# Universidade Estadual de Campinas

## Limite Semiclássico de Sistemas Caóticos via Estados Coerentes: o Papel das Órbitas Complexas

Alexandre Dias Ribeiro

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

#### Banca Examinadora:

Prof. Dr. Marcus Aloizio Martinez de Aguiar (Orientador) Prof. Dr. Alfredo Miguel Ozorio de Almeida - CBPF/RJ Profa. Dra. Kyoko Furuya - IFGW/UNICAMP

Dissertação submetida ao Instituto de Física "Gleb Wataghin" para a obtenção do título de Mestre em Física.

Campinas, São Paulo, Brasil 15/03/2000

## Agradecimentos

Gostaria de iniciar este trabalho agradecendo àqueles que contribuiram diretamente para a sua realização. Ao Marcus, pela maneira brilhante como contribuiu para o trabalho; é muito confortável trabalhar num ambiente de muito respeito. E à **FAPESP**, que, na boa administração dos recursos recolhidos, prestou-me suporte financeiro.

Agradeço também aos membros da Banca Examinadora deste trabalho, Kyoko Furuya e Alfredo M. O. de Almeida, pelas sugestões e correções apontadas. Fiquei bastante satisfeito com a relação estabelecida.

Estou contente também por sempre poder ter contado com aqueles que foram os responsáveis pelas minhas oportunidades durante toda a vida, e por aqueles que a tornaram um pouquinho mais agradável. Aos meus pais e irmãs, por superarem quaisquer outros: conseguiram me aguentar por mais de vinte anos! À Querida Fernandoca, que, sempre próxima, ajudou-me a superar infinitos probleminhas! Aos amigos e colegas de todas as épocas e todos os lugares. Uns mais especiais, outros também!

Gostaria de agradecer também às pessoas que, contando com o Marcus, encontraram mais de um mol de erros nas versões preliminares desta dissertação: Júlio, Renato, Luís Gregório e Élida.

Michel Baranger was also an important collaborator on the development of this work. He achived the results for the quantum propagator (not published yet) which were used in a comparision with our semiclassical results. Baranger, along with Marcus Aguiar, was also author of the theory we used. I would like to thank M. Baranger for his valuable contribution.

## Resumo

Neste trabalho utilizamos a representação de estados coerentes do oscilador harmônico para estudar o operador de evolução temporal de sistemas não integráveis. O estudo consiste no desenvolvimento de uma aproximação semiclássica deste objeto através do método de fase estacionária, segundo o qual ele acaba sendo escrito como uma expansão em torno de trajetórias clássicas complexas que conectam o ponto inicial no espaço de fase (p', q') ao final (p'', q''), num tempo T, regidas por uma função hamiltoniana que é a média em estados coerentes do operador hamiltoniano do problema em questão. As grandezas p', q', p'' e q'' são as médias quânticas da posição e do momento para os estados coerentes iniciais e finais, respectivamente. E justamente neste contexto que aparecem as trajetórias complexas. É muito difícil encontrar uma trajetória governada por uma hamiltoniana predeterminada que satisfaça a todos os vínculos p', q', p'', q'' e T. Este problema é resolvido quando percebemos que a aproximação utilizada permite que busquemos tais soluções clássicas num espaço de fase complexo. Quanto mais imaginária for a trajetória, menor a sua contribuição para o valor do propagador e vice-versa. Fizemos uma aplicação desta teoria para um potencial bidimensional e não integrável (potencial Nelson) nas proximidades de uma trajetória real e instável, e comparamos os resultados do propagador semiclássico com o quântico exato e com os obtidos por meio de uma expansão em torno de uma órbita real.

## Abstract

In this work we use the harmonic oscillator coherent state representation to study the time evolution operator of non-integrable systems. This work consists in developing a semiclassical approximation to this object through the stationary phase method. Then the propagator is written as an expansion about complex classical trajectories that connect the initial phase space point (p', q') to the final point (p'',q''), during a time T, governed by a hamiltonian function that is the average, in coherent states, of the hamiltonian operator. The quantities p', q', p'', q''are the quantum average of the position and momentum for the initial and final coherent states, respectively. In this context the complex trajectories appear. It is very difficult to find a trajectory governed by a given hamiltonian that satisfies all constraints p', q', p'', q'' and T. This problem is solved when we realize that the approximation allows the search for these trajectories in a complex phase space. The more imaginary is the trajectory, the less it contributes to the propagator, and vice-versa. We make an application of this theory to a bidimensional and nonintegrable potential (Nelson Potential) in the vicinity of a real unstable trajectory and compare the results with the exact quantum propagator and with the results obtained by expanding about a real orbit.

# Conteúdo

1	Apr	roximação Semiclássica do Propagador na Representação de	
	Est	ados Coerentes	12
	1.1	Estados Coerentes em Duas Dimensões	12
	1.2	Propagador Semiclássico na Representação de Estados Coerentes em	
		Duas Dimensões	18
		1.2.1 Aproximação de Fase Estacionária	20
		1.2.2 Espaço de Fase Estendido	21
		1.2.3 Integral Gaussiana	24
		1.2.4 Cálculo do Determinante	26
		1.2.5 Matriz Antissimétrica de Deslocamento e o Determinante de Q	29
		1.2.6 A Ação	31
		1.2.7 A Forma Final do Propagador: um Resumo	33
		1.2.8 Redução do Problema: O Propagador Diagonal	35
2	O N	Método Numérico da Matriz de Monodromia	36
	2.1	A Dinâmica no Espaço de Fase Estendido	36
	2.2	O Método Numérico	38
3	O F	Potencial Nelson	44
	3.1	A Trajetória Vertical	47
	3.2	Cálculo do Propagador Diagonal sobre a Trajetória Vertical	49
4	O F	Propagador na Vizinhança da Trajetória Vertical	54
	4.1	Deslocamento do Centro do Estado Coerente para $x \neq 0$	54
		4.1.1 As Trajetórias Complexas	56
	4.2	Comparação entre Resultados Semiclássicos e Quânticos	60

		4.2.1 O Cálculo Quântico e a Aproximação de Órbita Real	60		
		4.2.2 Gráficos Polares	64		
	4.3	Gráficos Polares para Energias Diferentes	78		
	4.4	Propagador em Função das Coordenadas do Espaço de Fase $x-p_x$	80		
5	5 Comentários Finais				
Bi	Bibliografia				
$\mathbf{A}$	$\mathbf{A}\mathbf{s}$	Duas Hamiltonianas $\tilde{H}$ e $H$	85		
В	$\mathbf{E}\mathbf{x}$	pansão do Objeto ${\mathcal A}$ em Função da Órbita Real	87		
Li	Lista de Figuras				

# Introdução

#### a) Motivação

Do ponto de vista da dinâmica clássica de sistemas hamiltonianos, podemos classificá-los como caóticos ou, opondo-se a estes, integráveis. Quando dizemos que existe caos em um sistema hamiltoniano com movimento limitado, temos uma maneira bastante clara para caracterizá-lo: basta dizer que numa dinâmica caótica, condições iniciais muito próximas separam-se exponencialmente com o decorrer do tempo. Desta forma, podemos dizer que na presença de caos a previsibilidade é nula para tempos longos. Quanto aos sistemas integráveis, é possível fazer previsões acerca do futuro, pois trajetórias vizinhas separam-se mais lentamente com a evolução temporal. Podem existir ainda sistemas onde apareçam as duas características: tanto o caos quanto regiões de regularidade. Neste último caso, é comum referirmo-nos a eles como sistemas não integráveis. De fato, a teoria de caos clássico já se encontra numa fase bastante adiantada de estudo, como podemos observar nas referências básicas da área, [1], [2], [3] e [4], por exemplo.

Diante desta situação, o que mais nos interessa no presente trabalho está relacionado com o papel que se atribui ao Princípio da Correspondência [5]. Segundo este princípio, existe uma região de transição entre a Mecânica Quântica, que se aplica a sistemas de baixas energias, e a Mecânica Clássica, altas energias, onde estas duas teorias ainda devem ser válidas (simultaneamente). Seguindo este raciocínio, podemos afirmar que deve haver alguma evidência de caos num tratamento quântico dos sistemas cujo análogo clássico é caótico, pelo menos para a região de transição acima citada. Basicamente, podemos atingir este limite por duas

maneiras não necessariamente distintas: quando se estende a Mecânica Quântica ao limite de altas energias, ou através de métodos semiclássicos; quando se utiliza informação clássica para o cálculo de quantidades quânticas, como níveis de energia e funções de onda.

Contudo, numa descrição quântica, não encontramos a evidência de caos citada no primeiro parágrafo. Uma maneira de enxergar isto é notar que o conceito de trajetória não pode ser aplicado diretamente à Mecânica Quântica; a evolução de um estado (quântico) não pode ser determinada por uma trajetória no espaço de fase, mas pela evolução de sua função de onda. Podemos até pensar em medir a sensibilidade às condições iniciais, sem fazer referência àquela região de transição, monitorando a distância entre os coeficientes de dois estados inicialmente próximos, escritos numa mesma base. Mas o resultado, como mostra a referência [6], será que a distância entre dois estados quânticos vizinhos permanecerá sempre a mesma, discordando do Princípio da Correspondência. Nesse sentido, devemos considerar outros enfoques do problema. Um desses novos enfoques é a análise estatística de grandezas quânticas, como os níveis de energia e a sua comparação com a teoria de matrizes aleatórias. Nesta dissertação não abordaremos esses aspectos, mas nos concentraremos no enfoque semiclássico.

Dentro da diretriz de estudar os aspectos semiclássicos de sistemas (classicamente) caóticos, é de grande interesse o conhecimento de suas funções de onda e seus níveis de energia, pois eles fornecem praticamente toda a informação quântica do sistema. Estes objetos estão diretamente relacionados com a Função de Green da Equação de Schrödinger independente do tempo,  $G(q'',q',E) = \sum_n \frac{\psi_n^*(q'')\psi_n(q')}{E-E_n+i\epsilon}$ , onde  $\psi_n$  e  $E_n$  são respectivamente as auto funções e auto energias do hamiltoniano do sistema. Como podemos ver, dos resíduos desta função, podemos extrair as funções de onda; e dos seus pólos, os níveis de energia [6]. Já que esta função é tão completa com relação às informações quânticas, neste trabalho dedicamo-nos à determinação de sua forma semiclássica. A propósito, existem métodos semiclássicos que dão conta da obtenção direta de funções de onda e níveis de energia sem apelar para a Função de Green, como por exemplo o método WKB (Wentzel, Kramers e Brillouin, [5]) e o método dos índices de Maslov [7] e[8] . No entanto, tais formalismos apresentam simplicidade de cálculo apenas para um grau de

liberdade, o que naturalmente não nos interessa, já que não existe caos para esta dimensão. Um caminho alternativo para obter G(q'',q',E) semiclássica é através de sua transformada de Fourier, o propagador K(q'',q',t); primeiro encontramos uma forma semiclássica para o propagador, através da formulação de Feynman de integrais de trajetória [9], e depois fazemos a transformada de Fourier inversa, obtendo finalmente a Função de Green semiclássica e consequentemente as funções de onda e níveis de energia do problema em discussão.

#### b) Propagador em Estados Coerentes

É exatamente neste contexto que se encaixa o tema deste trabalho de Mestrado: o propagador semiclássico na representação de estados coerentes, escrito em função de trajetórias clássicas. Apresentaremos o desenvolvimento de uma aproximação semiclássica para o propagador em estados coerentes,  $K(z'',z',t) = \langle z''| \exp\left(-i\hat{H}t/\hbar\right)|z'\rangle$ , onde  $\hat{H}$  é o operador hamiltoniano do sistema, e posteriormente a aplicaremos ao potencial Nelson [10], que é um sistema bidimensional, cujo análogo clássico é não integrável.

A utilização dos estados coerentes  $|z\rangle$ , que são gerados pelo oscilador harmônico, deve-se ao fato deles apresentarem características muito interessantes para o nosso trabalho, como podemos ver ainda nesta dissertação, ou mais detalhadamente nos livros básicos de Mecânica Quântica ([11] e [12], por exemplo). Um aspecto importante é que esta representação tem ligação direta e simultânea com as duas coordenadas do espaço de fase, sendo portanto natural a comparação entre resultados quânticos e seus análogos clássicos. Os estados coerentes ainda possuem a menor incerteza possível na determinação simultânea da posição e momento, segundo o Princípio da Incerteza de Heinsenberg [5]. De certa forma, podemos dizer que estes estados são "pontos quânticos" no espaço de fase, sendo os que mais se aproximam da Mecânica Clássica.

#### c) Trajetórias Complexas

O ponto central deste trabalho reside no fato da aproximação semiclássica do propa-

gador resultar numa forma onde aparecem quantidades características de trajetórias clássicas regidas por uma função hamiltoniana  $(\tilde{H})$ , dada pelo operador hamiltoniano suavizado em estados coerentes, ou formalmente,  $\hat{H} = \langle z | \hat{H} | z \rangle$ . Entretanto, estas trajetórias devem satisfazer às condições de contorno impostas pelos estados coerentes iniciais z'(q', p'), e finais z''(q'', p''), o que faz com que seja muito difícil que existam tais trajetórias. Para entender melhor esta afirmação, note que procuramos uma trajetória à qual impomos o seu período, os pontos iniciais e finais no espaço de fase, e a dinâmica que a governa,  $\tilde{H}$ . Mas este problema é contornado porque durante a realização da aproximação, nota-se que é permitido estender o espaço de fase para uma dimensão complexa, ou seja, posição e momento passam a ter partes reais e imaginárias. Fazendo isto, duplicamos o número de graus de liberdade do sistema clássico, de forma que seja sempre possível encontrar as trajetórias clássicas complexas. Tendo em vista o limite semiclássico, podemos adiantar que, quando o propagador depender de trajetórias que sejam totalmente reais, o valor do seu módulo é mais alto, e, na medida em que as condições de contorno vão exigindo trajetórias imaginárias, o valor cai, já que não existe mais um caminho real.

Este formalismo é de grande interesse especialmente quando o cálculo do propagador estiver numa região onde exista mais de uma trajetória real, ou nenhuma. No primeiro caso, a importância se justifica porque, sem utilizar as trajetórias complexas, é até possível escrever o propagador como uma expansão em torno das trajetórias reais, mas como são mais de uma, haverá interferência, e não é muito claro como levar isto em conta para trajetórias reais. Com o uso das trajetórias complexas, este problema não existe, já que a diferença de fase acumulada entre as duas trajetórias é responsável por resolver esta questão. No caso de não existir trajetória real, como por exemplo em problemas de tunelamento [13], a trajetória complexa é a única responsável pelo cálculo do propagador, sendo portanto de fundamental importância. Durante o Mestrado exploramos somente as regiões onde apenas uma trajetória contribui para o propagador, mas no Doutorado pretendemos estender este estudo às regiões onde mais de uma contribui, para o mesmo potencial.

Agora que temos uma breve idéia do que trata este trabalho, apresentamos como está organizada esta dissertação. No primeiro capítulo, faremos uma pequena introdução da teoria dos estados coerentes em duas dimensões, e em seguida, desenvolveremos a aproximação semiclássica do propagador, onde também é discutida a inclusão das trajetórias complexas. No capítulo dois, apresentaremos o Método Numérico da Matriz de Monodromia, que é capaz de encontrar as trajetórias complexas, através de seguidas correções numa trajetória tentativa. No capítulo três, apresentaremos o potencial Nelson, onde aplicaremos a teoria apresentada nos dois primeiros capítulos. Estudaremos também neste capítulo uma trajetória que possui solução analítica, com o objetivo de averiguar a validade do cálculo numérico. No quarto e último capítulo estudaremos o propagador na vizinhança da trajetória apresentada no capítulo três, e compararemos os nossos resultados com cálculos exatos quânticos e com os realizados por meio de uma outra aproximação. A partir daí, seguem os comentários finais e por último a bibliografia de referência.

## Capítulo 1

# Aproximação Semiclássica do Propagador na Representação de Estados Coerentes

A idéia deste primeiro capítulo é de desenvolver uma forma semiclássica para o propagador na representação de estados coerentes, que esteja escrita em termos de trajetórias clássicas complexas. Porém, antes de iniciarmos de fato esta aproximação, achamos conveniente introduzir, numa primeira seção, as idéias gerais da representação utilizada.

### 1.1 Estados Coerentes em Duas Dimensões

Os estados coerentes que utilizamos nesta seção são os usuais do tratamento quântico do oscilador harmônico simples. Apresentaremos inicialmente uma breve revisão deste sistema em duas dimensões, enfatizando que os auto estados da base que diagonaliza seu hamiltoniano não satisfaz o Princípio da Correspondência [5]. Verificado isto, introduziremos os estados coerentes, que são justamente construídos de forma que não apresentem este tipo de problema. Em seguida, traçaremos algumas de suas características gerais, como a sua expansão na base de auto estados do hamiltoniano do oscilador harmônico e as relações de completeza e de não ortogonalidade. Tudo que descreveremos nesta seção pode ser encontrado em livros básicos de Mecânica Quântica, como por exemplo na referência [11]. A única

diferença é que aqui desenvolveremos a teoria para duas dimensões.

#### Oscilador Harmônico Simples Bidimensional

O hamiltoniano do oscilador harmônico simples em duas dimensões é bem conhecido e, em termos dos operadores de aniquilação  $(\hat{a}_x \in \hat{a}_y)$  e criação  $(\hat{a}_x^{\dagger} \in \hat{a}_y^{\dagger})$ , pode ser escrito como:

$$\hat{H} = \hbar\omega_x \left( \hat{a}_x^{\dagger} \hat{a}_x + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_y \left( \hat{a}_y^{\dagger} \hat{a}_y + \frac{1}{2} \right),$$

onde definimos:

$$\hat{a}_x = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\hat{X}}{b_x} + i \frac{\hat{P}_x}{c_x} \right) \quad \text{e} \quad \hat{a}_y = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{\hat{Y}}{b_y} + i \frac{\hat{P}_y}{c_y} \right), \tag{1.1}$$

com  $b_r = \sqrt{\hbar/m\omega_r}$  e  $c_r = \sqrt{m\hbar\omega_r}$ , para r = x ou y, sendo m a massa da partícula,  $\omega_r$  a frequência de oscilação na direção r e  $\hbar$  a constante de Planck dividida por  $2\pi$ .

A diagonalização deste hamiltoniano nos leva a uma base  $\{|n_x\rangle\otimes|n_y\rangle=|n_x;n_y\rangle\}$  que é obviamente a mesma que diagonaliza os operadores de número  $\hat{N}_x\equiv\hat{a}_x^{\dagger}\hat{a}_x$  e  $\hat{N}_y\equiv\hat{a}_y^{\dagger}\hat{a}_y$ . Sendo o nosso espaço da forma  $\varepsilon=\varepsilon_x\otimes\varepsilon_y$ , qualquer operador do sub-espaço  $\varepsilon_x$  comuta com outro qualquer do  $\varepsilon_y$ . Assim, as equações de autovalores são escritas como:

$$\hat{N}_y | n_x; n_y \rangle = n_y | n_x; n_y \rangle$$
 e  $\hat{N}_x | n_x; n_y \rangle = n_x | n_x; n_y \rangle$ ,

onde pode-se demonstrar que  $n_x, n_y = 0, 1, 2, \dots$ 

Sabendo que os operadores de momento e posição são canonicamente conjugados, podemos concluir, pelas equações (1.1), que são válidas as relações:  $[\hat{a}_r, \hat{a}_{r'}^{\dagger}] = \delta_{r\,r'}$  e  $[\hat{a}_r, \hat{a}_{r'}] = 0$ . Através da manipulação destas, torna-se possível saber como estes operadores  $(\hat{a}_x \in \hat{a}_y, \hat{a}_x^{\dagger} \in \hat{a}_y^{\dagger})$  atuam sobre os estados da base:

$$\hat{a}_{x} | n_{x}; n_{y} \rangle = \sqrt{n_{x}} | n_{x} - 1; n_{y} \rangle \qquad \hat{a}_{x}^{\dagger} | n_{x}; n_{y} \rangle = \sqrt{n_{x} + 1} | n_{x} + 1; n_{y} \rangle$$

$$\hat{a}_{y} | n_{x}; n_{y} \rangle = \sqrt{n_{y}} | n_{x}; n_{y} - 1 \rangle \qquad \hat{a}_{y}^{\dagger} | n_{x}; n_{y} \rangle = \sqrt{n_{y} + 1} | n_{x}; n_{y} + 1 \rangle$$

$$(1.2)$$

De acordo com estas relações, podemos notar que as matrizes de  $\hat{a}_r^{\dagger}$  e  $\hat{a}_r$  possuem diagonal nula na base usada, implicando que a média destes operadores sobre qualquer estado estacionário  $|n_x; n_y\rangle$  também é nula. Como conseqüência disto, podemos concluir que a posição e o momento médios, calculados nestes estados, também valem zero, o que pode ser deduzido diretamente através da equação (1.1).

Isto é um problema quando levamos em conta o Princípio da Correspondência, pois sabemos que a posição e o momento no oscilador harmônico clássico oscilam no tempo e só permanecem nulos quando a energia também o é. Na tentativa de encontrar estados que satisfaçam este princípio, obtivemos os estados coerentes  $|\mathbf{z}\rangle = |z_x\rangle \otimes |z_y\rangle$ , que nada mais são do que estados gaussianos que podem ser escritos como uma superposição linear dos estados  $|n_x; n_y\rangle$ . Em síntese, procuramos os estados tais que, para o oscilador harmônico, os valores  $\langle \mathbf{z} | \hat{X} | \mathbf{z} \rangle$ ,  $\langle \mathbf{z} | \hat{Y} | \mathbf{z} \rangle$ ,  $\langle \mathbf{z} | \hat{P}_y | \mathbf{z} \rangle$  e  $\langle \mathbf{z} | \hat{H} | \mathbf{z} \rangle$  sejam equivalentes aos respectivos valores clássicos, pelo menos no limite quase clássico.

#### Estados Coerentes ou Quase Clássicos

A idéia básica deste item é comparar as equações de movimento clássicas com as médias quânticas de posição e momento sobre um estado  $|\mathbf{z}\rangle$ , estabelecendo relações que o caracterize como quase clássico.

Para o oscilador harmônico quântico podemos escrever os operadores de posição e momento em termos dos de criação e aniquilação, de modo que obtemos, ao incluir a dependência temporal:

$$\left\langle \hat{R} \right\rangle_{|\mathbf{z}\rangle}(t) = \frac{b_r}{\sqrt{2}} \left\{ \left\langle \hat{a}_r \right\rangle_{|\mathbf{z}\rangle}(0) e^{-i\omega_r t} + \left\langle \hat{a}_r \right\rangle_{|\mathbf{z}\rangle}^*(0) e^{i\omega_r t} \right\}, 
\left\langle \hat{P}_r \right\rangle_{|\mathbf{z}\rangle}(t) = \frac{-ic_r}{\sqrt{2}} \left\{ \left\langle \hat{a}_r \right\rangle_{|\mathbf{z}\rangle}(0) e^{-i\omega_r t} - \left\langle \hat{a}_r \right\rangle_{|\mathbf{z}\rangle}^*(0) e^{i\omega_r t} \right\},$$
(1.3)

onde  $(r, \hat{R}, \hat{P}_r) = (x, \hat{X}, \hat{P}_x)$  ou  $(y, \hat{Y}, \hat{P}_y)$ .

Quanto ao oscilador harmônico clássico, podemos escrever convenientemente as suas equações de movimento da seguinte forma:

$$r(t) = \frac{b_r}{\sqrt{2}} \left\{ z_r(0) e^{-i\omega_r t} + z_r^*(0) e^{i\omega_r t} \right\},$$

$$p_r(t) = \frac{-ic_r}{\sqrt{2}} \left\{ z_r(0) e^{-i\omega_r t} - z_r^*(0) e^{i\omega_r t} \right\},$$
(1.4)

onde  $z_r(0)$  é o número:

$$z_r(0) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \frac{r(0)}{b_r} + i \frac{p_r(0)}{c_r} \right\}.$$

Uma simples comparação entre as equações (1.3) e (1.4) nos leva à conclusão de que, se quisermos impor a equivalência entre valores clássicos e quânticos, devemos exigir a condição  $\langle \hat{a}_r \rangle_{|\mathbf{z}\rangle}(0) = z_r(0)$ . O que permite deduzirmos que o operador  $\hat{a}_r$  aplicado sobre o estado coerente  $|\mathbf{z}\rangle$  nos fornece, como autovalor, a quantidade clássica  $z_r$ , ou seja:

$$\hat{a}_r |\mathbf{z}\rangle = z_r |\mathbf{z}\rangle, \quad \text{com} \quad z_r = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{r}{b_r} + i\frac{p_r}{c_r}\right).$$
 (1.5)

Caracterizando o estado coerente deste modo, temos as relações entre quantidades clássicas e quânticas, e a relação de incerteza abaixo:

$$\left\langle \hat{R} \right\rangle_{|\mathbf{z}\rangle} = r \qquad \left\langle \hat{H} \right\rangle_{|\mathbf{z}\rangle} = H_{class} + \frac{1}{2}\hbar \,\omega$$

$$\left\langle \hat{P}_r \right\rangle_{|\mathbf{z}\rangle} = p_r \qquad \left( \Delta R \cdot \Delta P_r \right)_{|\mathbf{z}\rangle} = \frac{b_r}{\sqrt{2}} \frac{c_r}{\sqrt{2}} = \hbar \qquad (1.6)$$

$$\left\langle \hat{R}^2 \right\rangle_{|\mathbf{z}\rangle} = \frac{b_r^2}{2} \qquad \left\langle \hat{P}_r^2 \right\rangle_{|\mathbf{z}\rangle} = \frac{c_r^2}{2}$$

Indicando que, além de satisfazerem o Princípio da Correspondência, possuem, segundo o Princípio da Incerteza [5], a menor incerteza possível na determinação das suas coordenadas no espaço de fases. Inclusive, note que para altas energias (limite quase clássico),  $\hbar$  é desprezível e então  $\left\langle \hat{H} \right\rangle_{|\mathbf{z}\rangle} \to H_{class}$ .

