u(t_f)} &= +v(t_f); \\
\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{S}_-}{\partial v(t_i)} &= +u(t_i); \\
\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{S}_-}{\partial t_i} &= -H(t_i); \\
\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \mathcal{S}_-}{\partial t_f} &= +H(t_f).
\end{aligned} \tag{A.12}$$

## Método de integração

Para resolver a integral

$$I = \int \frac{dx}{\delta\sqrt{\pi}} e^{-\frac{x^2}{\delta^2}} f(x), \quad (\text{B.1})$$

sendo  $f(x)$  uma função qualquer de  $x$ , faremos a seguinte manipulação matemática:

$$\begin{aligned} I &= \int \frac{dx}{\delta\sqrt{\pi}} e^{-\frac{x^2}{\delta^2}} \lim_{u \rightarrow x_0} f(x + x_0 - u) \\ &= \int \frac{dx}{\delta\sqrt{\pi}} e^{-\frac{x^2}{\delta^2}} \lim_{u \rightarrow x_0} e^{x\partial_{x_0}} f(x_0 - u) \\ &= \lim_{u \rightarrow x_0} \left[ \int \frac{dx}{\delta\sqrt{\pi}} e^{-\frac{x^2}{\delta^2}} e^{x\partial_{x_0}} f(x_0 - u) \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

onde assumimos a convergência das expressões e utilizamos  $e^{x\partial_{x_0}} f(x_0) = f(x_0 + x)$ , que é equivalente a operação de deslocamento em mecânica quântica  $e^{-\frac{ia}{\hbar}\hat{p}}|x\rangle = |x + a\rangle$  na base de posição, em que  $x_0$  é um número arbitrário. Para prosseguir, completaremos quadrados na exponencial

$$\begin{aligned} I &= \lim_{u \rightarrow x_0} \left[ \int \frac{dx}{\delta\sqrt{\pi}} e^{-\left(\frac{x}{\delta} - \frac{\delta}{2}\partial_{x_0}\right)^2} e^{\frac{\delta^2}{4}\partial_{x_0}^2} f(x_0 - u) \right] \\ &= \lim_{u \rightarrow x_0} \left[ \left[ \int \frac{dx}{\delta\sqrt{\pi}} e^{-\left(\frac{x}{\delta} - \frac{\delta}{2}\partial_{x_0}\right)^2} \right] e^{\frac{\delta^2}{4}\partial_{x_0}^2} f(x_0 - u) \right], \end{aligned} \quad (\text{B.3})$$

deixando toda a dependência na variável de integração  $x$  na exponencial gaussiana. O resultado da integração produz simplesmente

$$I = \left[ e^{\frac{\delta^2}{4} \partial_{x_0}^2} f(x_0 - u) \right]_{x_0=u}. \quad (\text{B.4})$$