#### Expansão dos Estados Coerentes na Base $\{|n_x; n_y\rangle\}$

Quando escrevemos os estados coerentes na base dos auto estados do operador hamiltoniano do oscilador harmônico simples  $\{|n_x;n_y\rangle\}$ , facilitamos a manipulação que permite a obtenção das relações de completeza e não ortogonalidade, que serão úteis no decorrer desta dissertação. Portanto, gostaríamos de encontrar os coeficientes  $c_{n_x,n_y}(\mathbf{z})$  tais que:

$$\left|\mathbf{z}\right\rangle = \sum_{n'_x, n'_y} c_{n'_x, n'_y}(\mathbf{z}) \left| n'_x; n'_y \right\rangle. \tag{1.7}$$

A dedução destes coeficientes é facilmente obtida ao aplicarmos nos dois lados da equação anterior o objeto  $\langle 0| (\hat{a}_x)^{n_x} (\hat{a}_y)^{n_y}$ . Partindo deste ponto, com o uso das equações (1.2) e (1.5), concluimos a seguinte relação de recorrência:

$$c_{n_x,n_y}(\mathbf{z}) = \frac{(z_x)^{n_x} (z_y)^{n_y}}{\sqrt{n_x! n_y!}} c_{0,0}(\mathbf{z}),$$

que, através da escolha de uma normalização conveniente, nos leva a:

$$c_{n_x,n_y}(\mathbf{z}) = \frac{(z_x)^{n_x} (z_y)^{n_y}}{\sqrt{n_x! \, n_y!}} \exp\left\{-\frac{|z_x|^2}{2} - \frac{|z_y|^2}{2}\right\}.$$
(1.8)

#### Relação de Completeza e não Ortogonalidade

As equações (1.7) e (1.8) nos permitem imediatamente deduzir a relação de não ortogonalidade:

$$\langle \mathbf{z} | \mathbf{z}' \rangle = \exp \left[ -\frac{|z_x|^2}{2} - \frac{|z_y|^2}{2} - \frac{|z_x'|^2}{2} - \frac{|z_y'|^2}{2} + z_x^* z_x' + z_y^* z_y' \right].$$
 (1.9)

E a relação de completeza pode ser escrita como:

$$\int \dots \int \frac{\mathrm{d}(Re \, z_x) \, \mathrm{d}(Im \, z_x) \, \mathrm{d}(Re \, z_y) \, \mathrm{d}(Im \, z_y)}{\pi^2} \, |\mathbf{z}\rangle \, \langle \mathbf{z}| = \int \dots \int \frac{\mathrm{d}^4 \mathbf{z}}{\pi^2} \, |\mathbf{z}\rangle \, \langle \mathbf{z}| = 1 \,, \tag{1.10}$$

que pode ser facilmente comprovada, quando se substitui o estado coerente pela sua expansão na base  $|n_x; n_y\rangle$ .

#### Outros Aspectos dos Estados Coerentes

Além dos aspectos destacados até agora, os estados coerentes ainda possuem outras características importantes. Uma delas é que a sua representação no espaço de coordenadas ou momento é uma função de onda com formato gaussiano de largura média igual a  $b_r$  ou  $c_r$ , respectivamente. Sendo que, para o oscilador harmônico simples, este pacote não se deforma durante a sua evolução temporal, ou seja, ele mantém a coerência, justificando assim o seu nome.

É interessante notar que a discussão realizada no parágrafo anterior, acrescentada ao fato que  $b_r \cdot c_r = \hbar$ , implica que a representação dos estados coerentes no espaço de fase é um pacote gaussiano de mínima largura, segundo o Princípio da Incerteza. Assim, podemos considerar que estes estados são equivalentes a pontos quânticos no espaço de fase. E quando  $\hbar$  tende a zero, as suas incertezas (ou larguras) também, de modo que temos a representação de um estado clássico no espaço de fase: um ponto.

Apesar desta introdução aos estados coerentes relacioná-los exclusivamente com o oscilador harmônico simples, esclarecemos que tais estados podem ser aplicados diretamente a outros sitemas físicos, tendo a mesma definição (1.5), sendo agora  $b_r$  e  $c_r$  incertezas arbitrárias na posição e momento respectivamente, satisfazendo  $b_r \cdot c_r = \hbar$ . Nestes casos, a concordância com o Princípio da Correspondência e a não deformidade do pacote durante a evolução temporal não é necessariamente satisfeita, mas continuam sendo os estados gaussianos de mínima incerteza no espaço de fase, mantendo as relações de completeza e de não ortogonalidade. É devido a esta arbitrariedade na definição dos estados coerentes, mais o fato de podermos interpretá-los como sendo os estados mais clássicos possíveis, que os utilizamos neste trabalho.

# 1.2 Propagador Semiclássico na Representação de Estados Coerentes em Duas Dimensões

Uma versão unidimensional do formalismo apresentado nesta seção já foi desenvolvida [14], sendo que sua aplicação para alguns sistemas físicos [15], [16] e [13], gerou bons resultados. Para duas dimensões, podemos encontrá-lo na referência [17], sendo este trabalho a sua primeira aplicação.

O propagador para um operador hamiltoniano independente do tempo é escrito como:

$$K\left(\mathbf{z}_{(N)}^{*},\,\mathbf{z}_{(0)},\,T\right) = \left\langle\mathbf{z}_{(N)}\left|e^{-i\hat{H}T/\hbar}\right|\mathbf{z}_{(0)}\right\rangle. \tag{1.11}$$

A interpretação física para este objeto fica bastante trivial ao identificarmos o operador de evolução temporal para um hamiltoniano independente do tempo,  $\exp\left(-i\hat{H}T/\hbar\right)$ . Podemos então concluir que  $K\left(\mathbf{z}_{(N)}^*, \mathbf{z}_{(0)}, T\right)$  nada mais é do que a projeção do estado  $|\mathbf{z}_{(0)}\rangle$ , evoluído temporalmente segundo  $\hat{H}$  até o tempo T, sobre o estado  $|\mathbf{z}_{(N)}\rangle$ . E, portanto, o módulo ao quadrado desta expressão representa a probabilidade do estado  $|\mathbf{z}_{(0)}\rangle$ , após um tempo T, evoluir para  $|\mathbf{z}_{(N)}\rangle$ .

Para iniciarmos a aproximação, aplicamos o conceito de integrais de trajetória [9], por meio do qual o propagador (1.11) pode ser escrito como um produto de propagadores infinitesimais. Ao proceder desta maneira, o primeiro passo é dis-

cretizar o tempo T em N infinitésimos de duração  $\epsilon$ , e introduzir, entre cada  $e^{-i\hat{H}\epsilon/\hbar}$ , (N-1) identidades (1.10):

$$K\left(\mathbf{z}_{(N)}^{*}, \, \mathbf{z}_{(0)}, \, T\right) = \int \prod_{j=1}^{N-1} \left(\frac{\mathrm{d}^{4}\mathbf{z}_{(j)}}{\pi^{2}}\right) \times \left\langle \mathbf{z}_{(N)} \left| e^{-i\hat{H}\epsilon/\hbar} \right| \mathbf{z}_{(N-1)} \right\rangle \dots$$
$$\dots \left\langle \mathbf{z}_{(\mathbf{k}+\mathbf{1})} \left| e^{-i\hat{\mathbf{H}}\epsilon/\hbar} \right| \mathbf{z}_{(\mathbf{k})} \right\rangle \dots \left\langle \mathbf{z}_{(1)} \left| e^{-i\hat{H}\epsilon/\hbar} \right| \mathbf{z}_{(0)} \right\rangle . \tag{1.12}$$

Para continuar a resolução desta integral, devemos identificar o propagador infinitesimal, destacado em negrito na equação (1.12). Então, fazendo uso do limite  $\epsilon \to 0$ , podemos expandir a exponencial  $e^{-i\hat{H}\epsilon/\hbar}$  até primeira ordem em  $\epsilon$ , de modo que:

$$\left\langle \mathbf{z}_{(k+1)} \left| e^{-i\hat{H}\epsilon/\hbar} \right| \mathbf{z}_{(k)} \right\rangle \approx \left\langle \mathbf{z}_{(k+1)} | \mathbf{z}_{(k)} \right\rangle \left[ 1 - \frac{i\epsilon}{\hbar} \, \tilde{H}_{k+\frac{1}{2}} \right],$$
 (1.13)

onde:

$$\tilde{H}_{k+\frac{1}{2}} \equiv \frac{\left\langle \mathbf{z}_{(k+1)} \middle| \hat{H} \middle| \mathbf{z}_{(k)} \right\rangle}{\left\langle \mathbf{z}_{(k+1)} \middle| \mathbf{z}_{(k)} \right\rangle}.$$
(1.14)

Neste ponto é interessante usar a relação (1.9) para o termo  $\langle \mathbf{z}_{(k+1)} | \mathbf{z}_{(k)} \rangle$ . Fazendo isto e lembrando que o termo entre colchetes na equação (1.13) pode ser aproximado pela exponencial exp $\left[-i\frac{\epsilon}{\hbar}\tilde{H}_{k+\frac{1}{2}}\right]$ , obtemos:

$$\left\langle \mathbf{z}_{(k+1)} \left| e^{-i\hat{H}\epsilon/\hbar} \right| \mathbf{z}_{(k)} \right\rangle = \exp \left\{ -i\frac{\epsilon}{\hbar} \tilde{H}_{k+\frac{1}{2}} + \sum_{r=x,y} \left[ -\frac{1}{2} \left( \left| z_{r(k+1)} \right|^2 + \left| z_{r(k)} \right|^2 \right) + z_{r(k+1)}^* \cdot z_{r(k)} \right] \right\}.$$
 (1.15)

Com esta última expressão podemos escrever o propagador mais simplificadamente:

$$K\left(\mathbf{z}_{(N)}^{*},\,\mathbf{z}_{(0)},\,T\right) = \int \dots \int \prod_{j=1}^{N-1} \left(\frac{\mathrm{d}^{4}\mathbf{z}_{(j)}}{\pi^{2}}\right) \times \exp\left[\frac{i}{\hbar}\,S(w)\right],\tag{1.16}$$

onde w é o conjunto dos pontos:  $(z_{x\,(0)}^*,\,\ldots,\,z_{x\,(N)}^*,\,z_{y\,(0)}^*,\,\ldots,\,z_{y\,(N)}^*,\,z_{x\,(0)}^*,\ldots,\,z_{x\,(N)}^*,\,z_{y\,(0)}^*,\ldots,\,z_{y\,(N)}^*,\,z_{x\,(0)}^*,\ldots,\,z_{x\,(N)}^*,\,z_{y\,(N)$ 

$$S(w) = \sum_{k=0}^{N-1} -i\hbar \left\{ \sum_{r=x,y} \left[ -\frac{1}{2} \left( z_{r(k+1)}^* \cdot z_{r(k+1)} + z_{r(k)}^* \cdot z_{r(k)} \right) + z_{r(k+1)}^* \cdot z_{r(k)} \right] - i\frac{\epsilon}{\hbar} \tilde{H}_{k+\frac{1}{2}} \right\}.$$
(1.17)

#### 1.2.1 Aproximação de Fase Estacionária

Para resolver a integral (1.16), utilizaremos a aproximação de fase estacionária [18]. A idéia básica deste método consiste na identificação dos pontos que mais contribuem para o cálculo da integral. No limite quase clássico, quando  $\hbar \to 0$ , o integrando da equação (1.16) oscila muito para qualquer pequena variação nos elementos de S(w), devido ao argumento da exponencial complexa ficar muito grande. Como qualquer integral tende a zero nas regiões onde o integrando oscile muito rapidamente, teremos valores significativos para a integral apenas nas regiões onde não haja variação da fase S(w) pelo menos em primeira ordem; em outras palavras, quando S(w) for uma fase estacionária.

Supomos então a existência da solução  $S(\bar{w})$ , que é constituída pelos pontos que satisfazem a condição de fase estacionária, e expandimos S(w) em torno dela. Note que  $\bar{w}$  são os pontos estacionários para os intervalos de tempo indo de 0 a T, portanto  $S(\bar{w})$  é também chamada de trajetória estacionária. Expandindo S(w) em torno de  $S(\bar{w})$ , temos:

$$S(w) = S(\bar{w}) + \delta S + \frac{1}{2} \delta^2 S + \dots,$$
 (1.18)

onde, por construção:

$$\delta S = \sum_{j=1}^{N-1} \left[ \left( \frac{\partial S}{\partial z_{x(j)}} \right) \Big|_{w=\bar{w}} \delta z_{x(j)} + \left( \frac{\partial S}{\partial z_{x(j)}^*} \right) \Big|_{w=\bar{w}} \delta z_{x(j)}^* + \left( \frac{\partial S}{\partial z_{y(j)}} \right) \Big|_{w=\bar{w}} \delta z_{y(j)}^* + \left( \frac{\partial S}{\partial z_{y(j)}^*} \right) \Big|_{w=\bar{w}} \delta z_{y(j)}^* \right] = 0.$$

$$(1.19)$$

Vale lembrar que na equação acima, os elementos para j=0 e j=N não aparecem porque  $z_{r(0)},\,z_{r(0)}^*,\,z_{r(N)},\,z_{r(N)}^*$  são constantes para a integração. Para

resolver a equação (1.19), basta igualar todos os coeficientes de  $\delta z_{r(j)}^*$  e  $\delta z_{r(j)}$  a zero. Após este procedimento, a forma final fica:

$$-z_{r(k)}^{*} + z_{r(k+1)}^{*} - \frac{i\epsilon}{\hbar} \frac{\partial \tilde{H}_{k+\frac{1}{2}}}{\partial z_{r(k)}} = 0, \quad k = 1, \dots, N-1$$

$$z_{r(k)} - z_{r(k+1)} - \frac{i\epsilon}{\hbar} \frac{\partial \tilde{H}_{k+\frac{1}{2}}}{\partial z_{r(k+1)}^{*}} = 0, \quad k = 0, \dots, N-2$$
(1.20)

onde lembramos que r=x ou y e que estas expressões definem a trajetória estacionária  $z_{r(j)}=\bar{z}_{r(j)}$  e  $z_{r(j)}^*=\bar{z}_{r(j)}^*$ . Estendendo estas equações para o limite contínuo, obtemos:

$$\dot{z}_r = -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial z_r^*} \quad e \quad \dot{z}_r^* = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial z_r}.$$
(1.21)

Portanto, dizer que a trajetória estacionária possue variação em primeira ordem nula é equivalente a dizer que  $\bar{w}$  satisfaz as equações (1.21). Temos então como determinar, inclusive no limite contínuo, os pontos de maior contribuição para o cálculo da integral (1.16), restando somente encontrar as correções em segunda ordem para realizá-lo. Porém, antes de iniciar esta etapa, é necessário fazer algumas observações a respeito das equações (1.20) e (1.21).

### 1.2.2 Espaço de Fase Estendido

Escrevendo as equações (1.21) em termos dos valores médios  $p_r$  e r, notamos que a solução estacionária é descrita pela equação da trajetória clássica para estas variáveis, sendo regida pela hamiltoniana suavizada  $\tilde{H}$ . Ou seja, as equações (1.21) são equivalentes às equações de Hamilton governadas por  $\tilde{H}$ , para as coordenadas do centro do estado coerente. Entretanto ao tentarmos resolver esta equação, encontraremos o seguinte problema: fixando os pontos iniciais e finais,  $z_r(0) = z_{r(0)}$  e  $z_r^*(T) = z_{r(N)}^*$ , estaríamos restringindo muito as soluções destas equações. Seriam muitos os parâmetros dados! Veja que é muito difícil determinar uma trajetória quando fornecemos todas as variáveis: os pontos iniciais e finais, o tempo de propagação e a função hamiltoniana que rege sua dinâmica.

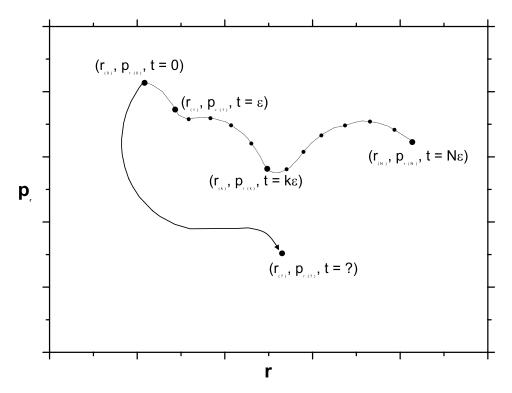


Figura 1.1: Espaço de fase arbitrário. Representamos a única trajetória clássica determinada pela evolução temporal do estado  $(r_{(0)}, p_{r(0)}, t = 0)$ , enfatizando a inexistência de uma órbita que o conectasse a pontos fora da trajetória clássica, como por exemplo  $(r_{?}, p_{r?}, t = ?)$ .

Para ilustrar esta idéia veja a figura 1.1, onde temos representado um espaço de fase arbitrário. Note que dado um estado inicial  $(r_{(0)}, p_{r(0)}, t = 0)$  sob ação da halmitoniana definida pelo sistema físico, existe uma única trajetória que descreve sua evolução temporal:  $(r_{(k)}, p_{r(k)}, t = k\epsilon)$ , para k = 1, 2, ..., N. Se, por exemplo, estivermos procurando uma trajetória que conecte este ponto inicial a outro fora de  $(r_{(k)}, p_{r(k)}, t = k\epsilon)$ , como por exemplo  $(r_{(0)}, p_{r(0)}, t = 0) \rightarrow (r_{?}, p_{r?}, t = ?)$ , certamente não a encontraremos, limitando muito a nossa aproximação do propagador; só valeria para os estados coerentes  $|\mathbf{z}_{(0)}\rangle \in |\mathbf{z}_{(N)}\rangle$  onde as médias  $r_{(0)}, p_{r(0)}$  e  $r_{(N)}, p_{r(N)}$  fossem conectadas por uma trajetória clássica de período T.

Este problema pode ser resolvido ao notar que  $z_{r(0)}^*$  e  $z_{r(N)}$  não aparecem em (1.20), sendo portanto desvinculados da equação da trajetória, a não ser pela relação com seus respectivos complexos conjugados. Então, se quebrarmos este

vínculo entre  $z_r$  e  $z_r^*$ , fazendo  $z_r(0) = z_{r(0)}$  e  $z_r^*(T) = z_{r(N)}^*$ , mas  $z_r^*(0) \neq z_{r(0)}^*$  e  $z_r(T) \neq z_{r(N)}$ , conseguimos uma liberdade maior nas condições de contorno, facilitando a obtenção da trajetória. Isto pode ser entendido como se se tratasse da procura de duas trajetórias: a que começa em  $z_{r(0)}$ , mas que não chega em  $z_{r(N)}$ , e a outra, não totalmente independente desta, que não começa em  $z_{r(0)}^*$ , mas termina em  $z_{r(N)}^*$ .

O procedimento descrito no parágrafo anterior é equivalente a introduzirmos um espaço de fase complexo (ou estendido). Veja que, simplificadamente,  $z_r = r' + ip'_r \neq z^*_r = r' - ip'_r$ , quando r' e  $p'_r$  são números complexos. Como conseqüência disto, z e  $z^*$  agem como se um não fosse o complexo conjugado do outro. Matematicamente, o que ocorre é que o caminho onde a fase da equação (1.16) fica estacionária não está no espaço de fase real, havendo necessidade de considerar a dimensão complexa para encontrá-la. Isto é o que explica o fato do nosso trabalho basear-se em trajetórias complexas.

Para não haver confusão neste espaço de fase complexo, introduziremos uma nova notação que substitua  $z_r$  e  $z_r^*$ , pois como vimos, devem ser tratados de forma independente:

$$z_r \to u_r = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{r}{b_r} + i \frac{p_r}{c_r} \right) \quad e \quad z_r^* \to v_r = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{r}{b_r} - i \frac{p_r}{c_r} \right) ,$$
 (1.22)

onde agora, r e  $p_r$  são variáveis complexas. Nesta nova notação, as equações (1.21) ficam:

$$i\hbar \dot{u}_r = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial v_r} \quad e \quad -i\hbar \dot{v}_r = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial u_r}$$
 (1.23)

Neste novo espaço de fase as condições de contorno não restringem totalmente as soluções de (1.23), e podem ser representadas por:

$$z_{r(0)} = u_r(0) = u'_r = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{r_{(0)}}{b_r} + i \frac{p_{r(0)}}{c_r} \right),$$

$$z_{r(N)}^* = v_r(T) = v''_r = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{r_{(N)}}{b_r} - i \frac{p_{r(N)}}{c_r} \right),$$
(1.24)

onde lembramos que  $r_{(0)}$ ,  $p_{r(0)}$  e  $r_{(N)}$ ,  $p_{r(N)}$  são as médias do estado coerente inicial e final respectivamente, e portanto são parâmetros reais.

Antes de prosseguir, devemos realizar a mudança de notação para as variáveis de integração. Para isto, devemos calcular o jacobiano da transformação, que pode ser facilmente verificado como sendo -1/4. Desta forma, temos:

$$d^{4}\mathbf{z}_{j} = \left[d(\operatorname{Re} z_{x}) d(\operatorname{Im} z_{x}) d(\operatorname{Re} z_{y}) d(\operatorname{Im} z_{y})\right]_{j} \rightarrow \left[\frac{du_{x} dv_{x} du_{y} dv_{y}}{-4}\right]_{j}. \quad (1.25)$$

#### 1.2.3 Integral Gaussiana

Dando continuidade aos nossos cálculos, substituiremos a equação (1.18) na (1.16), já que toda a contribuição para a integral está próximo de  $S(\bar{w})$ . A forma do propagador após esta substituição fica:

$$K(\mathbf{v}'', \mathbf{u}', T) = \mathcal{I} \exp\left[\frac{i}{\hbar} S(\bar{w})\right],$$
 (1.26)

sendo que aqui já foi feita a mudança de variáveis dada pelas relações (1.22) e (1.25). O objeto  $\mathcal{I}$  vale:

$$\mathcal{I} = \int \dots \int \prod_{j=1}^{N-1} \left( \frac{\mathrm{d}u_x \, \mathrm{d}v_x \, \mathrm{d}u_y \, \mathrm{d}v_y}{-4\pi^2} \right)_j \times \exp\left[ \frac{i}{2\hbar} \, \delta^2 S \right]. \tag{1.27}$$

Para resolvermos a integral acima, devemos analisar a variação em segunda ordem  $\delta^2 S$ , em relação à trajetória estacionária. A partir da equação (1.19), podemos obter facilmente este valor através de métodos usuais:

$$\frac{i}{2\hbar} \delta^{2} S = -\frac{1}{2} \sum_{r,r'=x,y} \left\{ \sum_{k=1}^{N-2} \left[ 2 C_{r\,r'}^{k+1/2} \delta v_{r\,(k+1)} \delta u_{r'\,(k)} - \delta v_{r\,(k+1)} \delta u_{r\,(k)} \right] + \sum_{k=1}^{N-1} \left[ A_{r\,r'}^{k} \delta v_{r\,(k)} \delta v_{r'\,(k)} + B_{r\,r'}^{k} \delta u_{r\,(k)} \delta u_{r'\,(k)} + \delta v_{r\,(k)} \delta u_{r\,(k)} \right] \right\}, \quad (1.28)$$

onde:

$$\mathcal{A}_{r\,r'}^{k} = \frac{i\epsilon}{\hbar} \left( \frac{\partial^{2} \tilde{H}_{k-\frac{1}{2}}}{\partial v_{r\,(k)} \partial v_{r'\,(k)}} \right) \Big|_{S=S(\bar{w})}$$

$$\mathcal{B}_{r\,r'}^{k} = \frac{i\epsilon}{\hbar} \left( \frac{\partial^{2} \tilde{H}_{k+\frac{1}{2}}}{\partial u_{r\,(k)} \partial u_{r'\,(k)}} \right) \Big|_{S=S(\bar{w})}$$

$$\mathcal{C}_{r\,r'}^{k+1/2} = \frac{i\epsilon}{\hbar} \left( \frac{\partial^{2} \tilde{H}_{k+\frac{1}{2}}}{\partial v_{r\,(k+1)} \partial u_{r'\,(k)}} \right) \Big|_{S=S(\bar{w})}$$
(1.29)

Com a ajuda da relação (1.28), podemos notar que a equação (1.27) tem a forma de uma integral gaussiana com um argumento exponencial não diagonalizado. Ou seja, podemos escrever:

$$\frac{i}{2\hbar} \delta^2 S = -\frac{1}{2} \mathbf{v}^{\mathbf{T}} \mathbf{Q} \mathbf{v}, \tag{1.30}$$

onde  $v^T$  é a matriz transposta de v:

$$\mathbf{v} = \begin{pmatrix} \delta u_{x \, (N-1)} \\ \delta u_{y \, (N-1)} \\ \delta v_{x \, (N-1)} \\ \delta v_{x \, (N-1)} \\ \delta u_{x \, (1)} \\ \delta u_{y \, (1)} \\ \delta v_{x \, (1)} \\ \delta v_{y \, (1)} \end{pmatrix} \mathbf{e} \ \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \mathbf{B}^{N-1} & \mathbf{I} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots \\ \mathbf{I} & \mathbf{A}^{N-1} & \mathbf{C}^{N-3/2} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots \\ \mathbf{0} & \mathbf{C}^{\mathbf{T}^{N-3/2}} & \mathbf{B}^{N-2} & \mathbf{I} & \mathbf{0} & \dots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{I} & \mathbf{A}^{N-2} & \mathbf{C}^{N-5/2} & \dots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{C}^{\mathbf{T}^{N-5/2}} & \mathbf{B}^{N-3} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix},$$

sendo que  $\mathbf{C}^{\mathrm{T}^{k+1/2}}$  é a transposta da matriz  $\mathbf{C}^{k+1/2},$ e:

$$\mathbf{A}^{k} = \begin{pmatrix} \mathcal{A}_{x\,x}^{k} & \mathcal{A}_{x\,y}^{k} \\ \mathcal{A}_{y\,x}^{k} & \mathcal{A}_{y\,y}^{k} \end{pmatrix} \qquad \mathbf{B}^{k} = \begin{pmatrix} \mathcal{B}_{x\,x}^{k} & \mathcal{B}_{x\,y}^{k} \\ \mathcal{B}_{y\,x}^{k} & \mathcal{B}_{y\,y}^{k} \end{pmatrix}$$
$$\mathbf{C}^{k+1/2} = \begin{pmatrix} \mathcal{C}_{x\,x}^{k+1/2} & \mathcal{C}_{x\,y}^{k+1/2} \\ \mathcal{C}_{y\,x}^{k+1/2} & \mathcal{C}_{y\,y}^{k+1/2} \end{pmatrix} \qquad \mathbf{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

A idéia então é obter uma transformação unitária  $U \Rightarrow U U^{\dagger} = 1$ , de modo que a matriz transformada  $Q' = U^{\dagger} Q U$  seja diagonal. Com isso chegaríamos a uma integral de variáveis separáveis, onde cada uma delas teria formato gaussiano, cujo modo de resolver é bastante conhecido. Quanto às variáveis de integração, lembramos que elas não são alteradas, pois a transformação, como já comentamos, é unitária.

Para uma integral gaussiana geral, podemos obter facilmente o resultado:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}(\alpha_1 x_1^2 + \dots + \alpha_M x_M^2)} dx_1 \dots dx_M = \sqrt{\frac{(2\pi)^M}{|\alpha_1 \dots \alpha_M|}} e^{-\frac{i}{2}(\tilde{\sigma}_1 + \dots + \tilde{\sigma}_M)}, \qquad (1.31)$$

onde  $\tilde{\sigma}_j$  é a fase de  $\alpha_j$ , sendo  $j=1, 2, \ldots, N$ .

Tendo em vista este resultado, podemos retornar à equação (1.27). A menos do termo  $-4\pi^2$  advindo do jacobiano, esta integral, depois de feita a transformação unitária, fica idêntica à equação (1.31) para M=4(N-1). Podemos inclusive identificar os coeficientes  $\alpha_j$  como sendo os autovalores de Q', sendo o produto deles, portanto, o determinante desta matriz, que por sua vez é igual ao determinante de Q. Já o termo  $(2\pi)^{M/2}$  de (1.31), verificamos que ele cancela exatamente o termo  $(4\pi^2)^{N-1}$  de  $\mathcal{I}$ . Formalizamos este raciocínio escrevendo:

$$\mathcal{I} = \sqrt{\frac{1}{|\Delta|}} e^{-\frac{i}{2}\sigma}, \qquad (1.32)$$

onde  $\Delta$  é o determinante de Q e  $\sigma$  a sua fase.

#### 1.2.4 Cálculo do Determinante

Como vemos na última equação, o cálculo do propagador envolve o conhecimento do determinante de Q (1.30). Quando começamos a resolvê-lo pelo lado esquerdo superior desta matriz, notamos que ele se relaciona recursivamente com outros cinco determinantes da seguinte maneira:

$$\Delta^{(N-1)} - \Delta^{(N-2)} \quad = \quad -\mathcal{B}_{x\,x}^{N-1} \Delta_{2\,2}^{(N-1)} - \mathcal{B}_{x\,y}^{N-1} \Delta_{1\,2}^{(N-1)} - \mathcal{B}_{y\,x}^{N-1} \Delta_{2\,1}^{(N-1)} - \mathcal{B}_{y\,x}^{N-1} \Delta_{$$

$$- \mathcal{B}_{yy}^{N-1}\Delta_{11}^{(N-1)} + \theta(\epsilon^{2}),$$

$$\Delta_{11}^{(N-1)} - \Delta_{11}^{(N-2)} = \mathcal{A}_{yy}^{N-1}\Delta_{1}^{(N-2)} - \mathcal{C}_{yx}^{N-3/2}\Delta_{12}^{(N-2)} - \mathcal{C}_{yx}^{N-3/2}\Delta_{12}^{(N-2)} - \mathcal{B}_{xx}^{N-1}\Delta_{0}^{(N-2)} - 2\mathcal{C}_{yy}^{N-3/2}\Delta_{11}^{(N-2)} + \theta(\epsilon^{2}),$$

$$\Delta_{22}^{(N-1)} - \Delta_{22}^{(N-2)} = \mathcal{A}_{xx}^{N-1}\Delta_{0}^{(N-2)} - 2\mathcal{C}_{xx}^{N-3/2}\Delta_{22}^{(N-2)} - \mathcal{C}_{xy}^{N-3/2}\Delta_{12}^{(N-2)} - \mathcal{C}_{yx}^{N-3/2}\Delta_{12}^{(N-2)} - \mathcal{C}_{yx}^{N-3/2}\Delta_{11}^{(N-2)} - \mathcal{C}_{yx}^{N-3/2}\Delta_{11}^{(N-2)} - \mathcal{C}_{yx}^{N-3/2}\Delta_{11}^{(N-2)} - \mathcal{C}_{yx}^{N-3/2}\Delta_{11}^{(N-2)} - \mathcal{C}_{xy}^{N-3/2}\Delta_{11}^{(N-2)} - \mathcal{C}_{xy}^{N-3/2$$

onde  $\Delta_0$  é o determinante de Q sem as primeiras e segundas, linhas e colunas, e  $\Delta_{ij}$ , sem a primeira, segunda e (i+2)-ésima linha, e sem a primeira, segunda e (j+2)-ésima coluna. O índice localizado no canto superior direito dos determinantes é o indicador de passos de tempo. Por exemplo, para (N-1), a matriz Q está completa, ou seja, formada por todos os elementos para o tempo indo de 0 a T, conforme está representada em (1.30). Para (N-2), Q tem o último passo de tempo a menos, ou seja, não tem as quatro primeiras linhas e colunas. E assim por diante. Para maiores detalhes, é interessante a consulta à referência [17].

Neste ponto é interessante introduzir uma outra notação que tem o objetivo de facilitar a apresentação dos cálculos:

$$\begin{aligned}
u_{x} &\to \chi_{1} & \delta u_{x} \to \xi_{1} \\
u_{y} &\to \chi_{2} & \delta u_{y} \to \xi_{2} \\
v_{x} &\to \chi_{3} & \delta v_{x} \to \xi_{3} \\
v_{y} &\to \chi_{4} & \delta v_{y} \to \xi_{4}
\end{aligned} e \frac{i\epsilon}{\hbar} \mathcal{H}_{lm} = \begin{pmatrix}
\mathcal{B}_{x\,x} & \mathcal{B}_{x\,y} & \mathcal{C}_{x\,x} & \mathcal{C}_{y\,x} \\
\mathcal{B}_{y\,x} & \mathcal{B}_{y\,y} & \mathcal{C}_{x\,y} & \mathcal{C}_{y\,y} \\
\mathcal{C}_{x\,x} & \mathcal{C}_{x\,y} & \mathcal{A}_{x\,x} & \mathcal{A}_{x\,y} \\
\mathcal{C}_{y\,x} & \mathcal{C}_{y\,y} & \mathcal{A}_{y\,x} & \mathcal{A}_{y\,y}
\end{pmatrix}, (1.34)$$

sendo que nesta última expressão, queremos dizer que o elemento correspondente à linha l e à coluna m da matriz será substituído por  $\frac{i\epsilon}{\hbar}\mathcal{H}_{lm}$ .

Aplicando esta nova notação e tomando o limite contínuo ( $\epsilon \to 0$ ), as relações de recorrência (1.33) podem ser representadas de forma mais compacta. Omitindo a dependência temporal escrevemos:

$$-i\hbar\dot{\mathbf{D}} = \mathbf{H}\,\mathbf{D}\,,\tag{1.35}$$

onde:

$$D = \begin{pmatrix} \Delta \\ \Delta_{11} \\ \Delta_{22} \\ \Delta_{12} \\ \Delta_{21} \\ \Delta_{0} \end{pmatrix} \text{ e } H = \begin{pmatrix} 0 & -\mathcal{H}_{22} & -\mathcal{H}_{11} & -\mathcal{H}_{12} & -\mathcal{H}_{12} & 0 \\ \mathcal{H}_{44} & -2\mathcal{H}_{24} & 0 & -\mathcal{H}_{14} & -\mathcal{H}_{14} & -\mathcal{H}_{11} \\ \mathcal{H}_{33} & 0 & -2\mathcal{H}_{13} & -\mathcal{H}_{23} & -\mathcal{H}_{23} & -\mathcal{H}_{22} \\ \mathcal{H}_{34} & -\mathcal{H}_{23} & -\mathcal{H}_{14} & -\mathcal{H}_{+} & 0 & \mathcal{H}_{12} \\ \mathcal{H}_{34} & -\mathcal{H}_{23} & -\mathcal{H}_{14} & 0 & -\mathcal{H}_{+} & \mathcal{H}_{12} \\ 0 & \mathcal{H}_{33} & \mathcal{H}_{44} & -\mathcal{H}_{34} & -\mathcal{H}_{34} & -\mathcal{H}_{34} & -2\mathcal{H}_{+} \end{pmatrix},$$

para  $\mathcal{H}_{\pm} = (\mathcal{H}_{13} \pm \mathcal{H}_{24}).$ 

A intenção agora é associar o determinante  $\Delta$  a alguma quantidade física do sistema. Para ficar mais fácil a associação, vamos transformar o objeto D (1.35) da seguinte maneira:

$$D' = D e^{\frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}_+ dt}, \qquad (1.36)$$

de modo que a equação (1.35) seja escrita como:

$$-i\hbar\dot{\mathbf{D}}' = \mathbf{H}'\,\mathbf{D}'\,,\tag{1.37}$$

onde agora:

$$\mathbf{H}' = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{+} & -\mathcal{H}_{2\,2} & -\mathcal{H}_{1\,1} & -\mathcal{H}_{1\,2} & -\mathcal{H}_{1\,2} & 0 \\ \mathcal{H}_{4\,4} & \mathcal{H}_{-} & 0 & -\mathcal{H}_{1\,4} & -\mathcal{H}_{1\,4} & -\mathcal{H}_{1\,1} \\ \mathcal{H}_{3\,3} & 0 & -\mathcal{H}_{-} & -\mathcal{H}_{2\,3} & -\mathcal{H}_{2\,3} & -\mathcal{H}_{2\,2} \\ \mathcal{H}_{3\,4} & -\mathcal{H}_{2\,3} & -\mathcal{H}_{1\,4} & 0 & 0 & \mathcal{H}_{1\,2} \\ \mathcal{H}_{3\,4} & -\mathcal{H}_{2\,3} & -\mathcal{H}_{1\,4} & 0 & 0 & \mathcal{H}_{1\,2} \\ 0 & \mathcal{H}_{3\,3} & \mathcal{H}_{4\,4} & -\mathcal{H}_{3\,4} & -\mathcal{H}_{3\,4} & -\mathcal{H}_{+} \end{pmatrix}.$$

#### A Matriz Q para T=0

Nesta seção, pretendemos avaliar o valor dos determinantes definidos pelas relações (1.33) para pequenos valores de T, pois estes resultados serão úteis mais adiante. Para visualizar melhor, observe que a matriz Q, para somente um passo de tempo  $\epsilon$ ,  $\acute{e}$  escrita como:

$$Q(\epsilon) = \begin{pmatrix} \mathcal{B}_{x\,x}^{1} & \mathcal{B}_{x\,y}^{1} & 1 & 0 \\ \mathcal{B}_{y\,x}^{1} & \mathcal{B}_{y\,y}^{1} & 0 & 1 \\ 1 & 0 & \mathcal{A}_{x\,x}^{1} & \mathcal{A}_{x\,y}^{1} \\ 0 & 1 & \mathcal{A}_{y\,x}^{1} & \mathcal{A}_{y\,y}^{1} \end{pmatrix}.$$
(1.38)

Através deste objeto e da definição de cada determinante, concluimos que temos como condições iniciais ( $\epsilon \to 0$ ):

$$\Delta(0) = 1$$
 e  $\Delta_m(0) = 0$ , para  $m = 0, 11, 12, 22 e 21.$  (1.39)

# 1.2.5 Matriz Antissimétrica de Deslocamento e o Determinante de Q

Para continuarmos a resolução do propagador, introduziremos a chamada matriz antissimétrica de deslocamento, cujos elementos são definidos por  $T_{ij} = \xi_i \xi'_j - \xi'_i \xi_j$ , onde  $\xi_k$  e  $\xi'_k$  são pequenos deslocamentos definidos pelas equações (1.34). Ressaltamos que o símbolo "linha" ('), na definição de  $T_{ij}$ , não tem qualquer relação com a definição (1.36); estamos somente representando a idéia de  $\xi_k$  e  $\xi'_k$  serem quaisquer pequenos deslocamentos não necessariamente iguais entre si. De fato, ocorre que este objeto T é quem está relacionado com os determinantes de D. Para estabelecermos esta relação, primeiro devemos escrever as equações (1.23) na nova notação dada pelas equações (1.34):

$$\dot{\chi}_{1} = -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \chi_{3}} \qquad \dot{\chi}_{3} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \chi_{1}}$$

$$\dot{\chi}_{2} = -\frac{i}{\hbar} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \chi_{4}} \qquad \dot{\chi}_{4} = \frac{i}{\hbar} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \chi_{2}}$$

$$(1.40)$$

Considerando estas últimas equações, fica fácil concluir que cada pequeno deslocamento  $\xi_i$  deve obedecer às relações:

$$i\hbar \,\dot{\xi}_1 = \sum_j \mathcal{H}_{3j} \,\xi_j \qquad i\hbar \,\dot{\xi}_3 = -\sum_j \mathcal{H}_{1j} \,\xi_j$$

$$i\hbar \,\dot{\xi}_2 = \sum_j \mathcal{H}_{4j} \,\xi_j \qquad i\hbar \,\dot{\xi}_4 = -\sum_j \mathcal{H}_{2j} \,\xi_j$$

$$(1.41)$$

Agora que sabemos como é a variação temporal de cada um destes deslocamentos, podemos derivar em relação ao tempo alguns componentes da matriz T. São eles:  $T_{12}$ ,  $T_{13}$ ,  $T_{14}$ ,  $T_{23}$ ,  $T_{24}$ ,  $T_{34}$ . Feito isto, podemos estabelecer um sistema composto por todos estes seis componentes e as suas variações temporais. Uma análise mais detalhada deste nos permite estabelecer uma comparação com a equação (1.37), de forma que se relacionam:

$$T_{12} \longleftrightarrow \Delta'_{0} \qquad T_{34} \longleftrightarrow \Delta' \qquad T_{23} \longleftrightarrow \Delta'_{11} T_{14} \longleftrightarrow -\Delta'_{22} \qquad T_{13} \longleftrightarrow \Delta'_{12} \qquad T_{24} \longleftrightarrow -\Delta'_{21}$$

$$(1.42)$$

Como exemplo deste resultado veja que:

$$\dot{T}_{12} = \dot{\xi}_1 \, \xi_2' - \dot{\xi}_1' \, \xi_2 + \xi_1 \, \dot{\xi}_2' - \xi_1' \, \dot{\xi}_2. \tag{1.43}$$

Através das equações (1.41), a última relação pode ser escrita como:

$$i \, \dot{\pi} \, \dot{T}_{12} = (\xi_1 \, \xi_2' - \xi_1' \, \xi_2) \, (\mathcal{H}_{31} + \mathcal{H}_{42}) + (\xi_2 \, \xi_3' - \xi_2' \, \xi_3) \, (-\mathcal{H}_{33})$$

$$+ (\xi_1 \, \xi_4' - \xi_1' \, \xi_4) \, (\mathcal{H}_{44}) + (\xi_1 \, \xi_3' - \xi_1' \, \xi_3) \, (\mathcal{H}_{43}) + (\xi_2 \, \xi_4' - \xi_2' \, \xi_4) \, (-\mathcal{H}_{34}) \qquad (1.44)$$

$$= T_{12} \, (\mathcal{H}_{31} + \mathcal{H}_{42}) - T_{23} \, \mathcal{H}_{33} + T_{14} \, \mathcal{H}_{44} + T_{13} \, \mathcal{H}_{43} - T_{24} \, \mathcal{H}_{34} \,,$$

que é uma equação equivalente à última das (1.37), ao fazermos a substituição definida por (1.42).

Portanto vemos que o determinante que procuramos  $\Delta$  está relacionado com a componente  $T_{3\,4}$  do tensor. Explicitando agora a dependência temporal, podemos escrever esta relação como:

$$\Delta(t) = [\xi_3(t)\,\xi_4'(t) - \xi_3'(t)\,\xi_4(t)] \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \mathcal{H}_+ \,dt'\right) \,. \tag{1.45}$$

Podemos agora definir de forma coerente uma matriz M que propaga temporalmente estes pequenos deslocamentos:  $\xi_i(t) = \sum_{j=1}^4 M_{ij}(t,t') \, \xi_j(t')$ . Aplicando-a diretamente à equação (1.45) para um tempo T, obtemos:

$$\Delta(T) = \left\{ \left( \sum_{j=1}^{4} M_{3j}(T,0) \, \xi_j(0) \right) \left( \sum_{j=1}^{4} M_{4j}(T,0) \, \xi_j'(0) \right) - \left( \sum_{j=1}^{4} M_{3j}(T,0) \, \xi_j'(0) \right) \left( \sum_{j=1}^{4} M_{4j}(T,0) \, \xi_j(0) \right) \right\} \exp\left( -\frac{i}{\hbar} \int_0^T H_+ dt' \right). \quad (1.46)$$

Levando em conta as relações (1.42), percebemos que a maneira de respeitarmos as condições iniciais (1.39) é fazendo  $\xi_j(0) = \delta_{3j}$  e  $\xi'_j(0) = \delta_{4j}$ . De posse destes valores, basta substituí-los na equação (1.46) para obtermos  $\Delta(T)$  em termos dos componentes da matriz  $M_{ij}(T,0)$ :

$$\Delta(T) = \left[ M_{33}(T,0) M_{44}(T,0) - M_{34}(T,0) M_{43}(T,0) \right] \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^T \mathcal{H}_+ dt\right). \tag{1.47}$$

### 1.2.6 A Ação

O nosso objetivo nesta seção é retomar o termo  $\exp[(i/\hbar) S(\bar{w})]$  que aparece na equação (1.26), reescrevendo-o de uma maneira mais adequada. Para facilitar, vamos omitir a "barra" sobre os pontos da trajetória estacionária, já que agora sabemos que qualquer referência à variável  $\mathbf{z}$  ou  $\mathbf{z}^*$  trata-se de pontos que satisfazem a equação (1.21). Podemos reescrever a equação (1.17) da seguinte forma:

$$\frac{i}{\hbar}S(w) = \sum_{k=0}^{N-1} \epsilon \left\{ -\frac{i}{\hbar} \tilde{H}_{k+\frac{1}{2}} + \sum_{r=x,y} \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{z_{r(k+1)}^* - z_{r(k)}^*}{\epsilon} z_{r(k)} - \frac{z_{r(k+1)}^* - z_{r(k)}}{\epsilon} \right) \right] \right\}.$$

$$-z_{r(k+1)}^* \frac{z_{r(k+1)} - z_{r(k)}}{\epsilon} \right] \right\}.$$
(1.48)

Ao alterarmos a notação desta última equação para aquela definida por (1.22), devemos ficar atentos para algumas particularidades. A primeira e imediata é que  $v_{r(N)} = z_{r(N)}^*$  e  $u_{r(0)} = z_{r(0)}$ . O outro ponto mais delicado é que, para deduzirmos a equação (1.17), mantivemos fixos  $|\mathbf{z}_{(0)}\rangle$  e  $\langle \mathbf{z}_{(N)}|$ , que são pontos especiais (de fronteira), de forma que toda operação sobre estes estados nos forneceu resultados em termos de  $z_{r(0)}$  e  $z_{r(N)}^*$ , e também  $z_{r(0)}^*$  e  $z_{r(N)}$ . Portanto, em (1.48) **não** devemos transformar  $z_{r(0)}^* \to v_{r(0)}$  e  $z_{r(N)} \to u_{r(N)}$ , já que  $z_{r(0)}^* \neq v_{r(0)}$  e  $z_{r(N)} \neq u_{r(N)}$ .

Ao tomar o limite ( $\epsilon \to 0$ ) para a expressão (1.48), se desconsiderássemos a discussão realizada no último parágrafo, obteríamos diretamente a equação (1.49), sem os termos que nela estão fora da integral. No entanto, para mantermos a fidelidade àquele raciocínio, devemos subtrair desta integral os termos referentes a k = 1 e k = N - 1, e depois somá-los, sendo que agora  $u_{r(0)}$ ,  $u_{r(N)}$ ,  $v_{r(0)}$  e  $v_{r(N)}$  devem estar na forma de variáveis antigas. Procedendo desta maneira, o resultado final fica:

$$\frac{i}{\hbar}S(w) = \int_0^T \left[ \frac{1}{2} \sum_{r=x,y} (\dot{v}_r \, u_r - v_r \, \dot{u}_r) - \frac{i}{\hbar} \tilde{H}(u, \, v) \right] dt - \\
- \frac{1}{2} \sum_{r=x,y} \left[ \left( \left| z_{r(0)} \right|^2 + \left| z_{r(N)} \right|^2 \right) - \left( u_{r(0)} \, v_{r(0)} + u_{r(N)} \, v_{r(N)} \right) \right]. \tag{1.49}$$

Por fim, definimos a ação complexa S:

$$\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}(\mathbf{v}, \mathbf{u}, T) = \int_{0}^{T} \left[ \frac{1}{2} \sum_{r=x,y} (\dot{v}_{r} u_{r} - v_{r} \dot{u}_{r}) - \frac{i}{\hbar} \tilde{H}(u, v) \right] dt + \frac{1}{2} \sum_{r=x,y} \left( u_{r(0)} v_{r(0)} + u_{r(N)} v_{r(N)} \right), \tag{1.50}$$

que leva este nome pois os resultados obtidos a partir dela são equivalentes aos fornecidos por uma ação clássica:

$$\frac{\partial \mathcal{S}}{\partial v_{r(N)}} = -i\hbar u_{r(N)}, \qquad \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial u_{r(0)}} = -i\hbar v_{r(0)}, \qquad \frac{\partial \mathcal{S}}{\partial T} = -E, \tag{1.51}$$

onde E é a energia complexa:

$$E = \tilde{H}(\mathbf{u}_{(0)}, \mathbf{v}_{(0)}) = \tilde{H}(\mathbf{u}_{(N)}, \mathbf{v}_{(N)})$$
.

#### 1.2.7 A Forma Final do Propagador: um Resumo

Neste tópico, temos a intenção de explicar resumidamente a forma final do propagador, já que, após todos estes cálculos, encontramos uma forma razoável para apresentá-lo. Para maior clareza, adotaremos  $\mathbf{z}_{(N)}^* = \mathbf{z}''^*$  e  $\mathbf{z}_{(0)} = \mathbf{z}'$ .

Da expressão inicial do propagador na representação em estados coerentes,

$$K\left(\mathbf{z}^{\prime\prime\ast},\,\mathbf{z}^{\prime},\,T\right) = \left\langle \mathbf{z}^{\prime\prime}\left|e^{-i\hat{H}T/\hbar}\right|\mathbf{z}^{\prime}\right\rangle\,,$$

aplicamos algumas aproximações, de modo que a sua forma semiclássica ficou sendo escrita como:

$$K\left(\mathbf{z}^{\prime\prime\ast},\,\mathbf{z}^{\prime},\,T\right) \simeq \sum_{\text{traj.}} \sqrt{\mathcal{A}} \,\exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathcal{S} + \frac{i}{2\hbar}\mathcal{G} + i\sigma\right).$$
 (1.52)

Para esta expressão o espaço de fase considerado é complexo, ou seja, o momento e a posição podem ter componentes reais e/ou imaginárias. Quanto ao somatório, ele indica que devemos incluir a contribuição de todas as trajetórias que satisfazem:

$$i\hbar \dot{u}_r = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial v_r}$$
 e  $-i\hbar \dot{v}_r = \frac{\partial \tilde{H}}{\partial u_r}$ ,

para r = x ou y, e sendo:

$$u_r = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{r}{b_r} + i \frac{p_r}{c_r} \right)$$
 e  $v_r = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{r}{b_r} - i \frac{p_r}{c_r} \right)$ ,

onde r é a posição complexa e  $p_r$  o momento complexo relativos a dimensão r. Para as últimas relações, valem as condições de contorno a seguir, onde r', r'',  $p'_r$  e  $p''_r$  são as médias na posição e momento de  $|\mathbf{z}'\rangle$  e  $|\mathbf{z}''\rangle$ , sendo portanto parâmetros reais.

$$z'_{r} = u_{r}(0) = u'_{r} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{r'}{b_{r}} + i \frac{p'_{r}}{c_{r}} \right)$$

$$z'''_{r} = v_{r}(T) = v''_{r} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( \frac{r''}{b_{r}} - i \frac{p''_{r}}{c_{r}} \right)$$
(1.53)

A ação complexa S é dada em termos das soluções  $u_r(t)$  e  $v_r(t)$ , e do hamiltoniano suavizado  $\tilde{H}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = \langle \mathbf{v} | \hat{H} | \mathbf{u} \rangle = (\langle v_x | \otimes \langle v_y |) \hat{H} (|u_x\rangle \otimes |u_y\rangle)$ . A ação complexa é:

$$\frac{i}{\hbar} \mathcal{S}(\mathbf{v}, \mathbf{u}, T) = \int_0^T \left[ \frac{1}{2} \sum_{r=x,y} (\dot{v}_r u_r - v_r \dot{u}_r) - \frac{i}{\hbar} \tilde{H}(u, v) \right] dt + 
+ \frac{1}{2} \sum_{r=x,y} \left[ u_r(0) v_r(0) + u_r(T) v_r(T) \right].$$
(1.54)

A função  $\mathcal G$  depende somente das derivadas parciais de  $\tilde H(\mathbf u, \mathbf v)$  em relação à  $u_r$  e  $v_r$ , sendo escrita como:

$$\mathcal{G}(\mathbf{u}, \mathbf{v}, T) = \int_0^T \left( \frac{\partial^2 \tilde{H}}{\partial u_x \, \partial v_x} + \frac{\partial^2 \tilde{H}}{\partial u_y \, \partial v_y} \right) dt . \tag{1.55}$$

O objeto  $\mathcal{A}$  merece ser ressaltado pois contém a contribuição da matriz M(T,0). Isto indica que  $\mathcal{A}$  é o termo dependente da sensibilidade a pequenos deslocamentos da trajetória (1.23), implicando que o propagador é diretamente proporcional à instabilidade dela.  $\mathcal{A}$  pode ser escrito como:

$$\mathcal{A}(\mathbf{u}, \mathbf{v}, \delta \mathbf{u}, \delta \mathbf{v}, T) = \frac{\exp\left[-\sum_{r=x,y} \left(|u_r(0)|^2 + |v_r(T)|^2\right)\right]}{|\mathcal{M}_{33}(T, 0) \mathcal{M}_{44}(T, 0) - \mathcal{M}_{34}(T, 0) \mathcal{M}_{43}(T, 0)|}, \quad (1.56)$$

onde  $M_{ij}(T,0)$  são os componentes da matriz  $4 \times 4$ , M(T,0), responsável pela evolução temporal dos pequenos deslocamentos  $(\delta u_r \in \delta v_r)$ , indo do tempo 0 até T, em relação às trajetórias  $u_r(t)$  e  $v_r(t)$ . Ou mais esquematicamente:

$$\begin{pmatrix} \delta u_x(T) \\ \delta u_y(T) \\ \delta v_x(T) \\ \delta v_y(T) \end{pmatrix} = M(T,0) \begin{pmatrix} \delta u_x(0) \\ \delta u_y(0) \\ \delta v_x(0) \\ \delta v_y(0) \end{pmatrix}. \tag{1.57}$$

Como último comentário, ressaltamos que  $\sigma$  é a fase acumulada pelas trajetórias  $u_r(t)$  e  $v_r(t)$ , e está relacionada com a fase do denominador do objeto  $\mathcal{A}$ . No entanto, neste trabalho,  $\sigma$  será deixado de lado pois trabalharemos em regiões onde apenas uma trajetória contribui para o cálculo do propagador, tornando-se uma fase global.

#### 1.2.8 Redução do Problema: O Propagador Diagonal

Como vemos pela equação (1.52), a aproximação semiclássica do propagador é escrita em função de **nove parâmetros**: r', r'',  $p'_r$ ,  $p''_r$  (para r=x e y) e T, já considerando fixas as larguras do estado coerente inicial e final. Uma aplicação dessa natureza, levando em conta tantas variáveis, é muito complicada. Então, para tornar esta dissertação mais clara, daqui em diante trabalharemos exclusivamente com o propagador diagonal, ou seja, para:

$$\mathbf{z}' = \mathbf{z}'' = \mathbf{z} \Longrightarrow \begin{cases} r' = r'' = r \\ p'_r = p''_r = p_r \end{cases}$$
 (1.58)

Fisicamente, reduzimos o nosso problema ao cálculo da probabilidade de um estado inicial  $|\mathbf{z}\rangle$  retornar nele mesmo, decorrido um tempo T. Assim, cada resultado apresentado a partir daqui, deve envolver o propagador em função destas **cinco variáveis**:  $x, y, p_x p_y, T$ .

Por último gostaríamos de esclarecer alguns pontos referentes às trajetórias envolvidas no cálculo do propagador diagonal. Nos casos onde exista uma trajetória real que satisfaça (1.23) e (1.24), certamente teremos uma órbita periódica de período T. No caso de não existir esta órbita real, teremos uma trajetória complexa que não é necessariamente periódica. Isto ocorre porque as equações de contorno (1.53) que são responsáveis por este aspecto não limitam as trajetórias à condição de periodicidade para cada uma das oito coordenadas independentemente. As condições de contorno para o propagador diagonal são incomuns, pois exigem o retorno ao valor inicial para combinações lineares das coordenadas, como veremos nas equações (2.5).

## Capítulo 2

# O Método Numérico da Matriz de Monodromia

Como vimos nesta última seção, o cálculo do propagador quântico depende essencialmente das trajetórias complexas que intermeiam o estado inicial e o final. Neste capítulo apresentaremos uma maneira de obter tais trajetórias, utilizando o método numérico da matriz de monodromia [19]. A idéia básica deste consiste em obter sucessivas correções em uma trajetória tentativa, de modo que ela convirja para a solução que satisfaça as equações de movimento e as condições de contorno do problema em questão.

## 2.1 A Dinâmica no Espaço de Fase Estendido

Antes de apresentarmos o método numérico da Matriz de Monodromia, realizaremos a complexificação de uma hamiltoniana genérica  $\tilde{H}(x,y,p_x,p_y)$  e escreveremos as equações de movimento (1.23) e as condições de contorno (1.53) em termos das partes reais e imaginárias das coordenadas do espaço de fase. Desta forma, ao descrever o método, visualisaremos mais diretamente a sua aplicabilidade ao problema de nosso interesse.

Considerando a bidimensionalidade do sistema, utilizaremos a seguinte transformação para a obtenção do espaço de fase estendido:

$$x = x_1 + ix_3$$
  $p_x = p_1 - ip_3$   
 $y = x_2 + ix_4$   $p_y = p_2 - ip_4$  (2.1)

Aplicando-as à forma conhecida da hamiltoniana,  $\tilde{H}(x, y, p_x, p_y)$ , podemos obter  $\tilde{H}(x_1, \ldots x_4, p_1, \ldots, p_4)$ , onde agora a hamiltoniana também é complexa, ou seja,  $\tilde{H} = \tilde{H}_R + i\tilde{H}_I$ . É bom lembrar que as novas variáveis  $x_1, \ldots x_4, p_1, \ldots, p_4$  são reais.

Para converter as equações de movimento (1.23), segundo as transformações (2.1), precisamos de alguns resultados parciais obtidos a partir da definição (1.22):

$$u_{x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \left( \frac{x_{1}}{b_{x}} + \frac{p_{3}}{c_{x}} \right) + i \left( \frac{p_{1}}{c_{x}} + \frac{x_{3}}{b_{x}} \right) \right\}$$

$$u_{y} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \left( \frac{x_{2}}{b_{y}} + \frac{p_{4}}{c_{y}} \right) + i \left( \frac{p_{2}}{c_{y}} + \frac{x_{4}}{b_{y}} \right) \right\}$$

$$v_{x} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \left( \frac{x_{1}}{b_{x}} - \frac{p_{3}}{c_{x}} \right) - i \left( \frac{p_{1}}{c_{x}} - \frac{x_{3}}{b_{x}} \right) \right\}$$

$$v_{y} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \left( \frac{x_{2}}{b_{y}} - \frac{p_{4}}{c_{y}} \right) - i \left( \frac{p_{2}}{c_{y}} - \frac{x_{4}}{b_{y}} \right) \right\}$$

$$e \qquad (2.2)$$

$$\begin{split} &\frac{\partial}{\partial u_x} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left\{ \left( b_x \frac{\partial}{\partial x_1} + c_x \frac{\partial}{\partial p_3} \right) - i \left( c_x \frac{\partial}{\partial p_1} + b_x \frac{\partial}{\partial x_3} \right) \right\} \\ &\frac{\partial}{\partial u_y} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left\{ \left( b_y \frac{\partial}{\partial x_2} + c_y \frac{\partial}{\partial p_4} \right) - i \left( c_y \frac{\partial}{\partial p_2} + b_y \frac{\partial}{\partial x_4} \right) \right\} \\ &\frac{\partial}{\partial v_x} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left\{ \left( b_x \frac{\partial}{\partial x_1} - c_x \frac{\partial}{\partial p_3} \right) + i \left( c_x \frac{\partial}{\partial p_1} - b_x \frac{\partial}{\partial x_3} \right) \right\} \\ &\frac{\partial}{\partial v_y} = \frac{1}{2\sqrt{2}} \left\{ \left( b_y \frac{\partial}{\partial x_2} - c_y \frac{\partial}{\partial p_4} \right) + i \left( c_y \frac{\partial}{\partial p_2} - b_y \frac{\partial}{\partial x_4} \right) \right\} \end{split}$$

Devemos agora aplicar estas relações nas equações (1.23), resolvendo-as para as partes real e imaginária. Se restringirmos a hamiltoniana  $\tilde{H}$  somente a funções analíticas dos números complexos  $u_x$ ,  $u_y$ ,  $v_x$ ,  $v_y$ , poderemos aplicar as condições de Cauchy-Riemann, simplificando assim a forma final das equações de movimento:

$$\dot{x}_j = \frac{\partial \tilde{H}_R}{\partial p_j} \quad \text{e} \quad \dot{p}_j = -\frac{\partial \tilde{H}_R}{\partial x_j},$$
 (2.3)

para  $j=1,\,2,\,3$  e 4. Podemos inclusive escrevê-las de maneira mais conveniente, através de uma forma matricial:

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{J} \left( \mathcal{D} \, \tilde{H}_R \right) \,, \tag{2.4}$$

onde:

$$\mathbf{r} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ p_1 \\ p_2 \\ p_3 \\ p_4 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{J} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{I} \\ -\mathbf{I} & 0 \end{pmatrix} \quad \mathbf{e} \quad \mathcal{D} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_1} \\ \frac{\partial}{\partial x_2} \\ \frac{\partial}{\partial x_3} \\ \frac{\partial}{\partial x_4} \\ \frac{\partial}{\partial p_1} \\ \frac{\partial}{\partial p_2} \\ \frac{\partial}{\partial p_3} \\ \frac{\partial}{\partial p_4} \end{pmatrix},$$

sendo que neste caso I é a matriz identidade de ordem 4.

Outro ponto importante é estabelecermos as condições de contorno (1.24), quando transformadas segundo as relações (2.2):

$$x' = x_1(0) + \frac{b_x}{c_x} p_3(0) \qquad p'_x = p_1(0) + \frac{c_x}{b_x} x_3(0)$$

$$x'' = x_1(T) - \frac{b_x}{c_x} p_3(T) \qquad p''_x = p_1(T) - \frac{c_x}{b_x} x_3(T)$$

$$y' = x_2(0) + \frac{b_y}{c_y} p_4(0) \qquad p'_y = p_2(0) + \frac{c_y}{b_y} x_4(0)$$

$$y'' = x_2(T) - \frac{b_y}{c_y} p_4(T) \qquad p''_y = p_2(T) - \frac{c_y}{b_y} x_4(T)$$

$$(2.5)$$

#### 2.2 O Método Numérico

Para desenvolvermos o método que resolve (2.5) e (2.4), em primeiro lugar é necessário discretizar a última, ou seja, dividir o tempo em intervalos infinitesimais

de tamanho  $\epsilon$ , sendo o período da trajetória  $T=N\,\epsilon$ . Deste modo, temos uma trajetória que vai desde o 0-ésimo até o N-ésimo ponto. A equação de movimento discretizada tem a forma:

$$\mathbf{r}^{(n+1)} = \mathbf{r}^{(n)} + \epsilon \ \mathbf{J} \left( \mathcal{D} \, \tilde{H}_R \right) \bigg|_{\mathbf{r}^{(n+1/2)}},$$
 (2.6)

onde  $\mathbf{r}^{(n+1/2)} = \frac{1}{2} \left( \mathbf{r}^{(n+1)} + \mathbf{r}^{(n)} \right)$ , sendo que o índice superior direito indica a coordenada temporal discreta.

Suponhamos agora que a solução que procuramos esteja muito perto de uma trajetória tentativa conhecida,  $\bar{\mathbf{r}}^{(j)}$  (para  $j=0,1,2,\ldots N$ ). Assim, podemos escrever a trajetória solução como sendo esta tentativa, acrescida de uma pequena correção, ou seja,  $\mathbf{r}^{(j)} = \bar{\mathbf{r}}^{(j)} + \mathbf{d}^{(j)}$ , onde  $\mathbf{d}^{(j)}$  é representado abaixo:

$$\mathbf{d}^{(j)} = \begin{pmatrix} \delta x_1^{(j)} \\ \delta x_2^{(j)} \\ \delta x_3^{(j)} \\ \delta x_4^{(j)} \\ \delta p_1^{(j)} \\ \delta p_2^{(j)} \\ \delta p_3^{(j)} \\ \delta p_4^{(j)} \end{pmatrix}.$$

Para resolver as equações de movimento (2.6), devemos escrevê-las em termos da solução tentativa, para determinarmos as correções que levam à trajetória desejada. Quanto a esta trajetória tentativa, vale a pena discorrer um pouco sobre ela. Por exemplo, podemos obtê-la a partir da solução do oscilador harmônico simples ou mesmo da partícula livre, ambas no espaço de fase complexo. Estes dois sistemas são de grande importância pois têm solução analítica, portanto são as únicas opções possíveis para uma primeira tentativa. Quando as trajetórias advindas destes sistemas convergem para a procurada, podemos re-utilizar a solução encontrada como sendo a tentativa para a procura de outra com parâmetros parecidos. Aplicando sucessivamente este precedimento, podemos obter trajetórias dos mais variados parâmetros.

Com a expansão de  $\tilde{H}_R$  em torno de  $\bar{\mathbf{r}}^{(j)}$ , podemos escrever (2.6) como:

$$\bar{\mathbf{r}}^{(n+1)} + \mathbf{d}^{(n+1)} = \bar{\mathbf{r}}^{(n)} + \mathbf{d}^{(n)} + \epsilon \ \mathbf{J} \left[ \left( \mathcal{D} \, \tilde{H}_R \right) + \frac{1}{2} \, \left( \mathcal{D}^2 \, \tilde{H}_R \right) \left( \mathbf{d}^{(n+1)} + \mathbf{d}^{(n)} \right) \right] , \quad (2.7)$$

onde  $(\mathcal{D}\tilde{H}_R)$  e  $(\mathcal{D}^2\tilde{H}_R)$  são calculados em  $\bar{\mathbf{r}}^{(n+1/2)}$ , e sendo:

$$\mathcal{D}^{2} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^{2}}{\partial x_{1} \partial x_{1}} & \cdots & \frac{\partial^{2}}{\partial x_{1} \partial x_{4}} & \frac{\partial^{2}}{\partial x_{1} \partial p_{1}} & \cdots & \frac{\partial^{2}}{\partial x_{1} \partial p_{4}} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial^{2}}{\partial x_{4} \partial x_{1}} & \cdots & \frac{\partial^{2}}{\partial x_{4} \partial x_{4}} & \frac{\partial^{2}}{\partial x_{4} \partial p_{1}} & \cdots & \frac{\partial^{2}}{\partial x_{4} \partial p_{4}} \\ \frac{\partial^{2}}{\partial p_{1} \partial x_{1}} & \cdots & \frac{\partial^{2}}{\partial p_{1} \partial x_{4}} & \frac{\partial^{2}}{\partial p_{1} \partial p_{1}} & \cdots & \frac{\partial^{2}}{\partial p_{1} \partial p_{4}} \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial^{2}}{\partial p_{4} \partial x_{1}} & \cdots & \frac{\partial^{2}}{\partial p_{4} \partial x_{4}} & \frac{\partial^{2}}{\partial p_{4} \partial p_{1}} & \cdots & \frac{\partial^{2}}{\partial p_{4} \partial p_{4}} \end{pmatrix}.$$

Manipulando a equação anterior (2.7), podemos escrevê-la de forma mais compacta:

$$d^{(n+1)} = \left(V^{-\mathbf{1}^{(n+1/2)}} U^{(n+1/2)}\right) d^{(n)} + V^{-\mathbf{1}^{(n+1/2)}} R^{(n+1/2)}, \qquad (2.8)$$

onde:

$$V^{(n+1/2)} = I - \frac{\epsilon}{2} J \left( \mathcal{D}^{2} \tilde{H}_{R} \right) \Big|_{\bar{\mathbf{r}}^{(n+1/2)}},$$

$$U^{(n+1/2)} = I + \frac{\epsilon}{2} J \left( \mathcal{D}^{2} \tilde{H}_{R} \right) \Big|_{\bar{\mathbf{r}}^{(n+1/2)}} \quad e \qquad (2.9)$$

$$R^{(n+1/2)} = \epsilon J \left( \mathcal{D} \tilde{H}_{R} \right) \Big|_{\bar{\mathbf{r}}^{(n+1/2)}} - \left( \bar{\mathbf{r}}^{(n+1)} - \bar{\mathbf{r}}^{(n)} \right),$$

sendo que aqui, I é a matriz identidade de ordem 8.

Podemos notar na equação (2.8) que, se soubermos a correção para o primeiro ponto, poderíamos calculá-la para todos os demais. Desta forma, aproximaríamonos da trajetória desejada, e, ao aplicarmos o método por sucessivas vezes, obteríamos a convergência.

Nesta parte do desenvolvimento do método é que aparecem as condições de contorno (2.5). É justamente através delas que encontraremos um modo de calcular  $d^{(0)}$ . O fato é que a relação (2.5) indica que podemos escrever a correção inicial e a final em termos de um mesmo vetor de oito dimensões:

$$d^{(0)} = E W + \mathcal{E}_0 \quad e \quad d^{(N)} = F W + \mathcal{E}_N,$$
 (2.10)

onde:

$$\mathbf{F} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b_x/c_x & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & b_y/c_y \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & c_x/b_x & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & c_y/b_y & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{W} = \begin{pmatrix} \delta x_1(0) \\ \delta x_1(T) \\ \delta x_2(0) \\ \delta x_2(T) \\ \delta p_1(0) \\ \delta p_1(T) \\ \delta p_2(0) \\ \delta p_2(T) \end{pmatrix},$$

e:

$$\mathcal{E}_{0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{b_{x}}{c_{x}} \left\{ p'_{x} - \left[ \bar{p}_{1}(0) + \frac{c_{x}}{b_{x}} \bar{x}_{3}(0) \right] \right\} \\ \frac{b_{y}}{c_{y}} \left\{ p'_{y} - \left[ \bar{p}_{2}(0) + \frac{c_{y}}{b_{y}} \bar{x}_{4}(0) \right] \right\} \\ 0 & 0 & 0 \\ \frac{c_{x}}{b_{x}} \left\{ x' - \left[ \bar{x}_{1}(0) + \frac{b_{x}}{c_{x}} \bar{p}_{3}(0) \right] \right\} \\ \frac{c_{y}}{b_{y}} \left\{ y' - \left[ \bar{x}_{2}(0) + \frac{b_{y}}{c_{y}} \bar{p}_{4}(0) \right] \right\} \end{pmatrix}, \quad \mathcal{E}_{N} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -\frac{b_{x}}{c_{x}} \left\{ p''_{x} - \left[ \bar{p}_{1}(T) + \frac{c_{x}}{b_{x}} \bar{x}_{3}(T) \right] \right\} \\ -\frac{b_{y}}{c_{y}} \left\{ p''_{y} - \left[ \bar{p}_{2}(T) + \frac{c_{y}}{b_{y}} \bar{x}_{4}(T) \right] \right\} \\ -\frac{c_{x}}{b_{x}} \left\{ x'' - \left[ \bar{x}_{1}(T) + \frac{b_{x}}{c_{x}} \bar{p}_{3}(T) \right] \right\} \\ -\frac{c_{y}}{b_{y}} \left\{ y'' - \left[ \bar{x}_{2}(T) + \frac{b_{y}}{c_{y}} \bar{p}_{4}(T) \right] \right\} \end{pmatrix}.$$

Um aspecto importante a salientar é que, se a trajetória tentativa satisfizer as condições iniciais (2.5), os objetos  $\mathcal{E}_0$  e  $\mathcal{E}_N$  serão nulos. Verificamos que esta con-

dição faz com que o programa convirja mais rapidamente, portanto só utilizamos trajetórias com esta característica durante a aplicação do método.

Note que, para a determinação de  $d^{(0)}$ , precisamos de uma outra equação que o relacione com  $d^{(N)}$ . Podemos encontrá-la, ao resolver (2.8) recursivamente:

$$d^{(N)} = \mathcal{M} d^{(0)} + \mathcal{B}, \qquad (2.11)$$

onde  $\mathcal{M}$  é a matriz de monodromia e  $\mathcal{B}$ , como pode ser observado em sua forma (2.12), é a matriz que contém o erro R, que aparece porque a trajetória tentativa não obedece exatamente às equações de movimento do problema, como podemos observar na forma explícita de R (2.9). Para a equação anterior temos:

$$\mathcal{M} = \prod_{n=0}^{N-1} V^{-1(n+1/2)} U^{(n+1/2)}$$

$$\mathcal{B} = \sum_{n=0}^{N-2} \left[ \left( \prod_{n'=n+1}^{N-1} V^{-1(n'+1/2)} U^{(n'+1/2)} \right) V^{-1(n+1/2)} R^{(n+1/2)} \right] + V^{-1(N-1/2)} R^{(N-1/2)}.$$

$$(2.12)$$

onde o cálculo de todos estes objeto é feito sobre os pontos da trajetória tentativa.

Uma simples substituição de (2.10) em (2.11) nos leva à uma equação com uma única incógnita W. Ao resolvê-la, temos:

$$W = (F - \mathcal{M} E)^{-1} (\mathcal{M} \mathcal{E}_0 - \mathcal{E}_N + B).$$
 (2.13)

Enfim podemos calcular diretamente a correção no ponto inicial, através de (2.10) e (2.13):

$$d^{(0)} = E \left[ (F - \mathcal{M} E)^{-1} \left( \mathcal{M} \mathcal{E}_0 - \mathcal{E}_N + B \right) \right] + \mathcal{E}_0, \qquad (2.14)$$

e, como já havíamos comentado, de posse deste resultado, encontramos a correção para todos os pontos da trajetória.

Gostaríamos de ressaltar que pode ser estabelecida uma relação entre a matriz de monodromia  $\mathcal{M}$  e a matriz de propagação de deslocamentos infinitesimais M, equação (1.57). Para isto, devemos notar em primeiro lugar que a função R (2.9) contém as equações de movimento (2.6) e por isso tende a zero quando calculada na trajetória solução. Então, quando aplicamos a equação (2.11) à trajetória solução, temos  $\mathcal{B}$  igual a zero. Logo, para esta trajetória:

$$d^{(N)} = \mathcal{M} d^{(0)}, \qquad (2.15)$$

que, quando comparada à equação (1.57), nos indica que  $\mathcal{M}$  é equivalente a M(T,0), a menos de uma mudança de coordenadas. Apresentamos abaixo as relações entre os elementos de M(T,0) envolvidos no cálculo do propagador e os elementos  $\mathcal{M}_{ij}$  da matriz de monodromia:

$$M_{33}(T,0) = \frac{1}{2} \left( \mathcal{M}_{11} - \frac{b_x}{c_x} \mathcal{M}_{53} - \frac{c_x}{b_x} \mathcal{M}_{17} + \mathcal{M}_{55} \right) + \frac{i}{2} \left( -\mathcal{M}_{13} - \frac{b_x}{c_x} \mathcal{M}_{51} + \frac{c_x}{b_x} \mathcal{M}_{15} + \mathcal{M}_{57} \right)$$

$$M_{44}(T,0) = \frac{1}{2} \left( \mathcal{M}_{22} - \frac{b_y}{c_y} \mathcal{M}_{64} - \frac{c_y}{b_y} \mathcal{M}_{28} + \mathcal{M}_{66} \right) + \frac{i}{2} \left( -\mathcal{M}_{24} - \frac{b_y}{c_y} \mathcal{M}_{62} + \frac{c_y}{b_y} \mathcal{M}_{26} + \mathcal{M}_{68} \right)$$

$$M_{34}(T,0) = \frac{1}{2} \left( \frac{b_y}{b_x} \mathcal{M}_{12} - \frac{b_y}{c_x} \mathcal{M}_{54} - \frac{c_y}{b_x} \mathcal{M}_{18} + \frac{c_y}{c_x} \mathcal{M}_{56} \right) + \frac{i}{2} \left( -\frac{b_y}{b_x} \mathcal{M}_{14} - \frac{b_y}{c_x} \mathcal{M}_{52} + \frac{c_y}{b_x} \mathcal{M}_{16} \frac{c_y}{c_x} + \mathcal{M}_{58} \right)$$

$$M_{43}(T,0) = \frac{1}{2} \left( \frac{b_x}{b_y} \mathcal{M}_{21} - \frac{b_x}{c_y} \mathcal{M}_{63} - \frac{c_x}{b_y} \mathcal{M}_{27} + \frac{c_x}{c_y} \mathcal{M}_{65} \right) + \frac{i}{2} \left( -\frac{b_x}{b_y} \mathcal{M}_{23} - \frac{b_x}{c_y} \mathcal{M}_{61} + \frac{c_x}{b_y} \mathcal{M}_{25} \frac{c_x}{c_y} + \mathcal{M}_{67} \right)$$

# Capítulo 3

### O Potencial Nelson

Apresentaremos nesta seção o potencial onde a teoria vista nos primeiros dois capítulos será aplicada. Trata-se do potencial Nelson que apareceu pela primeira vez na literatura na referência [10], onde encontramos que a motivação física de sua invenção é atribuída a sua forma: "um vale profundo em forma de parábola, cercado por altas montanhas", como sugerem as figuras 3.1 e 3.5. Em física nuclear, este formato representaria um grau de liberdade coletivo, permanecendo acoplado a outros tipos de excitação. A equação que o descreve é escrita como:

$$V(x,y) = \left(y - \frac{x^2}{2}\right)^2 + \mu \frac{x^2}{2} \quad \text{(para } \mu = 0,1) , \qquad (3.1)$$

através da qual podemos notar a simetria em relação a inversão  $x \to -x$ , presente em todos os resultados que apresentamos neste trabalho.

Antes de aplicá-lo ao problema de nosso interesse, gostaríamos de esclarecer que será este o potencial introduzido no operador hamiltoniano que estudaremos, porém ressaltamos que as trajetórias clássicas que procuramos para o cálculo do propagador não são governadas exatamente pelo potencial Nelson (3.1), mas sim pela sua média em estados coerentes, o que implica numa dinâmica ligeiramente modificada. Para visualizar melhor esta diferença, ilustramos os dois casos através das figuras 3.2 a 3.4, que são as seções de Poincaré  $(x-p_x)$  para valores diferentes de energia. Tendo-as em vista, podemos tirar algumas conclusões acerca da dinâmica proporcionada pelos dois potenciais. Em primeiro lugar nota-se claramente a não

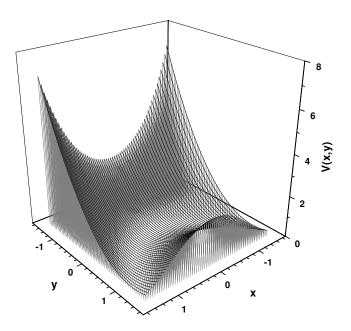


Figura 3.1: Potencial Nelson em uma visão tridimensional. Para x = 0 temos exatamente o potencial de um oscilador harmônico simples.

integrabilidade deles; existem tanto regiões caóticas quanto ilhas de regularidade. Percebe-se também que, conforme a energia é aumentada, mais instável ficam as trajetórias. Nessa dissertação trabalhamos basicamente no regime mostrado pelas figuras 3.4, ou seja, para energia igual a 0,5, tratando-se portanto de uma região onde os dois potenciais mostram-se bastantes caóticos.

Uma vantagem que temos, ao utilizar o potencial Nelson, é o fato de terem sido intensamente estudadas em [10] as suas trajetórias periódicas reais. Isto pode facilitar bastante o cálculo do propagador diagonal para os estados coerentes  $|\mathbf{z}\rangle$ , cujas médias r e  $p_r$  estejam próximas de valores que sejam conectados por uma destas trajetórias, decorrido um tempo T. Desta forma, mesmo que r e  $p_r$  não satisfaçam às condições para que o propagador esteja escrito em termos destas órbitas, podemos utilizá-las como uma tentativa inicial, esperando que o método da Matriz de Monodromia efetive a convergência para a trajetória desejada. Note que, quando não temos em vista a trajetória tentativa a ser utilizada, o cálculo do propagador envolve uma etapa muito complicada, que é a sua determinação. Por isso, no presente trabalho estudaremos apenas a vizinhança da órbita real mais

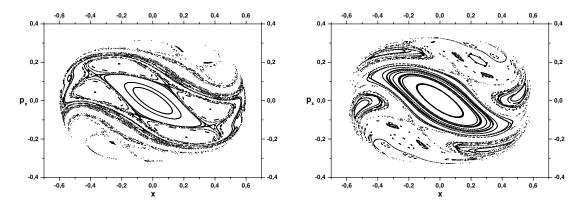


Figura 3.2: Seção de Poincaré  $(x - p_x)$  para energia igual a 0,05. À direita temos a dinâmica gerada pelo potencial Nelson na sua forma original (3.1), e à esquerda em sua forma suavizada (3.3). Para esta energia os potenciais ainda apresentam um regime de bastante regularidade.

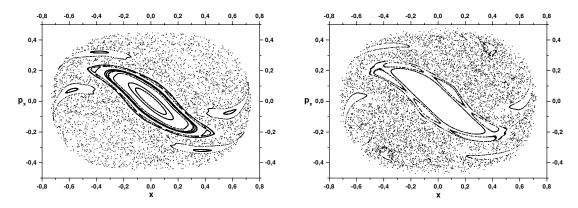


Figura 3.3: Idem à figura 3.2 para energia igual a 0,1. Neste caso a energia é duas vezes maior do que a utilizada na figura anterior, e já temos um regime em que existem poucas regiões de regularidade.

simples. Trata-se da chamada trajetória vertical que leva este nome porque ela aparece quando x=0 e  $p_x=0$ . Para esta situação o potencial Nelson é reduzido a um oscilador harmônico simples na direção y com frequência igual a  $\sqrt{2}$ , como sugerem as figuras 3.1 e 3.5.

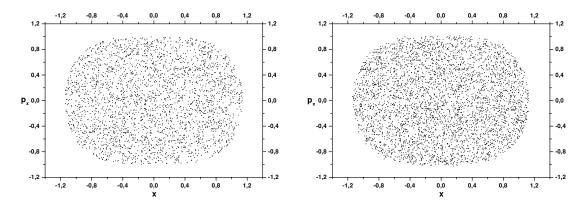


Figura 3.4: Idem à figura 3.2 para energia igual a 0,5. O regime obtido para esta energia é totalmente caótico para os dois potenciais.

#### 3.1 A Trajetória Vertical

Como já comentamos, a trajetória analítica mais simples do potencial Nelson é a trajetória vertical. Para o Nelson suavizado ainda temos a mesma redução para  $x = p_x = 0$ , com a diferença que o potencial de oscilador harmônico obtido está deslocado da origem por um fator  $b_x^2/4$  na direção y, deslocamento que não era observado para a sua forma original (3.1). Vale lembrar que  $b_x$  é a incerteza na direção x da posição do estado coerente.

Para deduzirmos a trajetória vertical, devemos calcular em primeiro lugar a função hamiltoniana que a governa, a qual pode ser obtida a partir da suavização do operador hamiltoniano apresentado a seguir:

$$\hat{H} = \frac{1}{2}(\hat{P}_X^2 + \hat{P}_Y^2) + \left(\hat{Y} - \frac{\hat{X}^2}{2}\right)^2 + \mu \frac{\hat{X}^2}{2} \quad \text{(para } \mu = 0, 1\text{)}.$$
 (3.2)

A partir deste, a média em estados coerentes é calculada da seguinte maneira: escrevemos os operadores de posição  $(\hat{R})$  e momento  $(\hat{P}_r)$  em função dos de criação  $(\hat{a}_r^{\dagger})$  e aniquilação  $(\hat{a}_r)$ , e calculamos a quantidade  $\langle \mathbf{z} | \hat{H}(\hat{a}_r, \hat{a}_r^{\dagger}) | \mathbf{z} \rangle$ , utilizando a relação  $\hat{a}_r | \mathbf{z} \rangle = z_r | \mathbf{z} \rangle$ . O resultado desta operação é:

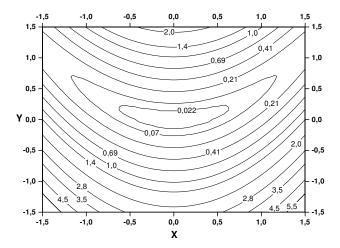


Figura 3.5: Curvas de nível para o potencial Nelson. Para x = 0 temos exatamente o potencial de um oscilador harmônico simples, onde aparece a trajetória vertical.

$$\tilde{H} = \frac{1}{2} \left( p_x^2 + p_y^2 \right) + \left( y - \frac{x^2}{2} \right)^2 + \mu \frac{x^2}{2} + b_x^2 \left( \frac{3x^2}{4} - \frac{y}{2} \right) + \frac{1}{4} \left( \mu b_x^2 + c_x^2 + 2b_y^2 + c_y^2 \right) + \frac{3}{16} b_x^4, \tag{3.3}$$

onde lembramos que  $b_r$  e  $c_r$  são respectivamente as incertezas arbitrárias na posição e momento médios do estado  $|z_r\rangle$ , para r=x ou y. Vale a pena lembrar que a arbitrariedade na escolha destas incertezas deve se limitar ao fato que  $\hbar=b_r\cdot c_r$ . No decorrer desta dissertação os cálculos foram feitos para  $b_x=b_y=0,2$  e  $c_x=c_y=0,25$ , o que nos leva a  $\hbar=b_r\cdot c_r=0,05$ .

Ao considerar que o espaço de fase é complexo, conforme indicam as equações (2.1), podemos escrever as equações de movimento (2.3) sem nenhuma redução do sistema:

$$\ddot{x}_{1} = -\left(\frac{3}{2}b_{x}^{2} + \mu\right)x_{1} - 2\left(x_{3}x_{4} - x_{1}x_{2}\right) + 3x_{1}x_{3}^{2} - x_{1}^{3} 
\ddot{x}_{2} = \frac{1}{2}b_{x}^{2} - 2x_{2} + x_{1}^{2} - x_{3}^{2} 
\ddot{x}_{3} = -\left(\frac{3}{2}b_{x}^{2} + \mu\right)x_{3} + 2\left(x_{3}x_{2} + x_{1}x_{4}\right) - 3x_{3}x_{1}^{2} + x_{3}^{3} 
\ddot{x}_{4} = 2\left(x_{1}x_{3} - x_{4}\right)$$

$$\dot{x}_{1} = p_{1} 
\dot{x}_{2} = p_{2} 
\dot{x}_{3} = -p_{3} 
\dot{x}_{4} = -p_{4} 
(3.4)$$

onde a função hamiltoniana utilizada para gerar estas equações é a parte real do objeto  $\tilde{H}$ :

$$\tilde{H}_{Real}(x_1, \dots, x_4, p_1, \dots, p_4) = \frac{1}{2} \left( p_1^2 + p_2^2 - p_4^2 - p_3^2 \right) + \frac{\mu}{2} \left( x_1^2 - x_3^2 \right) + \left( x_2^2 - x_4^2 \right) + \left( x_3^2 x_2 - x_1^2 x_2 + 2x_1 x_3 x_4 \right) + \frac{1}{4} \left( x_1^4 - 6x_1^2 x_3^2 + x_3^4 \right) + \frac{3}{4} b_x^2 \left( x_1^2 - x_3^2 \right) - \frac{b_x^2}{2} x_2 + \frac{3b_x^4}{16} + \frac{1}{2} \left( \mu \frac{b_x^2}{2} + \frac{c_x^2}{2} + b_y^2 + \frac{c_y^2}{2} \right).$$
(3.5)

Note agora que, se fizermos a suposição de que o estado inicial da partícula não possui componentes complexas em sua posição e momento, a trajetória permanece real, ou seja, nenhuma componente complexa do sistema varia no decorrer do tempo. Se, além disso, impusermos também que as condições iniciais são nulas para as variáveis da dimensão x, resta somente o movimento harmônico de período  $\pi\sqrt{2}\approx 4,443$  para a parte real de y. Portanto, existe uma solução bastante simples, a trajetória vertical, que pode ser descrita por:

$$\begin{cases} x_2(t) = y_0 \cos\left(\sqrt{2}t + \theta\right) + \frac{b_x^2}{4} \\ p_2(t) = -y_0 \sqrt{2} \sin\left(\sqrt{2}t + \theta\right) \\ x_1(t) = x_3(t) = p_1(t) = p_3(t) = x_4(t) = p_4(t) = 0 \end{cases}$$
(3.6)

Apesar da sua simplicidade, a trajetória vertical promoverá uma série de resultados importantes, sendo que os consideramos como os primeiros passos para estudos em regiões mais complicadas.

### 3.2 Cálculo do Propagador Diagonal sobre a Trajetória Vertical

Em primeiro lugar, esclarecemos que, através da expressão "sobre a trajetória vertical", queremos expressar a idéia de que realizaremos o cálculo do propagador diagonal para os estados coerentes  $|\mathbf{z}\rangle$  com  $x=p_x=0$  e y e  $p_y$  relacionados pela

equação (3.6), sendo o período igual a  $\pi\sqrt{2}\approx 4,443$ .

Para estes estados coerentes podemos concluir que o propagador envolverá pelo menos a trajetória vertical, que é totalmente real. Nestes casos consideraremos que a contribuição significativa para o cálculo do propagador virá somente desta órbita, dada a aproximação utilizada, que dá prioridade para as trajetórias reais, acrescentada ao fato de desconhecermos outras trajetórias reais que satisfaçam às mesmas condições de contorno. Não há necessidade portanto das trajetórias complexas.

Tendo em vista que o propagador diagonal sobre a trajetória vertical permite uma solução analítica mais avançada, nesta seção o calcularemos somente para estas condições, e, de certa forma, interpretaremos os resultados obtidos como uma prova de que o programa computacional que os calcula está em boas condições, caso a comparação com o resultado analítico seja satisfatória.

Utilizando a trajetória vertical (3.6) na equação do propagador semiclássico (1.52), podemos obter analiticamente o resultado para o caso diagonal:

$$|K(\mathbf{z}^*, \mathbf{z}, T)|^2 = \left| \frac{1}{M_{33}(T, 0) M_{44}(T, 0) - M_{34}(T, 0) M_{43}(T, 0)} \right|.$$
 (3.7)

Note que esta expressão só é válida quando limitamos o estado  $|\mathbf{z}\rangle$  e o período T àqueles que resultam numa trajetória como a da equação (3.6). Portanto  $x = p_x = 0, T = \pi\sqrt{2}$  e  $z_y$  qualquer.

Pela equação (3.7), vemos que o propagador semiclássico para esta situação particular depende somente dos elementos da matriz de monodromia da trajetória, equação (2.16); os termos que envolvem a ação do sistema acabam sendo anulados no cálculo. Seria interessante portanto a determinação analítica desta matriz, pois assim determinaríamos completamente o propagador semiclássico. No entanto, ao estudar a estabilidade deste problema, visando a obtenção da matriz de monodromia, encontramos que as pequenas variações na trajetória vertical são descritas segundo as equações:

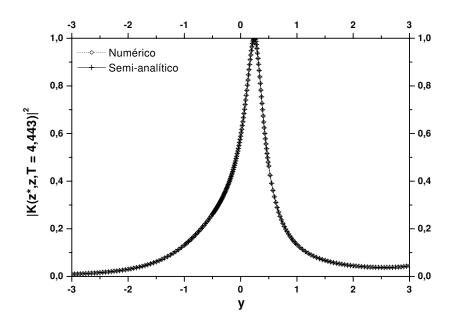


Figura 3.6: Módulo do propagador ao quadrado para pontos sobre a trajetória vertical com energia cinética inicial igual a zero, em função de y ( $x = p_x = p_y = 0$  e T = 4,443). Note que não há diferença entre o cálculo semi-analítico (representado pelo símbolo +) e o totalmente numérico ( $\circ$ ).

$$\delta \ddot{x}_{1} = -\left(\frac{3}{2}b_{x}^{2} + \mu - 2x_{2}\right)\delta x_{1}$$

$$\delta \ddot{x}_{2} = -2\delta x_{2}$$

$$\delta \ddot{x}_{3} = -\left(\frac{3}{2}b_{x}^{2} + \mu - 2x_{2}\right)\delta x_{3}$$

$$\delta \ddot{x}_{4} = -2\delta x_{4}$$

$$\delta p_{1} = \delta \dot{x}_{1}$$

$$\delta p_{2} = \delta \dot{x}_{2}$$

$$\delta p_{3} = -\delta \dot{x}_{3}$$

$$\delta p_{4} = -\delta \dot{x}_{4}$$

$$(3.8)$$

Para a dimensão y, tanto para a parte real quanto para a parte imaginária da posição e momento, temos que as pequenas variações em torno da trajetória vertical oscilam em torno dela, de modo que podemos determinar os elementos da matriz de monodromia que relacionam estas variáveis. Mas para a dimensão x não temos solução analítica, a equação a que chegamos é equivalente à conhecida equação de Mathieu [20]:  $\ddot{x} + [\alpha + \beta \cos{(\omega t + \gamma)}] x = 0$ . Então, para resolver o propagador apresentado na equação (3.7), calculamos a matriz de monodromia numericamente, e por isso o chamaremos de propagador semi-analítico. Por completeza, informamos que as equações (3.8) para  $\delta x_1$  e  $\delta x_3$  são equivalentes à de Mathieu quando:

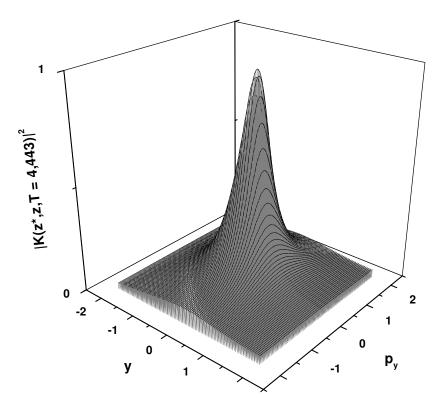


Figura 3.7: Módulo do propagador ao quadrado para pontos sobre a trajetória vertical, em função de y e  $p_y$  ( $x=p_x=0$  e T=4,443).

$$\alpha = b_x^2 + \mu$$
  $\beta = -2y_0$   $\omega = \sqrt{2}$   $\gamma = \theta$  .

Na figura 3.6 apresentamos dois resultados para o propagador diagonal calculado sobre a trajetória vertical com energia cinética igual a zero: o cálculo semianalítico, onde calculamos a matriz de monodromia de forma numérica e resolvemos
o propagador segundo a equação (3.7); e o cálculo inteiramente numérico, resolvendo numericamente as trajetórias e os objetos definidos pela equação (1.52).
Podemos notar que não há praticamente nenhuma diferença entre os dois resultados, o que interpretamos como um bom desempenho do programa desenvolvido
para calcular o propagador. Salientamos que tal conclusão deve ser acatada com
muita cautela, já que está sendo tomada através de um resultado muito particular.

Na figura 3.7 estão os resultados para o módulo do propagador sobre a trajetória vertical para vários pontos  $(y, p_y)$ . É interessante notar nesta figura que o valor

do propagador cai muito rapidamente na medida em que a energia aumenta, fato também observado na figura 3.6. Tendo em vista a equação (3.7) e as figuras 3.2 a 3.4, podemos concluir que esta queda se deve apenas ao fato da trajetória ficar cada vez mais instável. Veja que a forma analítica do propagador conta apenas com o termo advindo da matriz de monodromia do sistema clássico, pois os termos que levam em conta o quão complexa é a trajetória se anulam. Isto implica que o propagador sobre a trajetória vertical depende somente da estabilidade desta trajetória. Como o centro do pacote realiza o movimento de retorno ao ponto de partida no tempo 4,443; podemos concluir que o aumento da instabilidade da trajetória deve fazer com que o pacote se alargue mais, diminuindo assim o valor da projeção do estado final sobre o inicial.

# Capítulo 4

# O Propagador na Vizinhança da Trajetória Vertical

Neste capítulo calcularemos o propagador diagonal para parâmetros  $x, y, p_x, p_y$  e T ligeiramente modificados em relação àqueles do capítulo 3, de modo que a trajetória vertical não mais satisfaça às condições dadas pelas equações (1.23) e (1.24), não contribuindo, assim, para o cálculo do propagador. A semelhança entre os parâmetros, que utilizaremos aqui e aqueles usados para o propagador sobre a vertical, implica podermos adotar a órbita vertical como órbita tentativa para calcularmos aquela que contribuirá para o propagador, utilizando o procedimento descrito no capítulo 2. Como veremos, as correções na trajetória vertical produzirão trajetórias complexas, cujas contribuições para o objeto  $K(\mathbf{z}^*, \mathbf{z}, T)$  se manifestarão também através dos termos  $\mathcal{G}$  e  $\mathcal{S}$  da equação (1.52), e não somente através dos termos relacionados à matriz de monodromia, como era o caso do propagador sobre a trajetória vertical.

# 4.1 Deslocamento do Centro do Estado Coerente para $x \neq 0$

A primeira variação que estudaremos será o deslocamento do centro do estado coerente  $|\mathbf{z}\rangle$  para valores não nulos de x, mantendo a energia cinética inicial igual a

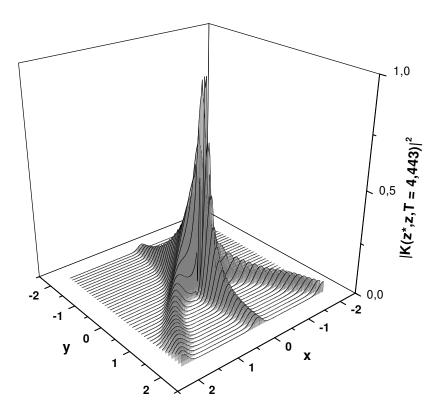


Figura 4.1: Módulo do propagador diagonal ao quadrado para pontos deslocados da trajetória vertical, em função da posição do centro do estado coerente x e y ( $p_y = p_x = 0$  e T = 4,443).

zero, e permanecendo o período em 4,443. Na figura 4.1 representamos o módulo do propagador diagonal ao quadrado em função das coordenadas (x, y) do centro do pacote. Ressaltamos que para o plano x=0 voltamos à situação mostrada em 3.6, e portanto esta projeção é idêntica àquela figura. Sendo assim, continua valendo para o gráfico 4.1 a discussão onde argumentava-se que o propagador diminui rapidamente na medida em que a energia e consequentemente a instabilidade da trajetória vertical aumentam.

Para os resultados apresentados na figura acima, não somente os termos da matriz de monodromia são diferentes de zero; os demais termos da expressão (1.52) também não se anulam, e são responsáveis pela queda do valor do propagador na medida em que as trajetórias vão se afastando da trajetória vertical, tornando-se complexas. Temos, portanto, as duas contribuições para o cálculo do propagador:

aquela que é responsável pela estabilidade do sistema e que, portanto, determina quanto o pacote permanece coeso, sendo representada pelo denominador do objeto  $\mathcal{A}$  (1.56); e as demais contribuições, que podem ser interpretadas como sendo responsáveis pela medida de quão complexa é a trajetória envolvida no propagador. Atribui-se a esta última o decaimento gaussiano em torno da trajetória real (x = 0), que é verificado na figura 4.1.

A figura 4.1 apresenta uma forma muito curiosa: para y>0, existem dois ramos simetricamente localizados em relação a x, onde o valor da probabilidade de retorno possui valores significativos (da ordem de 5%); já para y<0 tal formação não existe. Concluímos que a explicação para esta ocorrência pode ser encontrada ao considerar o vale parabólico do potencial Nelson, o qual pode ser identificado nas figuras 3.1 e 3.5. Note que a trajetória clássica que uma partícula descreveria ao ser solta em um daqueles "braços" seria em direção à origem, oscilando em torno de um mínimo parcial local. Como o tempo de propagação do pacote não é muito grande (4, 443) e a largura do estado coerente é consideravelmente alta ( $b_x = b_y = 0, 2$  e  $c_x = c_y = 0, 25$ ), concluímos que ainda existe um valor não nulo da sobreposição do estado inicial  $|\mathbf{z}\rangle$  sobre o final  $e^{i\hat{H}T/\hbar}|\mathbf{z}\rangle$  para aquela região, o que justificaria as ramificações observadas na figura 4.1.

#### 4.1.1 As Trajetórias Complexas

Apresentaremos algumas trajetórias envolvidas no cálculo do propagador para alguns pontos (x, y) da figura 4.1. A idéia é fazer com que vislumbremos a órbita inicialmente real, e, na medida em que os valores de x se afastam de 0, as trajetórias vão tornando-se complexas.

Escolhemos os planos definidos por  $y=\pm 0,5$  no gráfico 4.1, para mostrar as trajetórias complexas que contribuíram para aquele cálculo. Na figura 4.2 estão as projeções reais das trajetórias (x, y) para vários valores de x entre 0 e 1, 5. Na figura 4.3, estão as partes imaginárias das trajetórias para os mesmos parâmetros. Salientamos que, devido à simetria  $x \to -x$ , não vemos necessidade de mostrar as trajetórias para o lado em que x é negativo.

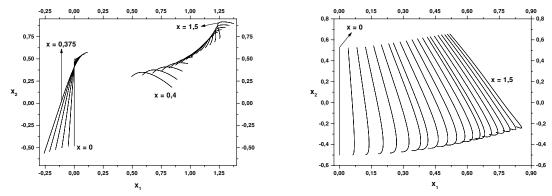


Figura 4.2: Partes reais das trajetórias envolvidas no propagador diagonal. O gráfico do lado esquerdo foi construído com parâmetros  $y=0,5,\ p_y=p_x=0$  e T=4,443, e x especificado na figura. Trata-se de um corte na região onde existe a ramificação mostrada pela figura 4.1; para o parâmetro x variando de 0 até 0,375, as trajetórias seguem continuamente o padrão existente no canto esquerdo deste gráfico, e, para valores acima deste, elas seguem o padrão existente no canto direito. O gráfico do lado direito foi construído com parâmetros  $y=-0,5,\ p_y=p_x=0$  e T=4,443, onde não existe a citada ramificação; neste caso as trajetórias seguiram sempre um mesmo padrão.

Podemos observar em 4.2 e 4.3 que, quando x=0, a trajetória, como era de se esperar, é exatamente a trajetória vertical (3.6), ou seja, possui valores nulos para as coordenadas imaginárias e para as da direção x. Na medida em que nos afastamos de x=0, a trajetória vertical vai deformando, ganhando valores nas componentes complexas. Esta é uma boa maneira de ilustrar o fato de que, na ausência de trajetórias clássicas reais, as trajetórias complexas vão surgindo e prestando sua contribuição ao cálculo do propagador. Gostaríamos de ressaltar também que estas trajetórias complexas não são necessariamente periódicas para todas as coordenadas, como se esperaria de uma órbita real envolvida no propagador diagonal.

Um ponto muito interessante nos gráficos à esquerda das figuras 4.2 e 4.3 é a descontinuidade nas trajetórias entre os valores de x = 0,375 e x = 0,4; tanto para as partes reais quanto imaginárias. Para valores de x menores que 0,4; as trajetórias parecem seguir um certo padrão continuamente. Para valores acima

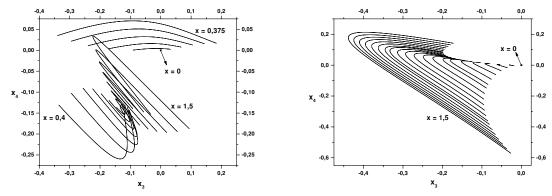


Figura 4.3: Partes imaginárias das trajetórias envolvidas no propagador diagonal. O gráfico do lado esquerdo foi construído com parâmetros  $y=0,5,\ p_y=p_x=0$  e  $T=4,443,\ e\ x$  especificado na figura. E o gráfico do lado direito com parâmetros  $y=-0,5,\ p_y=p_x=0$  e T=4,443. Para estes gráficos valem os mesmos comentários realizados para a figura 4.2. Um ponto que merece ser acrescentado é o fato das trajetórias imaginárias para y=0,5 serem grandes quando x=0,4 (onde temos a descotinuidade), e, na medida em que aumentamos x até 1,5, o tamanho das trajetórias passa por um mínimo próximo de x igual a 0,9. Depois deste valor as partes imaginárias das trajetórias voltam a aumentar, seguindo um padrão diferente.

deste, a trajetória passa subitamente a seguir um outro padrão. As trajetórias tentativas para todos estes parâmetros foram sempre obtidas a partir do oscilador harmônico simples bidimensional equivalente à parte harmônica da hamiltoniana (3.3), sendo que elas sempre se comportavam segundo um mesmo padrão. Portanto foi durante a convergência para a trajetória desejada que houve a divergência entre as órbitas. Explicamos este comportamento quando consideramos novamente o vale parabólico do potencial Nelson. Repare que a descontinuidade surge quando o método da matriz de monodromia converge a órbita do oscilador harmônico para trajetórias que nitidamente "habitam" o vale parabólico, como sugerem as figuras 4.1 e 4.2.

Ressaltamos também como comportam-se as partes imaginárias das trajetórias para y = 0, 5, esboçadas no lado esquerdo da figura 4.3. Veja que, a partir do momento em que elas manifestam a presença no vale parabólico (x = 0, 4), o tamanho

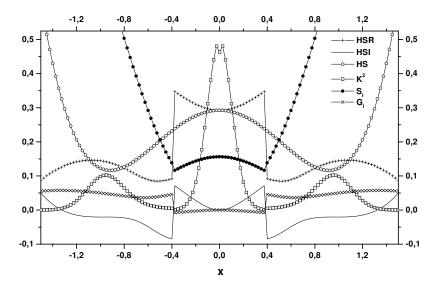


Figura 4.4: Quantidades físicas relacionadas às trajetórias contribuintes para o módulo do propagador diagonal, em função da posição x, com parâmetros y=0,5,  $p_y=p_x=0$  e T=4,443. Legenda:  $\tilde{H}_{\rm real}\equiv {\rm HSR},~\tilde{H}_{\rm imag}\equiv {\rm HSI},~\mathcal{S}_{\rm imag}\equiv {\rm S_I},$   $\mathcal{G}_{\rm imag}\equiv {\rm G_I},~|K\left(\mathbf{z}^*,\,\mathbf{z},\,T\right)|^2\equiv {\rm K}^2$  e  $\tilde{H}(x,y,p_x,p_y)\equiv {\rm HS}.$ 

delas vai diminuindo até atingir um mínimo (aproximadamente x=0,9 e y=0,5), quando então voltam a crescer num padrão diferente. Neste ponto mínimo encontramos a "crista" da ramificação observada em 4.1.

Já no lado direito das figuras 4.2 e 4.3 apresentamos as trajetórias para y = -0, 5. Observamos que tanto as partes reais quanto as partes imaginárias destas trajetórias seguem sempre um mesmo padrão, o que era de se esperar, já que não observamos para esta região a bifurcação existente para y > 0 (figura 4.1).

Na figura 4.4 esboçamos as quantidades físicas envolvidas com as trajetórias presentes no corte y=+0,5 da figura 4.1. Podemos notar que todas as quantidades acompanham a descontinuidade da trajetória, influenciando no valor do propagador.

# 4.2 Comparação entre Resultados Semiclássicos e Quânticos

Nesta parte continuaremos com o cálculo do propagador na vizinhança da trajetória vertical, sendo que os resultados obtidos serão confrontados com os equivalentes quânticos, resolvidos por Baranger [21], e com os resultados obtidos pela aproximação de órbita real, realizada por Aguiar [22]. Na seção 4.2.1 mostraremos em linhas gerais o raciocínio desenvolvido para a obtenção destes outros dois resultados. Depois desta, apresentaremos os resultados.

#### 4.2.1 O Cálculo Quântico e a Aproximação de Órbita Real

O cálculo quântico do propagador foi realizado de maneira usual. Primeiro se escreve a matriz do operador hamiltoniano numa base arbitrária, como por exemplo a base dos auto estados do operador de número do oscilador harmônico simples  $\{|n_x;n_y\rangle\}$ , equação (1.2). Depois diagonaliza-se esta matriz numericamente, encontrando seus autovalores e autovetores. De posse destes valores, é possível escrever os elementos diagonais do propagador (1.11) como:

$$K(\mathbf{z}^*, \mathbf{z}, T) = \sum_{m=0}^{\infty} \psi_m^*(\mathbf{z}) \ \psi_m(\mathbf{z}) \ \exp\left(\frac{i}{\hbar} E_m \ T\right), \tag{4.1}$$

onde  $E_m$  são os autovalores, e  $\psi_m(\mathbf{z}) = \langle \mathbf{z} | m \rangle$  as auto funções do operador hamiltoniano na base  $\{|m\rangle\}$ , na representação de estados coerentes. Podemos então calcular o propagador numericamente, pois estas quantidades podem ser resolvidas, quando as escrevemos em função da base conhecida  $\{|n_x; n_y\rangle\}$ .

#### A Aproximação de Órbita Real

A idéia básica da aproximação de órbita real que apresentaremos aqui consiste em expandir todas as quantidades envolvidas no cálculo do propagador em torno de uma trajetória real, para então resolvê-lo.

Como vimos, o propagador semiclássico (1.52) é escrito em termos de trajetórias clássicas que conectam pontos no espaço de fase, fornecidos pelo estado coerente inicial  $|\mathbf{z}'\rangle$  e final  $|\mathbf{z}''\rangle$ . Quando reduzimos o nosso cálculo a somente elementos diagonais do propagador (seção 1.2.8), as trajetórias envolvidas também são reduzidas a órbitas cujas condições de contorno contenham esta característica de retorno, mas que não são necessariamente periódicas. No caso de existir uma trajetória clássica real, esta será uma órbita periódica. Será em torno deste tipo de trajetória que realizaremos a expansão. Portanto, a validade desta aproximação é limitada aos casos em que o propagador diagonal seja avaliado em regiões onde existam órbitas periódicas reais que conectem parâmetros semelhantes às médias r e  $p_r$  do estado  $|\mathbf{z}\rangle$ .

Iniciaremos esta aproximação rearranjando os termos S e G da equação (1.52), visando facilitar o desenvolvimento do método. Objetivando uma descrição mais concisa, apresentaremos aqui somente os resultados finais deste rearranjo, sendo que os detalhes dos cálculos podem ser encontrados no apêndice A. O fato é que para o limite quase clássico ( $\hbar \to 0$ ) podemos aproximar:

$$\tilde{H}(u_x, u_y, v_x, v_y) - H(u_x, u_y, v_x, v_y) \simeq \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 \tilde{H}}{\partial u_x \partial v_x} + \frac{\partial^2 \tilde{H}}{\partial u_y \partial v_y} \right),$$
 (4.2)

onde H é uma função equivalente a  $\tilde{H}$  quando as incertezas dos estados coerentes tendem a zero, veja por exemplo a equação (3.3).

Relacionando o lado direito desta equação com o objeto  $\mathcal{G}$  da equação (1.55), concluímos que o propagador (1.52) pode ser escrito, para os elementos diagonais, como:

$$K(\mathbf{z}^*, \mathbf{z}, T) \simeq \frac{\exp\left[\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}' - \frac{1}{2}\sum_{r=x,y} \left(|z_r(0)|^2 + |z_r^*(T)|^2\right) + i\sigma\right]}{\left[\mathcal{M}_{33}(T, 0)\mathcal{M}_{44}(T, 0) - \mathcal{M}_{34}(T, 0)\mathcal{M}_{43}(T, 0)\right]^{-\frac{1}{2}}},$$
(4.3)

onde S' é idêntico à ação complexa S da equação (1.54), com uma única diferença: a função  $\tilde{H}$  daquela equação é agora substituída pelo objeto H.

Com o propagador diagonal escrito desta forma, iniciaremos a aproximação

assumindo que o ponto  $\mathbf{z}$  esteja próximo a  $\bar{\mathbf{z}}$ , pelo qual passa uma trajetória clássica real de período  $\tau$  e energia  $\bar{E}$ . Podemos então escrever:

$$\mathbf{z} = \bar{\mathbf{z}} + \xi \qquad \mathbf{e} \qquad T = \tau + t \,\,, \tag{4.4}$$

onde  $\xi$  é o vetor  $(\delta z_x, \delta z_y)$  que contém as correções em  $\bar{\mathbf{z}} = (\bar{z}_x, \bar{z}_y)$ .

Assumiremos que na vizinhança de  $\bar{\mathbf{z}}$  a dinâmica seja dada corretamente por uma aproximação linearizada, ou seja, desprezaremos as correções além da segunda ordem  $\mathcal{O}(\xi^2)$ . Lembramos que esta é também a aproximação na qual a matriz de monodromia é definida. Expandindo  $\mathcal{S}'$  temos:

$$S'(\mathbf{z}^*, \mathbf{z}, T) = S'(\bar{\mathbf{z}}^*, \bar{\mathbf{z}}, T)$$

$$+ \bar{\mathbf{z}} \cdot \xi^* + \bar{\mathbf{z}}^* \cdot \xi - \frac{i}{\hbar} \bar{E} t$$

$$+ \frac{1}{2} \left( \xi \quad \xi^* \right) A \left( \frac{\xi}{\xi^*} \right) + \xi^* \cdot A_{vT} \cdot t + \xi \cdot A_{uT} \cdot t + \frac{1}{2} A_{TT} \cdot t^2,$$

$$(4.5)$$

onde definimos:

$$A = \begin{pmatrix} A_{\bar{z}_{x}\,\bar{z}_{x}} & A_{\bar{z}_{x}\,\bar{z}_{y}} & A_{\bar{z}_{x}\,\bar{z}_{x}^{*}} & A_{\bar{z}_{x}\,\bar{z}_{y}^{*}} \\ A_{\bar{z}_{y}\,\bar{z}_{x}} & A_{\bar{z}_{y}\,\bar{z}_{y}} & A_{\bar{z}_{y}\,\bar{z}_{x}^{*}} & A_{\bar{z}_{y}\,\bar{z}_{y}^{*}} \\ A_{\bar{z}_{x}^{*}\,\bar{z}_{x}} & A_{\bar{z}_{x}^{*}\,\bar{z}_{y}} & A_{\bar{z}_{x}^{*}\,\bar{z}_{x}^{*}} & A_{\bar{z}_{x}^{*}\,\bar{z}_{y}^{*}} \\ A_{\bar{z}_{y}^{*}\,\bar{z}_{x}} & A_{\bar{z}_{y}^{*}\,\bar{z}_{y}} & A_{\bar{z}_{y}^{*}\,\bar{z}_{x}^{*}} & A_{\bar{z}_{y}^{*}\,\bar{z}_{y}^{*}} \end{pmatrix} ,$$

$$(4.6)$$

onde:

$$A_{\bar{z}_r\bar{z}_{r'}} = \frac{\partial^2 \mathcal{S}'}{\partial \bar{z}_r \partial \bar{z}_{r'}}, \qquad A_{\bar{z}_r^*\bar{z}_{r'}} = A_{\bar{z}_{r'}\bar{z}_r^*} = \frac{\partial^2 \mathcal{S}'}{\partial \bar{z}_{r'} \partial \bar{z}_r^*}, \qquad A_{\bar{z}_r^*\bar{z}_{r'}^*} = \frac{\partial^2 \mathcal{S}'}{\partial \bar{z}_r^* \partial \bar{z}_{r'}^*} \ ,$$

e os outros objetos são:

$$A_{\bar{z}_r T} = \frac{\partial^2 \mathcal{S}'}{\partial \bar{z}_r \partial T}, \qquad A_{\bar{z}_r^* T} = \frac{\partial^2 \mathcal{S}'}{\partial \bar{z}_r^* \partial T}, \qquad A_{T T} = \frac{\partial^2 \mathcal{S}'}{\partial T^2} . \tag{4.7}$$

Esclarecemos que, para chegarmos na expressão (4.5), utilizamos as relações (1.51), ignorando a diferença entre  $\mathcal{S}'$  e  $\mathcal{S}$ . Tal operação é justificada quando consideramos que estamos no limite quase clássico, onde é desprezível a diferença entre

 $\tilde{H}$  e H.

A expansão do objeto  $(|z_r(0)|^2 + |z_r(T)|^2)$  pode ser obtida diretamente da relação:

$$|\mathbf{z}|^2 = |\bar{\mathbf{z}}|^2 + \bar{\mathbf{z}} \cdot \xi^* + \bar{\mathbf{z}}^* \cdot \xi + |\xi|^2. \tag{4.8}$$

Resta-nos, portanto, determinar o denominador da expressão (4.3) em função da trajetória real, para resolver definitivamente o propagador diagonal segundo a aproximação em questão. O cálculo deste objeto se encontra no Apêndice B, sendo que é escrito como:

$$\frac{1}{\det[\mathbf{M}_{\mathbf{\bar{z}}^*\mathbf{\bar{z}}^*}(T,0)]} = \frac{\exp\left[-\frac{i}{\hbar}t\operatorname{tr}\left(\mathcal{H}_{\mathbf{\bar{z}}\mathbf{\bar{z}}}(\tau+t)\mathbf{M}_{\mathbf{\bar{z}}\mathbf{\bar{z}}^*}(\tau,0)\mathbf{M}_{\mathbf{\bar{z}}^*\mathbf{\bar{z}}^*}^{-1}(\tau,0) + \mathcal{H}_{\mathbf{\bar{z}}\mathbf{\bar{z}}^*}(\tau+t)\right)\right]}{\det[\mathbf{M}_{\mathbf{\bar{z}}^*\mathbf{\bar{z}}^*}(\tau,0)]}$$
(4.9)

onde o denominador da expressão (4.3) é representado por  $\det[M_{\bar{\mathbf{z}}^*\bar{\mathbf{z}}^*}(t'',t')] = M_{33}(t'',t')M_{44}(t'',t')-M_{34}(t'',t')M_{43}(t'',t')$ , sendo os objetos  $M_{\bar{\mathbf{z}}^*\bar{\mathbf{z}}^*}(t'',t')$ ,  $M_{\bar{\mathbf{z}}\bar{\mathbf{z}}^*}(t'',t')$ ,  $M_{\bar{\mathbf{z}}\bar{\mathbf{z$ 

$$\mathcal{H}''(t) = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{\mathbf{z}\,\mathbf{z}}(t) & \mathcal{H}_{\mathbf{z}\,\mathbf{z}^*}(t) \\ \mathcal{H}_{\mathbf{z}^*\,\mathbf{z}}(t) & \mathcal{H}_{\mathbf{z}^*\,\mathbf{z}^*}(t) \end{pmatrix} , \tag{4.10}$$

$$\begin{pmatrix} \delta z_x(t'') \\ \delta z_y(t'') \\ \delta z_x^*(t'') \\ \delta z_y^*(t'') \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{\mathbf{\bar{z}}\mathbf{\bar{z}}}(t'',t') & \mathbf{M}_{\mathbf{\bar{z}}\mathbf{\bar{z}}^*}(t'',t') \\ \mathbf{M}_{\mathbf{\bar{z}}^*\mathbf{\bar{z}}}(t'',t') & \mathbf{M}_{\mathbf{\bar{z}}^*\mathbf{\bar{z}}^*}(t'',t') \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta z_x(t') \\ \delta z_y(t') \\ \delta z_x^*(t') \\ \delta z_y^*(t') \end{pmatrix},$$

onde  $\mathcal{H}''(t)$  é definido de forma análoga aos elementos da matriz (4.6): basta substituir  $\mathcal{S}'$  por  $\tilde{H}$ .

As equações (4.5), (4.8) e (4.9) resolvem completamente o módulo do propagador diagonal na vizinhança de uma órbita real em função das correções  $\xi$ , resolvidas pelo método da matriz de monodromia.

#### 4.2.2 Gráficos Polares

Para comparar os resultados obtidos pelos três métodos apresentados nesta dissertação, foram construídos alguns gráficos para o propagador diagonal nas três situações, em função de três parâmetros: x, y, e o ângulo  $\theta$  entre  $p_x$  e  $p_y$ . O procedimento utilizado para construí-los foi o descrito a seguir.

Para cada gráfico fixamos o período T em um valor próximo de 4,443, e a energia clássica E, definida pelas coordenadas do centro do pacote na hamiltoniana H(4.2), que mantivemos em 0.5. Definimos então um conjunto de pontos (x;y) na vizinhança da trajetória vertical, ou seja, próximos ao eixo x=0. Esta "grade" de pontos, como podemos observar nas figuras 4.5 a 4.7, foi obtida segundo a relação  $(x = n \cdot 0, 08; y = m \cdot 0, 08)$ , onde m e n são inteiros, limitada à região classicamente permitida segundo a energia E. Para cada ponto (x;y) desta grade, indicado nos eixos dos gráficos, calculamos o propagador diagonal variando-se o ângulo  $\theta$  entre  $p_x$  e  $p_y$ . Vale ressaltar que o módulo do momento para cada (x;y) é determinado em função destes pontos e da energia. Note que para um determinado x e y destes gráficos, temos o valor do módulo do propagador somente em função de  $\theta$ . Para representar estes resultados, os esboçamos de forma análoga a um gráfico polar centrado no ponto (x;y) dado; o raio é representado pelo módulo do propagador ao quadrado e  $\theta$  pelo ângulo entre  $p_x$  e  $p_y$ . Para que os gráficos polares não se sobrepusessem no plano x-y, reescalamos o valor do módulo do propagador ao quadrado por um fator que é citado em cada figura. Os valores de  $\theta$  utilizados foram, em todos os pontos (x;y), iguais a  $10^{\circ}$ ,  $20^{\circ}$ ,  $30^{\circ}$ , ...,  $360^{\circ}$ , embora nas figuras aparentem ser distribuídos mais continuamente.

Para encerrar esta explicação, explicitamos a situação dos cinco parâmetros citados na seção 1.2.8, para as figuras 4.5 a 4.7: T é dado; x, y são variáveis;  $p_x = |\vec{p}(x,y,E)|\cos\theta$  e  $p_y = |\vec{p}(x,y,E)|\sin\theta$  são, para um dado (x;y), variáveis através do parâmetro  $\theta$ .

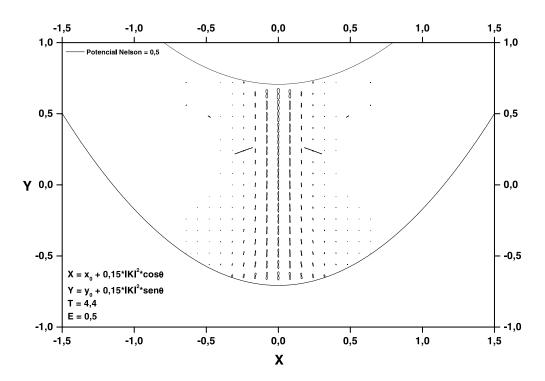


Figura 4.5: Propagador em função de x, y e  $\theta$  calculado através da utilização de trajetórias complexas: T=4,4; E=0,5 e o fator de reescala vale 0,15. Ressaltamos a existência de descontinuidades para os pontos (x=0,24; y=0,24), (x=-0,24; y=0,24) entre outros. As duas linhas em forma de parábola limitam a região onde os valores do potencial Nelson são menores que 0,5; é a região classicamente permitida.

#### Gráficos Polares para T = 4, 4

Na figura 4.5 apresentamos o propagador diagonal calculado através da utilização de trajetórias complexas para um período T=4,4, que é muito próximo do período da trajetória vertical. Podemos notar que, na medida em que os parâmetros se distanciam da trajetória vertical, o propagador cai rapidamente, comportamento representado pela diminuição dos gráficos polares, ao afastar-se do eixo x=0. Estes gráficos polares apresentam uma forma parecida com a do número "8" porque o propagador é maior para a região próxima de  $\theta=90^\circ$  ou 270°, ou seja, próximo de  $p_x=0$ . A explicação para este formato está no fato de que, quando  $p_x=0$ 

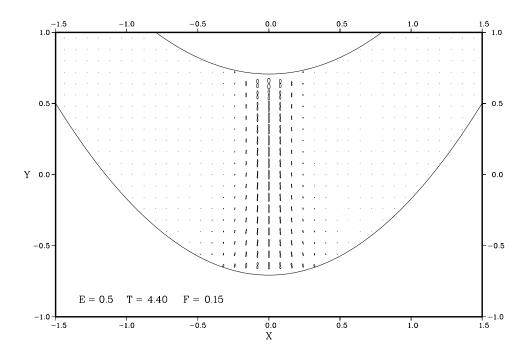


Figura 4.6: Propagador em função de x, y e  $\theta$ . Cálculo Quântico. T=4,4; E=0,5 e o fator de reescala vale 0,15. As duas linhas em forma de parábola limitam a região onde os valores do potencial Nelson são menores que 0,5; é a região classicamente permitida.

o propagador é calculado para parâmetros mais próximos da trajetória vertical. Quando  $\theta = 0^{\circ}$  ou  $180^{\circ}$ , as componentes do momento são ortogonais às da vertical, implicando um valor praticamente nulo do propagador para todos os pontos (x, y).

Um ponto interessante é que sobre a trajetória vertical, ou seja, para  $x=p_x=0$  podemos notar um aumento significativo do propagador para y positivo, o que não ocorre para o lado negativo. Ao observarmos com cuidado a figura 3.6, notamos que este comportamento já havia se manifestado. Para o limite da região classicamente permitida, delimitada no gráfico pelas duas curvas em forma de parábola, a energia cinética é zero, de modo que podemos comparar a figura 4.5 com a 3.6. Esta última indica que, para  $y \approx \pm 0,5$ ; o valor do propagador é realmente maior no lado em que y é positivo.

Um aspecto que vale a pena comentar é que, dependendo das larguras do estado

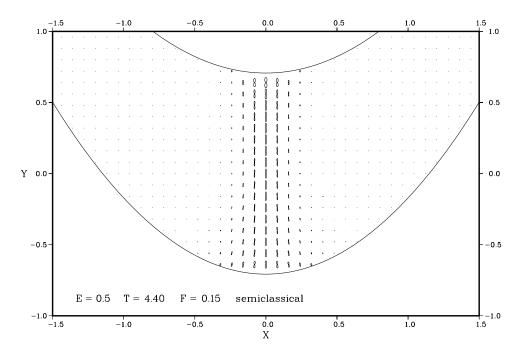


Figura 4.7: Propagador em função de x, y e  $\theta$  calculado pela aproximação de órbita real: T=4,4;E=0,5 e o fator de reescala vale 0,15. As duas linhas em forma de parábola limitam a região onde os valores do potencial Nelson são menores que 0,5; é a região classicamente permitida.

coerente utilizado, este comportamento citado no parágrafo anterior pode até se inverter; o propagador fica maior para y negativo e vice-versa. Isto pode ser explicado porque a hamiltoniana (3.3) de onde se extrai a trajetória, varia em função das larguras do pacote, sendo natural que a estabilidade da trajetória também varie. Poderíamos fazer algumas hipóteses acerca deste comportamento, explorando o fato do potencial apresentar, em relação à direção x, um "relevo" estável para y negativo, e instável para y positivo. Porém a complexidade, ao considerar cada largura, não permite nenhuma conclusão.

Na figura 4.5 ainda contamos com outro aspecto curioso. Para os pontos (x=0,24;y=0,24) e (x=-0,24;y=0,24), entre outros, notamos que os gráficos polares apresentam algumas descontinuidades. Porém antes de estudá-las, apresentaremos os gráficos equivalentes ao 4.5 para o cálculo quântico e para o cálculo por aproximação de órbita real.

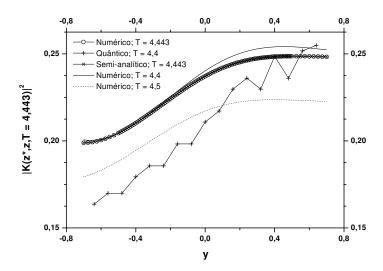


Figura 4.8: Módulo do propagador ao quadrado sobre a trajetória vertical em função de y. Parâmetros:  $x = p_x = 0$  e  $p_y$  é calculado em função de  $x, p_x, y$  e E = 0, 5. O período T é especificado no gráfico. O cálculo semi analítico foi feito para T = 4,443, pois o propagador tem solução analítica para este valor específico (vide seção 3.2)

Na figura 4.6 estão os resultados quânticos para o propagador, segundo parâmetros idênticos aos utilizados para a figura 4.5; e na 4.7 estão os resultados onde foi utilizada a aproximação de órbita real. Por estas figuras, podemos verificar que todos os cálculos demonstram praticamente os mesmos padrões, o que interpretamos como um bom desempenho das aproximações utilizadas, do ponto de vista qualitativo. Inclusive, uma observação um pouco mais minuciosa pode levar à conclusão de que os resultados obtidos através das trajetórias complexas estão mais próximos dos resultados quânticos do que os realizados via aproximação de órbita real.

Na tentativa de fazer uma análise quantitativa, construímos o gráfico 4.8. Nele esboçamos cinco situações para parâmetros idênticos, exceto T, especificado no gráfico. Salientamos que a curva quântica foi obtida medindo o valor do propagador na própria figura 4.6, pois tínhamos somente ela como fonte de informação. Isto acarreta um erro de medida de cerca de 10% que deve ser considerado. Pela

figura notamos que entre os cálculos quânticos e semiclássicos (via trajetórias complexas) temos uma diferença que é cerca de 20% para os menores valores de y, sendo que ela diminui para valores maiores de y. Dado que o cálculo quântico também possui uma imprecisão de aproximadamente 10% devido a problemas provenientes do truncamento da matriz de  $\hat{H}$  [21], confirmamos que a utilização de trajetórias complexas consiste numa aproximação para o cálculo do propagador.

Um fato interessante que observamos no gráfico da figura 4.5 é que a curva numérica de período T=4,4 é maior que a de período T=4,443. Em princípio deveríamos obter o contrário, já que no primeiro caso estamos mais distantes da trajetória real. Para explicarmos esta situação voltamos ao estudo dos objetos envolvidos no cálculo do propagador. Concluímos que a contribuição que indica o quão complexa é a trajetória, devendo abaixar o valor do propagador quando T=4,4; é anulada pela contribuição advinda da matriz de monodromia, que neste caso indica que a estabilidade da trajetória convergida é maior, subindo então o valor do propagador. Tal raciocínio faz sentido pois, ao propagarmos o estado coerente inicial por um tempo menor numa região bastante instável, como é o caso, o pacote tem menos tempo para se alargar, aumentando o valor da projeção do estado final sobre o inicial. A curva da figura 4.8 para T=4,5 foi construída para confirmar esta argumentação. A diferenca entre o período desta e o da trajetória vertical é praticamente a mesma para T=4,4; ou seja, as trajetórias para T=4,4e 4,5 devem apresentar "a mesma quantidade de complexidade". No entanto o valor do propagador para T=4,5 é bem menor. Isto porque o pacote, ao ser propagado por um tempo maior, se alarga mais, justificando tal comportamento.

#### Estudo das Descontinuidades da Figura 4.5

Mostramos nas figuras 4.9 e 4.10 algumas trajetórias utilizadas na construção do gráfico polar centrado em (x=0,24;y=0,24), apresentado na figura 4.5. No lado esquerdo destas figuras estão as trajetórias utilizadas como tentativa, e no direito, as trajetórias convergidas pelo método da matriz de monodromia, que são as que realmente contribuem para o propagador.

Podemos notar pelas figuras 4.9 e 4.10 que as trajetórias para  $\theta = 160^{\circ}$  e  $180^{\circ}$ 

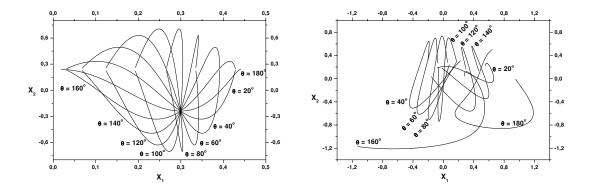


Figura 4.9: Partes reais das trajetórias envolvidas no propagador diagonal, com parâmetros  $x=y=0,24,\,T=4,4$  e E=0,5. Sendo que o outro parâmetro  $\theta$  é indicado em cada trajetória esboçada. No lado esquerdo apresentamos as trajetórias utilizadas como tentativa, e no direito, as que de fato contribuem ao propagador. A trajetória responsável pela descontinuidade vislumbrada na figura 4.5 é aquela com  $\theta=160^{\circ}$ .

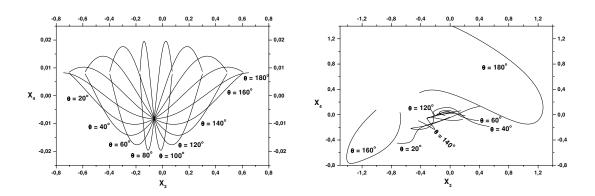


Figura 4.10: Idem à figura 4.9, para as partes imaginárias das trajetórias. Para  $\theta = 80^{\circ}$  e  $100^{\circ}$  as trajetórias estão muito próximas da origem e portanto é difícil a sua visualização.

são muito diferentes das outras, sendo a primeira aquela que leva à descontinuidade observada em 4.5 (x=0,24;y=0,24). Para  $\theta=180^{\circ}$ , a trajetória também produz uma descontinuidade no valor do propagador que não conseguimos distinguir na figura 4.5, para notar esta descontinuidade, observe a figura 4.11. Todas as trajetórias apresentadas no lado direito das figuras 4.9 e 4.10 foram convergidas

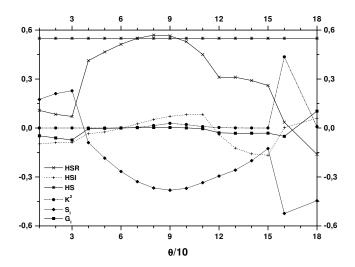


Figura 4.11: Quantidades físicas relacionadas às trajetórias contribuintes para o módulo do propagador diagonal, em função do ângulo  $\theta$  entre  $p_x$  e  $p_y$ , com parâmetros  $x=y=0,24,\ T=4,4$  e E=0,5. Legenda:  $\tilde{H}_{\rm real}\equiv {\rm HSR},$   $\tilde{H}_{\rm imag}\equiv {\rm HSI},\ \mathcal{S}_{\rm imag}\equiv {\rm S_I},\ \mathcal{G}_{\rm imag}\equiv {\rm G_I},\ |K(\mathbf{z}^*,\mathbf{z},T)|^2\equiv {\rm K}^2$  e  $\tilde{H}(x,y,p_x,p_y)\equiv {\rm HS}.$ 

a partir de tentativas que seguem um certo padrão de continuidade (observadas no lado esquerdo das figuras), mas ao final do processo de convergência acabam descontínuas. Vale ressaltar que as trajetórias que produzem a descontinuidade possuem as partes imaginárias predominantemente negativas, ao contrário daquelas que não produziram tal efeito. Isto parece explicar o fato da parte imaginária da ação S ser muito negativa (figura 4.11), o que implica num aumento no valor do módulo do propagador. De fato, existem trajetórias cujas partes imaginárias sejam predominantemente negativas, sem causar descontinuidades, como por exemplo a trajetória para x = 0,4 mostrada na figura 4.3, porém para esta trajetória a parte imaginária de S não é tão negativa, como observamos na figura 4.4. Aparentemente esta argumentação baseada na parte imaginária de  $\mathcal{S}$  parece garantir a explicação para as descontinuidades observadas, no entanto não consideramos este problema definitivamente resolvido. Salientamos que as trajetórias de fato existem; satisfazem às condições de contorno e às equações de movimento, mas consideraremos que tais trajetórias não devem ser válidas, sendo que não sabemos ainda como formalizar esta exclusão. Acreditamos que, ao estudar com mais cuidado a aproximação de fase estacionária, poderemos encontrar a resposta para este problema.

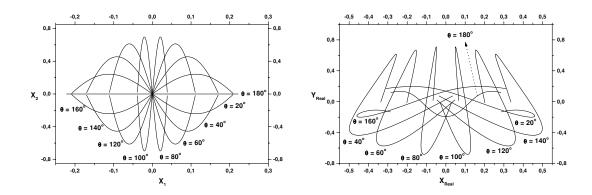


Figura 4.12: Partes reais das trajetórias envolvidas no propagador diagonal, com parâmetros  $x=y=0,\,T=4,4$  e E=0,5. Sendo que o outro parâmetro  $\theta$  é indicado em cada trajetória esboçada. No lado esquerdo apresentamos as trajetórias utilizadas como tentativa, e, no direito, as que de fato contribuem para o propagador.

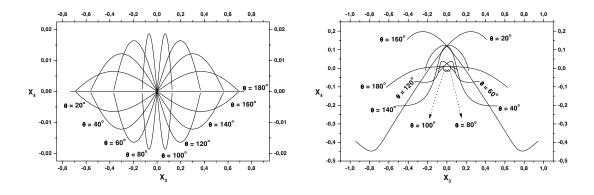


Figura 4.13: Idem à figura 4.12, para as partes imaginárias das trajetórias.

Supomos que estas trajetórias são as não garantidas pelo método de fase estacionária, utilizado na aproximação do propagador. Ou seja, estas trajetórias se encontrariam entre os pontos do espaço de fase excluídos pelo contorno da integral. Existe também a possibilidade destas descontinuidades serem anuladas, ao considerar outras trajetórias que satisfaçam às mesmas condições de contorno, já que devem existir muitas trajetórias nestas condições.

Na figura 4.11 apresentamos o valor das quantidades físicas calculadas a partir

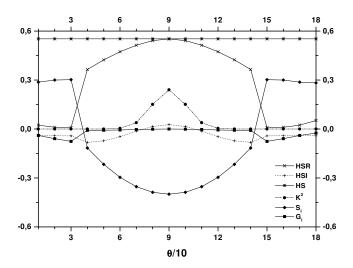


Figura 4.14: Idem a figura 4.11, exceto pelos parâmetros x e y que aqui valem 0.

das trajetórias relacionadas ao gráfico polar centrado em (x = 0, 24; y = 0, 24) da figura 4.5. Entre estas trajetórias incluem-se aquelas esboçadas em 4.9 e 4.10. Por esta figura notamos que todas as quantidades são descontínuas para as trajetórias onde  $\theta = 160^{\circ}$  e  $180^{\circ}$ , o que causa um aumento inesperado no valor do propagador.

Por completeza apresentamos nas figuras 4.9 e 4.10 as trajetórias utilizadas, ao resolvermos o propagador do gráfico polar centrado em x=0; y=0 da figura 4.5. As grandezas físicas relacionadas a este gráfico polar são esboçadas em 4.14. Nossa intenção, ao expor estas figuras, é ilustrar as trajetórias para um caso onde não haja descontinuidades.

#### Gráficos Polares para T = 4, 2 e T = 4, 6

Até agora estudamos o propagador diagonal para um período T muito próximo ao da trajetória vertical. Pretendemos nesta parte apresentar os gráficos polares análogos aos esboçados nas figuras 4.5 a 4.7 com uma única diferença; o tempo T de evolução do estado inicial será um pouco mais distante de  $T=\pi\sqrt{2}$  em relação ao que era naquela ocasião (T=4,4).

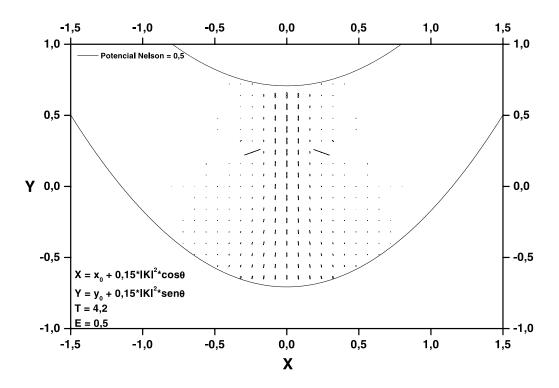


Figura 4.15: Propagador em função de x, y e  $\theta$  calculado através da utilização de trajetórias complexas: T=4,2; E=0,5 e o fator de reescala vale 0,15. Ressaltamos a existência de descontinuidades para os pontos (x=0,24;y=0,24), (x=-0,24;y=0,24) entre outros.

Começaremos então pela apresentação da figura 4.15. Nela estão os resultados do propagador calculados através da utilização das trajetórias complexas para T=4,2. Ao compararmos este gráfico com o apresentado na figura 4.5, podemos notar claramente que os gráficos polares (os "8's") reduziram o seu tamanho, como já esperávamos. Para este período, as trajetórias que contribuem para o propagador já estão consideravelmente complexas, o que abaixa o valor deste objeto. Neste ponto podemos voltar à discussão realizada em torno da figura 4.8, afinal o período diminuiu em relação ao da figura 4.5, implicando que o termo que contém os elementos da matriz de monodromia deveria contribuir positivamente ao propagador. De fato este comportamento pode até acontecer, mas certamente o período adotado é suficientemente distante da trajetória real de modo que a contribuição das partes imaginárias da trajetória são suficientes para anulá-lo e ainda abaixar o valor do propagador. Voltaremos a este assunto, quando compararmos o

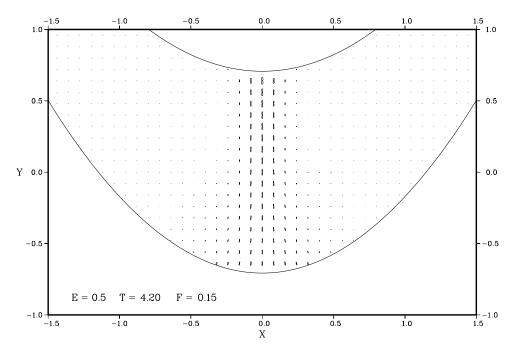


Figura 4.16: Propagador em função de x, y e  $\theta$ . Cálculo Quântico: T=4,2; E=0,5 e o fator de reescala vale 0,15.

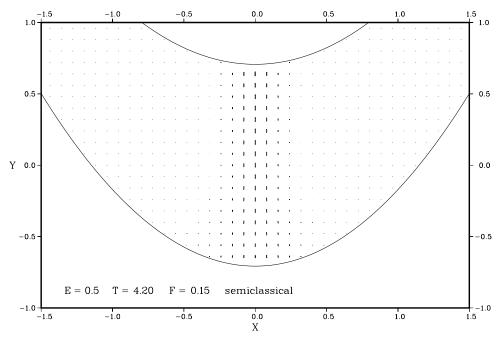


Figura 4.17: Propagador em função de x,y e  $\theta$  calculado pela aproximação de órbita real: T=4,2;E=0,5 e o fator de reescala vale 0,15.

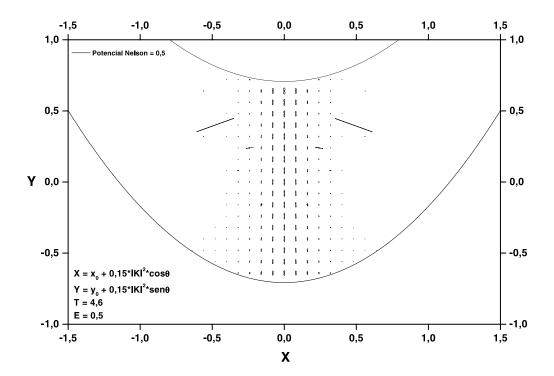


Figura 4.18: Propagador em função de x, y e  $\theta$  calculado através da utilização de trajetórias complexas: T=4,6; E=0,5 e o fator de reescala vale 0,15. Ressaltamos a existência de descontinuidades para os pontos (x=0,24; y=0,24), (x=-0,24; y=0,24) entre outros.

propagador para T=4,6. Na figura 4.15 ainda podemos notar descontinuidades semelhantes às encontradas em 4.5, entretanto consideramos suficiente a discussão já realizada e desta vez não entraremos em detalhes.

Observando as figuras 4.16 e 4.17, onde é apresentado, respectivamente, o cálculo quântico e o semiclássico por aproximação de órbita real, concluímos que os resultados concordam muito bem entre si, como ocorrera para T=4,4. Novamente notamos uma maior semelhança entre os resultados por órbitas complexas e o quântico, em relação à comparação entre o quântico e o por aproximação de órbita real. Para os resultados onde T=4,6, que são apresentados nas figuras 4.18 a 4.20, também observamos uma boa concordância entre os três cálculos. Mas para este período não é claro que a utilização de órbitas complexas proporciona uma concordância melhor com cálculo quântico, em comparação à aproximação por

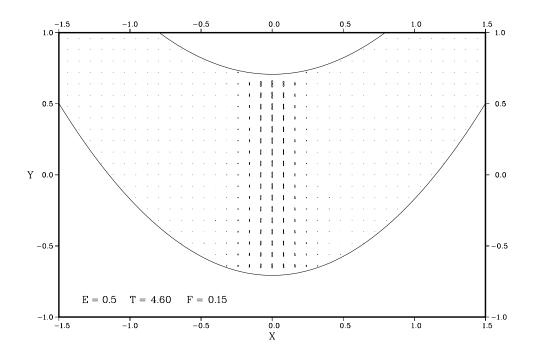


Figura 4.19: Propagador em função de x,y e  $\theta$ . Cálculo Quântico: T=4,6; E=0,5 e o fator de reescala vale 0,15.

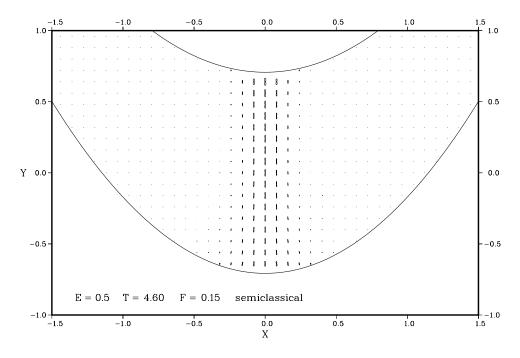


Figura 4.20: Propagador em função de x, y e  $\theta$  calculado pela aproximação de órbita real: T=4,6; E=0,5 e o fator de reescala vale 0,15.

órbita real.

Discutiremos agora uma comparação entre os resultados obtidos para T=4,2 e 4,6. Note que o primeiro caso é aproximadamente uma vez e meia mais distante da trajetória real do que o segundo, ou seja, a diferença para os períodos utilizados na figura 4.15 e na 4.18, em relação ao da trajetória vertical, é respectivamente,  $0.243 (\approx 1.5 \cdot 0.157)$  e 0.157. Seguindo este raciocínio os gráficos polares da figura 4.15 deveriam ser bem menores ao da 4.18. Entretanto eles possuem aproximadamente o mesmo tamanho. Para justificar este fato devemos voltar a considerar a estabilidade das duas trajetórias; para T=4,2 o pacote de onda é propagado por um tempo menor do que para T=4,5; fazendo com que este espalhe menos e aumente a sobreposição com o pacote inicial.

#### 4.3 Gráficos Polares para Energias Diferentes

Nesta parte da dissertação apresentaremos dois resultados que são mostrados nos gráficos das figuras 4.21 e 4.22. Agora não pretendemos mais compará-los a resultados quânticos, mas somente confirmar o fato de que, quanto maior a energia e portanto maior a instabilidade das trajetórias, menor o valor do propagador diagonal. Para isso, construímos gráficos análogos ao da figura 4.5, com a diferença que fixamos o valor da energia em 0.3 e 0.7 respectivamente, sendo o período T fixo em 4.443.

Nas figuras 4.21 e 4.22 temos o propagador diagonal para energia fixa em 0,3 e 0,7 respectivamente. Uma observação desatenta poderia levar à conclusão de que os dois resultados não apresentam grande diferença entre si e entre os resultados apresentados anteriormente (figuras 4.5, 4.7 e 4.6). Mas note que existe uma diferença no fator de escala das figuras. Para 4.21, o propagador desenhado na figura é somente 10% do seu valor real, ou seja, o fator de escala é igual a 0,1, enquanto que para a figura 4.22 o fator vale 0,2. Se os dois gráficos fossem colocados em uma mesma escala, notaríamos com uma maior facilidade que, para a energia menor (0,3), o propagador é aproximadamente o dobro do que para energia igual a 0,7; sendo que nas outras figuras os valores dos propagadores possuem valores inter-

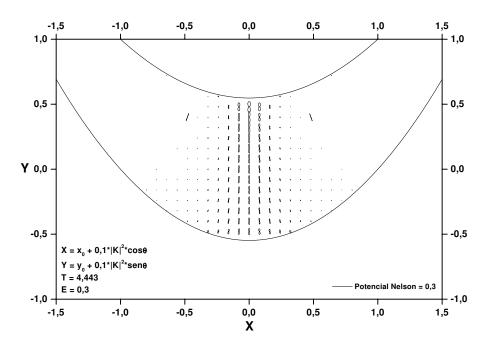


Figura 4.21: Propagador em função de x,y e  $\theta$  calculado pelo método das trajetórias complexas: T=4,443; E=0,3

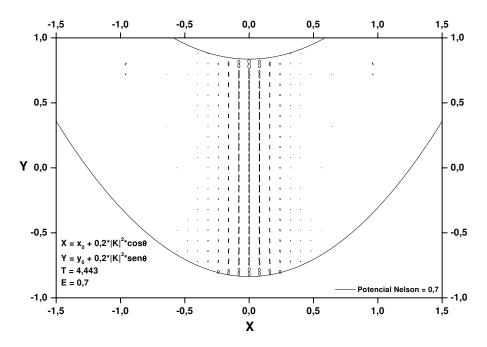


Figura 4.22: Propagador em função de x,y e  $\theta$  calculado pelo método das trajetórias complexas: T=4,443; E=0,7

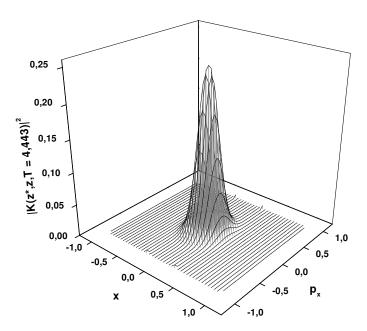


Figura 4.23: Módulo do propagador diagonal ao quadrado em função x e  $p_x$ . Parâmetros:  $T=4,443,\ y=0$  e  $p_y$  calculado em função das variáveis  $x,\ p_x$  e das constantes, y=0 e energia E=0,5.

mediários. Isto corrobora a discussão já realizada, onde relacionávamos energia e estabilidade do sistema ao valor do propagador.

Ressaltamos que nas figuras 4.21 e 4.22 as regiões classicamente permitidas são diferentes, já que elas são definidas pelo valor da energia, que são diferentes.

## 4.4 Propagador em Função das Coordenadas do Espaço de Fase $x - p_x$

O último resultado que apresentamos encontra-se na figura 4.23 e é construído da seguinte maneira. Fixamos a energia em E=0,5 e o período T=4,443. Calculamos então o propagador para uma grade de pontos  $x,p_x$  na vizinhança da origem deste plano. O parâmetro  $p_y$  é previamente determinado pois é função de  $E, x, p_x$  e y, sendo que o último foi fixado em 0. Mais uma vez fica claro o rápido decaimento, apartir do afastamento da trajetória vertical, que naquele gráfico é representada pelo único ponto  $x=p_x=0$ .

#### Capítulo 5

#### Comentários Finais

Comentaremos aqui este trabalho de Mestrado de uma forma geral, apresentando algumas conclusões e perspectivas para trabalhos futuros.

O propagador na representação de estados coerentes  $K\left(\mathbf{z}_{(N)}^{*},\,\mathbf{z}_{(0)},\,T\right)=\left\langle \mathbf{z}_{(N)}\right|$  $e^{-i\hat{H}T/\hbar} |\mathbf{z}_{(0)}\rangle$ , quando aproximado segundo o método de fase estacionária, é escrito como uma expansão em torno de trajetórias clássicas, regidas por $\langle \mathbf{z} | \hat{H} | \mathbf{z} \rangle$ , que conectam  $\mathbf{z}_{(0)}$  a  $\mathbf{z}_{(N)}^*$  num tempo T, e que podem estar num espaço de fase complexo. Esta é a primeira contribuição ao cálculo do propagador semiclássico; quanto mais próximas de um espaço de fase real estiverem as trajetórias, maior será a contribuição para o cálculo do propagador e vice-versa. Entretanto não é somente esta condição que influi no propagador semiclássico. Ao considerarmos as correções em segunda ordem na aproximação de fase estacionária, encontramos uma segunda contribuição que está relacionada à estabilidade desta trajetória clássica: quanto mais estável ela for, maior é o valor do propagador e vice-versa. Tendo em vista estes dois aspectos, explicamos qualitativamente quase todos os resultados obtidos. Mas note que do ponto de vista da Mecânica Quântica, não podemos fazer uso destes argumentos para explicar os resultados obtidos. Para explicá-los, devemos considerar as características das funções de onda e níveis de energia envolvidos. Lembramos que é esta a nossa motivação inicial; através do propagador semiclássico obter informações acerca do sistema quântico, interpretando-o via comportamento clássico. Esta relação entre quântico e clássico pode ser dada através das órbitas periódicas, como na Fórmula do Traço de Gutzwiller.

Um ponto de grande importância é que os resultados do propagador diagonal calculados através de trajetórias complexas concordaram muito bem com os resultados quânticos e com os obtidos através da aproximação por órbita real. Já que esta aproximação por órbita complexa demonstrou-se satisfatória, pelo menos para os casos estudados, pretendemos estender nossos estudos às regiões onde a aproximação por órbita real não funcionou. É o caso onde o propagador é calculado na vizinhança de duas ou mais trajetórias reais, de modo que a contribuição de todas as órbitas devem ser incluídas. O que acontece é que na aproximação por órbita real não há uma "receita" para incluir satisfatoriamente todas elas, e a contribuição devido à interferência entre as trajetórias não é bem calculada nesta aproximação. Com o uso das trajetórias complexas, esperamos que a fase da contribuição de cada uma delas garanta um termo válido de interferência.

Quanto às descontinuidades encontradas, pretendemos ainda tentar entendê-las melhor. Em princípio desconsideraremos as órbitas que forneçam comportamentos descontínuos, mas, sendo possível, estudaremos melhor este problema, na tentativa de encontrar algumas restrições às trajetórias clássicas complexas que eliminem formalmente tais órbitas.

Gostaríamos de ressaltar também um fato que, apesar de não ter sido ainda documentado nesta dissertação, merece ser destacado. A questão é que, ao alterarmos as larguras dos estados coerentes envolvidos no propagador, mantendo o valor de  $\hbar$ , podemos mudar bastante os padrões dos resultados obtidos. O fato é que tal alteração influi diretamente nas trajetórias utilizadas para o cálculo. A hamiltoniana que as governa  $(\tilde{H})$  é função das larguras dos estados coerentes, produzindo trajetórias diferentes para larguras diferentes.

Enfim, destacamos que futuramente pretendemos aplicar a aproximação semiclássica do propagador a problemas de espalhamento.

#### Bibliografia

- [1] Alfredo M. Ozório de Almeida. Sistemas Hamiltonianos: Caos e Quantização. Editora da Unicamp, Universidade Estadual de Campinas, 1995.
- [2] Edward Ott. *Chaos in Dynamical Systems*. Cambridge University, Cambridge, 1993.
- [3] A. J. Lichtenberg e M. A. Lieberman. Regular and Caotic Dynamics Applied Mathematical Sciences. Springer-Verlag, New York, 1992.
- [4] M. C. Gutzwiller. Chaos in Classical and Quantum Mechanics. Springer-Verlag, New York, 1990.
- [5] Eugen Merzbacher. Quantum Mechanics. John Wiley & Sons, New York, 1961.
- [6] Marcus A. M. de Aguiar. Uma Introdução ao Estudo de Caos na Mecânica Quântica. Notas de Aula – Unicamp, 1997.
- [7] V. P. Maslov e M. V. Feodoriuk. Semi-Classical Approximations in Quantum Mechanics. Reidel, Boston, 1981.
- [8] V. P. Maslov. Théorie des Perturbations et Méthodes Asymptotiques. Dunod, Paris, 1972.
- [9] R. P. Feynman e A. R. Ribbs. Quantum Mechanics and Path Integrals. McGrall-Hill, New York, 1965.
- [10] M. Baranger e K. T. R. Davies. Ann. of Physics, 177:330, 1987.
- [11] C. Cohen-Tannoudji e B. Diu e Franck Lalöe. Quantum Mechanics, volume 1. Jonh Wiley & Sons, New York, 1977.

- [12] J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*, volume 1. Addison Wesley Publishing Company, Massachusetts, 1995.
- [13] A. L. Xavier Jr. and M. A. M. de Aguiar. Phys. Rev. Lett., 79:3323, 1997.
- [14] M. A. M. de Aguiar, M. Baranger, F. Keck, H. J. Korsch, and B. Schellaaß. em preparação.
- [15] A. L. Xavier Jr. and M. A. M. de Aguiar. Ann. of Physics, 252:458, 1997.
- [16] A. L. Xavier Jr. and M. A. M. de Aguiar. Phys. Rev. A, 54:1808, 1996.
- [17] M. Baranger and M. A. M. de Aguiar. não publicado.
- [18] J. R. Klauder. *Phys. Rev. D*, 19, 1979.
- [19] M. Baranger, K. T. Davies, and J. H. Mahoney. Ann. of Physics, 186:95, 1988.
- [20] D. W. Jordan e P. Smith. Nonlinear Ordinary Differential Equations. Clarendon Press Oxford, Oxford, 1987.
- [21] M. Baranger. Comunicação Pessoal.
- [22] M. A. M. de Aguiar. Comunicação Pessoal.

#### Apêndice A

#### As Duas Hamiltonianas $\tilde{H}$ e H

Para um hamiltoniano bidimensional da forma:

$$\hat{H} = \left(\frac{\hat{P}_x^2}{2} + \frac{1}{2}\omega_x^2 \hat{X}^2\right) + \left(\frac{\hat{P}_y^2}{2} + \frac{1}{2}\omega_y^2 \hat{Y}^2\right) + \hat{W}(\hat{X}, \hat{Y}) ,$$

onde  $\hat{W}(\hat{X}, \hat{Y})$  é um termo não harmônico, podemos escrever a sua média em estados coerentes  $\tilde{H} = \langle \mathbf{z} | \hat{H} | \mathbf{z} \rangle$  como:

$$\tilde{H} = H + \frac{1}{2}\hbar\omega_x + \frac{1}{2}\hbar\omega_y + \left[\mathcal{W}(x,y) - W(x,y)\right] , \qquad (A.1)$$

onde:

$$H = \left(\frac{p_x^2}{2} + \frac{1}{2}\omega_x^2 x^2\right) + \left(\frac{p_y^2}{2} + \frac{1}{2}\omega_y^2 y^2\right) + W(x, y) ,$$

e  $\mathcal{W}$  é a função suavizada  $\langle \mathbf{z} | \hat{W} | \mathbf{z} \rangle$ , que pode ser escrita na representação de coordenadas como:

$$\mathcal{W}(x,y) = \frac{1}{\pi b_x b_y} \int dx' dy' \exp\left[-\left(\frac{x'-x}{b_x}\right)^2 - \left(\frac{y'-y}{b_y}\right)^2\right] W(x',y') .$$

Para calcularmos W-W, é conveniente escrevermos W numa forma alternativa:

$$W(x,y) = \frac{1}{\pi b_x b_y} \int dx' dy' \exp\left[-\frac{x'^2}{b_x^2} - \frac{y'^2}{b_y^2}\right] W(x+x',y+y') .$$

Se a função W varia lentamente em relação à escala de  $b_x$  e  $b_y$ , podemos expandila em tormo de x e y, como uma função de x' e y':

$$W(x + x', y + y') \simeq W(x, y) + x' \frac{\partial W}{\partial x} + y' \frac{\partial W}{\partial y} + \frac{1}{2} \left( x'^2 \frac{\partial^2 W}{\partial x^2} + 2 x' x'' \frac{\partial^2 W}{\partial x \partial y} + y'^2 \frac{\partial^2 W}{\partial y^2} \right),$$

sendo que a partir desta equação calculamos diretamente o valor:

$$\mathcal{W}(x,y) - W(x,y) \simeq \frac{1}{4} \left( b_x^2 \frac{\partial^2 W}{\partial x^2} + b_y^2 \frac{\partial^2 W}{\partial y^2} \right) .$$

Substituindo este valor na equação (A.1) e mudando de variáveis, escrevemos:

$$\tilde{H}(\mathbf{u}, \mathbf{v}) - H(\mathbf{u}, \mathbf{v}) \simeq \frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 H}{\partial u_x \partial v_x} + \frac{\partial^2 H}{\partial u_y \partial v_y} \right) ,$$
 (A.2)

onde lembramos que esta relação é válida somente no limite de  $b_x$  e  $b_y$ , tendendo a zero, que é equivalente a  $\hbar \to 0$ .

#### Apêndice B

# Expansão do Objeto A em Função da Órbita Real

Por conveniência, utilizaremos neste apêndice a notação definida pelas relações (1.34). Podemos então escrever as equações de movimento (1.40) para a trajetória real  $\bar{\mathbf{z}}$  como:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \dot{\bar{\chi}}_{1} \\ \dot{\bar{\chi}}_{2} \\ \dot{\bar{\chi}}_{3} \\ \dot{\bar{\chi}}_{4} \end{pmatrix}}_{\dot{z}(t)} = -\frac{i}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{\tilde{H}}{\partial \bar{\chi}_{1}} \\ \frac{\tilde{H}}{\partial \bar{\chi}_{2}} \\ \frac{\tilde{H}}{\partial \bar{\chi}_{3}} \\ \frac{\tilde{H}}{\partial \bar{\chi}_{4}} \end{pmatrix}}_{\vec{\nabla} \tilde{H}(t)}, \tag{B.1}$$

A equação (1.41), que descreve os pequenos deslocamentos em relação a esta trajetória, tem a forma:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} \dot{\xi}_{1}(t) \\ \dot{\xi}_{2}(t) \\ \dot{\xi}_{3}(t) \\ \dot{\xi}_{4}(t) \end{pmatrix}}_{\dot{\xi}(t)} = -\frac{i}{\hbar} J \underbrace{\begin{pmatrix} \mathcal{H}_{11} & \mathcal{H}_{12} & \mathcal{H}_{13} & \mathcal{H}_{14} \\ \mathcal{H}_{21} & \mathcal{H}_{22} & \mathcal{H}_{23} & \mathcal{H}_{24} \\ \mathcal{H}_{31} & \mathcal{H}_{32} & \mathcal{H}_{33} & \mathcal{H}_{34} \\ \mathcal{H}_{41} & \mathcal{H}_{42} & \mathcal{H}_{43} & \mathcal{H}_{44} \end{pmatrix}}_{\mathcal{H}''(t)} \underbrace{\begin{pmatrix} \xi_{1}(t) \\ \xi_{2}(t) \\ \xi_{3}(t) \\ \xi_{4}(t) \end{pmatrix}}_{\xi(t)}. \tag{B.2}$$

O objeto que queremos calcular é a matriz  $M(\tau+t)$ , que é definida pela equação:

$$\xi(\tau + t) = M(\tau + t)\xi(0).$$

Expandindo a grandeza  $\xi(\tau + t)$ , em torno da trajetória real, até a primeira ordem em t, obtemos:

$$\xi(\tau + t) = \xi(\tau) + t \dot{\xi}(\tau) + \mathcal{O}(t^2). \tag{B.3}$$

Sendo que  $\bar{\mathbf{z}}$  é uma trajetória periódica de período  $\tau$ , é válida a relação  $\mathcal{H}''(\tau)$  =  $\mathcal{H}''(0)$ , de modo que a equação (B.2) pode ser escrita como:

$$\dot{\xi}(\tau) = -\frac{i}{\hbar} \, J \mathcal{H}''(0) \, M(\tau) \, \xi(0) \,, \tag{B.4}$$

de forma que a equação (B.3) fica igual a:

$$\xi(\tau + t) = M(\tau) \, \xi(0) + -\frac{i}{\hbar} \, t \, J \mathcal{H}''(0) \, M(\tau) \, \xi(0) \, t.$$

Por esta equação podemos concluir diretamente que:

$$M(\tau + t) = \left(1 - \frac{i}{\hbar} J\mathcal{H}''(0)\right) M(\tau).$$

Para continuar resolvendo o denominador do objeto  $\mathcal{A}$ , reescreveremos os objetos  $\mathcal{H}''(t)$  e M(t) de uma maneira mais conveniente:

$$\mathcal{H}''(t) = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{\mathbf{z}\mathbf{z}}(t) & \mathcal{H}_{\mathbf{z}\mathbf{z}^*}(t) \\ \mathcal{H}_{\mathbf{z}^*\mathbf{z}}(t) & \mathcal{H}_{\mathbf{z}^*\mathbf{z}^*}(t) \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \mathbf{M}(t) = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_{\mathbf{z}\mathbf{z}}(t) & \mathbf{M}_{\mathbf{z}\mathbf{z}^*}(t) \\ \mathbf{M}_{\mathbf{z}^*\mathbf{z}}(t) & \mathbf{M}_{\mathbf{z}^*\mathbf{z}^*}(t) \end{pmatrix},$$

de modo que o denominador de  $\mathcal{A}$ , calculado próximo à trajetória real, possa ser escrito como:

$$M_{33}(t+\tau)M_{44}(t+\tau) - M_{34}(t+\tau)M_{43}(t+\tau) = \det[M_{\bar{z}^*\bar{z}^*}(t+\tau)].$$

Temos somente que calcular  $\det[\mathbf{M}_{\mathbf{\bar{z}}^*\mathbf{\bar{z}}^*}(t+\tau,0)]$ . Para isso note que vale a relação:

$$\left(J \mathcal{H}''(\tau+t)M(\tau)\right)_{\mathbf{z} = \mathbf{z}} = -\mathcal{H}_{\mathbf{z} \mathbf{z}}(\tau+t)M_{\mathbf{z} \mathbf{z}^*}(\tau) - \mathcal{H}_{\mathbf{z} \mathbf{z}^*}(\tau+t)M_{\mathbf{z}^* \mathbf{z}^*}(\tau),$$

o que implica:

$$M_{\mathbf{z}^*\mathbf{z}^*}(t+\tau) = \left[1 + \frac{i}{\hbar} t \underbrace{\left(\mathcal{H}_{\mathbf{z}\mathbf{z}}(\tau+t) M_{\mathbf{z}\mathbf{z}^*}(\tau) M_{\mathbf{z}^*\mathbf{z}^*}^{-1}(\tau) + \mathcal{H}_{\mathbf{z}\mathbf{z}^*}(\tau+t)\right)}_{\mathcal{K}^*\mathbf{z}^*}\right] M_{\mathbf{z}^*\mathbf{z}^*}(\tau).$$
(B.5)

Portanto, o resultado final fica:

$$\det[\mathbf{M}_{\mathbf{\bar{z}}^*\mathbf{\bar{z}}^*}(t+\tau)] = \det[\mathbf{M}_{\mathbf{\bar{z}}^*\mathbf{\bar{z}}^*}(\tau)] \exp \left[\frac{i}{\hbar} t \operatorname{tr}(\mathcal{K})\right],$$

onde K é definido pela equação (B.5).

### Lista de Figuras

1.1	Espaço de fase arbitrário. Representamos a única trajetória clássica determinada pela evolução temporal do estado $(r_{(0)}, p_{r(0)}, t = 0)$ , enfatizando a inexistência de uma órbita que o conectasse a pontos	
	fora da trajetória clássica, como por exemplo $(r_?, p_{r?}, t=?)$	22
3.1	Potencial Nelson em uma visão tridimensional. Para $x=0$ temos	
	exatamente o potencial de um oscilador harmônico simples	45
3.2	Seção de Poincaré $(x-p_x)$ para energia igual a 0,05. À direita temos	
	a dinâmica gerada pelo potencial Nelson na sua forma original (3.1),	
	e à esquerda em sua forma suavizada (3.3). Para esta energia os	
	potenciais ainda apresentam um regime de bastante regularidade	46
3.3	Idem à figura 3.2 para energia igual a 0,1. Neste caso a energia é	
	duas vezes maior do que a utilizada na figura anterior, e já temos	
	um regime em que existem poucas regiões de regularidade	46
3.4	Idem à figura 3.2 para energia igual a 0,5. O regime obtido para esta	
	energia é totalmente caótico para os dois potenciais	47
3.5	Curvas de nível para o potencial Nelson. Para $x=0$ temos exata-	
	mente o potencial de um oscilador harmônico simples, onde aparece	
	a trajetória vertical	48
3.6	Módulo do propagador ao quadrado para pontos sobre a trajetória	
	vertical com energia cinética inicial igual a zero, em função de $y$	
	$(x=p_x=p_y=0\ \mathrm{e}\ T=4,443)$ . Note que não há diferença entre o	
	cálculo semi-analítico (representado pelo símbolo +) e o totalmente	
	numérico ( $\circ$ )	51
3.7	Módulo do propagador ao quadrado para pontos sobre a trajetória	
	vertical, em função de $y$ e $p_y$ ( $x=p_x=0$ e $T=4,443$ )	52

4.1	Módulo do propagador diagonal ao quadrado para pontos deslocados	
	da trajetória vertical, em função da posição do centro do estado	
	coerente $x \in y \ (p_y = p_x = 0 \in T = 4,443).$	55
4.2	Partes reais das trajetórias envolvidas no propagador diagonal. O	
	gráfico do lado esquerdo foi construído com parâmetros $y=0,5,$	
	$p_y=p_x=0$ e $T=4,443,$ e $x$ especificado na figura. Trata-se de um	
	corte na região onde existe a ramificação mostrada pela figura 4.1;	
	para o parâmetro $x$ variando de 0 até 0,375, as trajetórias seguem	
	continuamente o padrão existente no canto esquerdo deste gráfico,	
	e, para valores acima deste, elas seguem o padrão existente no canto	
	direito. O gráfico do lado direito foi construído com parâmetros	
	$y = -0, 5, p_y = p_x = 0$ e $T = 4,443$ , onde não existe a citada	
	ramificação; neste caso as trajetórias seguiram sempre um mesmo	
	padrão	57
4.3	Partes imaginárias das trajetórias envolvidas no propagador diag-	
	onal. O gráfico do lado esquerdo foi construído com parâmetros	
	$y=0,5,p_y=p_x=0$ e $T=4,443,$ e $x$ especificado na figura. E	
	o gráfico do lado direito com parâmetros $y=-0,5,p_y=p_x=0$ e	
	T=4,443. Para estes gráficos valem os mesmos comentários real-	
	izados para a figura 4.2. Um ponto que merece ser acrescentado é o	
	fato das trajetórias imaginárias para $y=0,5$ serem grandes quando	
	x = 0,4 (onde temos a descotinuidade), e, na medida em que au-	
	mentamos $x$ até 1,5, o tamanho das trajetórias passa por um mínimo	
	próximo de $x$ igual a $0.9$ . Depois deste valor as partes imaginárias	
	das trajetórias voltam a aumentar, seguindo um padrão diferente	58
4.4	Quantidades físicas relacionadas às trajetórias contribuintes para	
	o módulo do propagador diagonal, em função da posição $x$ , com	
	parâmetros $y=0,5,p_y=p_x=0$ e $T=4,443.$ Legenda: $\tilde{H}_{\rm real}\equiv$	
	$\mathrm{HSR},\ \tilde{H}_{\mathrm{imag}} \equiv \mathrm{HSI},\ \mathcal{S}_{\mathrm{imag}} \equiv \mathrm{S_I},\ \mathcal{G}_{\mathrm{imag}} \equiv \mathrm{G_I},\ \left K\left(\mathbf{z}^*,\mathbf{z},T\right)\right ^2 \equiv \mathrm{K}^2 \ \mathrm{e}^{-2}$	
	$\tilde{H}(x, y, p_x, p_y) \equiv \text{HS.}$	59

4.5	Propagador em função de $x,\ y$ e $\theta$ calculado através da utilização de	
	trajetórias complexas: $T = 4,4; E = 0,5$ e o fator de reescala vale	
	0,15. Ressaltamos a existência de descontinuidades para os pontos	
	(x = 0, 24; y = 0, 24), (x = -0, 24; y = 0, 24) entre outros. As	
	duas linhas em forma de parábola limitam a região onde os valores	
	do potencial Nelson são menores que 0,5; é a região classicamente	
	permitida	65
4.6	Propagador em função de $x, y$ e $\theta$ . Cálculo Quântico. $T=4,4;$	
	E=0,5e o fator de reescala vale 0,15. As duas linhas em forma de	
	parábola limitam a região onde os valores do potencial Nelson são	
	menores que 0,5; é a região classicamente permitida	66
4.7	Propagador em função de $x, y$ e $\theta$ calculado pela aproximação de	
	órbita real: $T=4,4;E=0,5$ e o fator de reescala vale 0,15. As	
	duas linhas em forma de parábola limitam a região onde os valores	
	do potencial Nelson são menores que 0,5; é a região classicamente	
	permitida.	67
4.8	Módulo do propagador ao quadrado sobre a trajetória vertical em	
	função de $y$ . Parâmetros: $x=p_x=0$ e $p_y$ é calculado em função	
	de $x, p_x, y$ e $E = 0, 5$ . O período $T$ é especificado no gráfico. O	
	cálculo semi analítico foi feito para $T=4,443,$ pois o propagador	
	tem solução analítica para este valor específico (vide seção $3.2)$	68
4.9	Partes reais das trajetórias envolvidas no propagador diagonal, com	
	parâmetros $x = y = 0,24, T = 4,4$ e $E = 0,5$ . Sendo que o	
	outro parâmetro $\theta$ é indicado em cada trajetória esboçada. No lado	
	esquerdo apresentamos as trajetórias utilizadas como tentativa, e	
	no direito, as que de fato contribuem ao propagador. A trajetória	
	responsável pela descontinuidade vislumbrada na figura 4.5 é aquela	
	$com \theta = 160^{\circ}. \dots \dots$	70
4.10	Idem à figura 4.9, para as partes imaginárias das trajetórias. Para	
	$\theta = 80^{\circ}$ e $100^{\circ}$ as trajetórias estão muito próximas da origem e	
	portanto é difícil a sua visualização.	70

4.11	Quantidades físicas relacionadas às trajetórias contribuintes para o	
	módulo do propagador diagonal, em função do ângulo $\theta$ entre $p_x$ e	
	$p_y$ , com parâmetros $x=y=0,24,T=4,4$ e $E=0,5.$ Legenda:	
	$ ilde{H}_{ m real} \equiv { m HSR},   ilde{H}_{ m imag} \equiv { m HSI},  \mathcal{S}_{ m imag} \equiv { m S}_{ m I},  \mathcal{G}_{ m imag} \equiv { m G}_{ m I},   K\left({f z}^*,{f z},T ight) ^2 \equiv$	
	$K^2 \in \tilde{H}(x, y, p_x, p_y) \equiv HS.$	71
4.12	Partes reais das trajetórias envolvidas no propagador diagonal, com	
	parâmetros $x = y = 0$ , $T = 4,4$ e $E = 0,5$ . Sendo que o outro	
	parâmetro $\theta$ é indicado em cada trajetória esboçada. No lado es-	
	querdo apresentamos as trajetórias utilizadas como tentativa, e, no	
	direito, as que de fato contribuem para o propagador	72
4.13	Idem à figura 4.12, para as partes imaginárias das trajetórias	72
4.14	Idem a figura 4.11, exceto pelos parâmetros $x$ e $y$ que aqui valem 0.	73
4.15	Propagador em função de $x,\ y$ e $\theta$ calculado através da utilização de	
	trajetórias complexas: $T=4,2;E=0,5$ e o fator de reescala vale	
	0,15. Ressaltamos a existência de descontinuidades para os pontos	
	(x = 0, 24; y = 0, 24), (x = -0, 24; y = 0, 24) entre outros	74
4.16	Propagador em função de $x, y$ e $\theta$ . Cálculo Quântico: $T = 4, 2;$	
	E=0,5 e o fator de reescala vale 0,15	75
4.17	Propagador em função de $x, y$ e $\theta$ calculado pela aproximação de	
	órbita real: $T=4,2;E=0,5$ e o fator de reescala vale 0,15	75
4.18	Propagador em função de $x,\ y$ e $\theta$ calculado através da utilização de	
	trajetórias complexas: $T=4,6; E=0,5$ e o fator de reescala vale	
	0,15. Ressaltamos a existência de descontinuidades para os pontos	
	(x = 0, 24; y = 0, 24), (x = -0, 24; y = 0, 24) entre outros	76
4.19	Propagador em função de $x, y \in \theta$ . Cálculo Quântico: $T = 4, 6$ ;	
	E = 0, 5 e o fator de reescala vale $0,15$	77
4.20	Propagador em função de $x, y$ e $\theta$ calculado pela aproximação de	
	órbita real: $T = 4,6$ ; $E = 0,5$ e o fator de reescala vale 0,15	77
4.21	Propagador em função de $x, y$ e $\theta$ calculado pelo método das tra-	
	jetórias complexas: $T = 4,443; E = 0,3$	79
4.22	Propagador em função de $x, y$ e $\theta$ calculado pelo método das tra-	
	ietórias complexas: $T = 4.443$ : $E = 0.7$	79

4.23	Módulo do propagador diagonal ao quadrado em função $x$ e $p_x$ .	
	Parâmetros: $T=4,443,y=0$ e $p_y$ calculado em função das variáveis	
	$x, p_x$ e das constantes, $y = 0$ e energia $E = 0, 5, \dots$	80